试验设计

DESIGN OF EXPERIMENTS

下册

目　　录

（下册）

第四卷　因　子　设　计

第五卷　部分因子设计

第六卷　最小二乘法，概论及原理

等七卷　响　应　面　法

第四卷 因 子 设 计

概 述

《试验设计》教程的第四卷讲述二水平因子设计。这种在构造上十分简单的设计，具有很重要的实用价值。特别是过应用这些设计，能够用最经济的试验次数研究多个变量对响应的作用。

本教程首先介绍了研究响应的一般问题，而这种响应是许多控制变量（或称为因子）的函数，在控制变量中，有一些可能是定性的。另外一些可能是定量的，本教程的讨论说明了如何通过运用二水平因子设计，使估计控制变量的主要效应以及它们的交互作用成为可能。利用例题较详细地讨论了2^2、2^3和2^4因子设计，给出了设计的一般形式——2^k因子设计。提出了用于估计控制变量效应的耶茨算法和用于因子设计的方差分析表。为了揭示出与从随机误差中不能分辨的效应不同的真实效应，叙述了正态概率纸的用法，最后，讨论了区组设计的方法。

第十七讲 二水平因子设计

因子设计按下述步骤进行：对k个控制变量（因子）中的每一个都选定固定的水平或形式数，再按所有可能的组合进行试验。在研究k个应子对响应的影响时，这种设计是很有用的。而且，只要用二水平因子设计，即可确定因子的许多重要效应。当在控制的连续变量的全部范围内响应平滑地变化时，或当采用控制的定性变量的不同形式而响应以相同的形式变动时，这个结论是完全正确的。本讲特别着重在几何意义上描述了2^2因子设计。给出了主效应和二变量对响应的交互作用的估计及其相关的方差分析表。也讨论了在正交对应下每一估计效应的识别。

第十八讲 2^3 因 子 设 计

2^3因子设计要求：对$k=3$个因子中的每一个选择二个水平或形式，并对所有$2^3=8$种组合进行试验。从几何上看，设计在三维因子空间中提供了一个立方体顶点的坐标。给出了估计三个主效应、三个二因子间交互作用和一个三因子间交互作用的方法。讨论了效应的含义和定义。在例中，较详细地研究了重复因子设计及其方差分析表。说明了分析结果。

第十九讲 方差分析：2^4因子设计

2^4因子设计提供了四个主效应，六个二因子间交互作用、四个三因子间交互作用和一

个四因子间交互作用的估计量。详细地介绍了**耶茨算法**，这是用二水平因子设计得到估计量的一种快速方法。也得到了方差分析表中需要的每一个正交效应的单自由度平方和。讨论了在无法重复试验时获得方差σ^2的估计值的方法。还叙述了用正态概率纸检验效应的方法。

第二十讲　2^k 因 子 区 组 设 计

为了获得最小方差的试验环境，通常需将2^k因子设计分成小的试验子集（区组）。用区组间的对应（*Contrast*）与高次交互作用效应**混杂**的方法来实现2^k因子的分组。本讲介绍了生成区组和识别混杂效应的方法。采用耶茨算法和方差分析来研究二水平区组设计。给出了2^k因子设计的区组安排表。

× × ×

在本卷的每一讲中，请你回答一组选择题。或者请你解答问题。你可以对照随后的“答案”一节来检查你的答案。答案或讲课材料的进一步解释，可以在大多数章节中的“讨论”一节中找到。在每一讲中，有一些“问题”和“答案”。

第十七讲 二水平因子设计

摘 要

试验者常常要确定在他控制下的一定数量因子或变量ξ_1、ξ_2，…、ξ_k对响应y的效应。这些变量可能是定量的，如温度、压力和PH值，也可能是定性的，如催化剂的种类、药丸的形状或原材料的批号等。他可能还想探索每个定量变量的几个水平的效应，以及还要探索每一个定性变量几种形式的效应。因子设计是一种研究变量效应的极为有用的方法。利用这种设计，我们可选择第一个因子的n_1个水平（或形式），第二个因子的n_2个水平（或形式），依此类推，并对其所有的组合进行试验。

每个变量仅取两水平作试验的因子设计很有用处。这些二水平设计虽然简单，但却是十分重要，它能使数据得到非常有效的利用。此外，还可序贯地使用因子设计并可以形成更大试验方案的结构单元。

本讲中所举的例题是研究如何确定温度和PH值对响应的影响。这些变量中的每一个都保持两个水平，对所有的组合作试验提供了四个不同的试验工况，即四个处理。从几何上看，该设计由一个在二维因子空间中的四个点组成。我们将看到如何估计温度和PH值对响应的主效应及温度和PH值间的交互作用。在与其有关的方差分析表中，与处理平方和有关的三个自由度被分成三个估计效应的正交成分。

17—1—1　　　　　讨　　论

因子设计

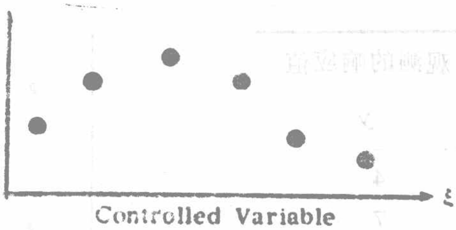
在开始对一个物理系统进行研究时，试验者试应找到对响应函数的简单解释。特别是当没有理论能解释作为一个在他控制下变量的函数的响应变化时，这种对响应函数的简单解释尤为重要（换言之，直接用物理系统的假设，很难导出数学模型）。因子设计是探索响应函数的一种非常有用的试验安排。这类设计可按下述步骤进行：对每一个控制变量（因子）选择一个固定数目的水平或形式，然后对所有因子的水平的全部组合进行试验。这样，因子1可能有l_1个水平，因子2可能有l_2个水平等等。一个完整的因子设计将由$l_1 \times l_2 \times \cdots \times l_k$个试验组成。

很明显，在多因子多水平的条件下，随着因子及水平数的增多，需要大量增加进行试验的次数及费用。然而，通常每个因子只要用二个水平，便可揭示出响应函数的最重要的特征。所得到的二水平因子设计需要$N=2^k$次试验，k是因子的数目。我们随后就会看到，二水平因子设计可为包含更多因子的试验方案提供结构单元，同时，当k增大时，可以使用这些设计中的一部分。

因子设计的最新颖之处是：在研究中的k个控制变量是**同时**变化的。然而试验者往往一次只研究一个变量。因子设计是一种使所有k个因子在一定数目的水平或形式上同时变化的试验方案。值得注意的是，从2^k因子设计的2^k次试验中所得到的信息与把每个变量独立地用2^k次试验进行研究所需的$k \times 2^k$次试验所得的信息相等。此外，因子设计还提供了k个变量间交互作用的信息，当采用每次只试验一个因子的研究时，这种信息是不可能得到的。

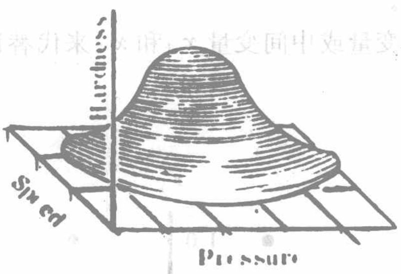
17—1—2 问　　题

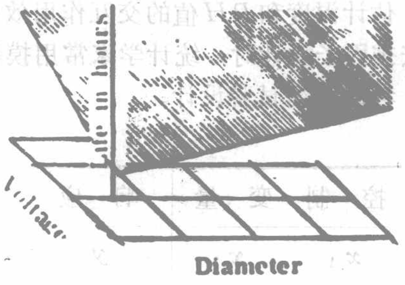
1、给出控制变量 ξ 在不同场合下记录的下列观测值 $y=\eta+\varepsilon$ 在坐标系中的点，要求至少给出三种真实响应的数学模型。



2、如果记录数据的如上题所示，我们通常假定响应函数在所研究的控制变量变化范围内是________，观测误差是________。

3、在本讲中，等值线图用以说明响应是如何随两个控制变量（温度和浓度）的变化而变化的。两个另外的响应曲面如下图所示。用草图近似画出这两种响应面的等值线。





4、解释表达式 $\eta=f(\xi_1,\xi_2)$ 中符号的意义。

5、在下面三个不同的试验计划中，估计温度对响应的效应（观测到的响应值直接列在温度值线的上面）。

a、37 (180°)　41 (190°)　温度

b、28 (2°)　23 (5°)　温度

c、4, 6, 8 (50°)　9, 10, 8 (55°)　温度

6、在上述的第5题 C 中，请你构造一个温度的真实效应的95%区间描述。

7、对二水平因子设计，用下述哪一个表达式来估计效应？

□ a、$\overline{y}_{+}-\overline{y}_{-}$.

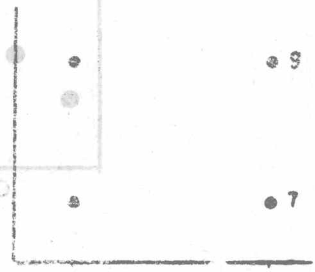
□ b、$\left(\frac{1}{n_{+}}+\frac{1}{n_{+}}\right)S^{2}$.

□ c、$\overline{y}$.

□ d、上面3个都不是.

8、给您来自二水平因子设计下列四个试验条件及记录下来的响应值：

控制变量		观测的响应值
温度	PH	y
35°	4.0	4
40°	4.0	7
35°	4.5	6
40°	4.5	9



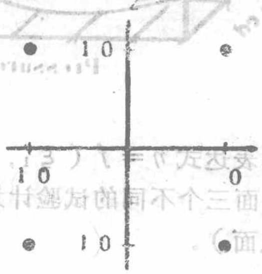
______ a、估计温度的主效应。

______ b、估计PH值的主效应。

______ c、估计温度和PH值的交互作用效应。

9、在安排因子设计时，统计学家常用摸拟变量或中间变量x_1和x_2来代替试验者采用的控制变量。考虑下列试验设计。

控制变量		响应
x_1	x_2	y
−1	−1	8
+1	−1	4
−1	+1	10
+1	+1	8



a、在上面的图形中的适当位置上注明响应的大小。

b、估计x_1的主效应。________

c、估计x_2的主效应。________

d、估计x_1x_2的交互作用效应。________

10、标明下列陈述的内容是对还是错。交互作用效应：

……… a 、当改变x_2时，能测量 x_1效应的变化。

……… b 、当改变x_1时，能测量 x_2效应的变化。

……… c 、当它存在时，排除了估计主效应的必要。

……… d 、是一种加在主效应上的响应现象。

……… e 、是通过两个算术平均值的差进行估计的。

……… f 、只要主效应值小，它也小。

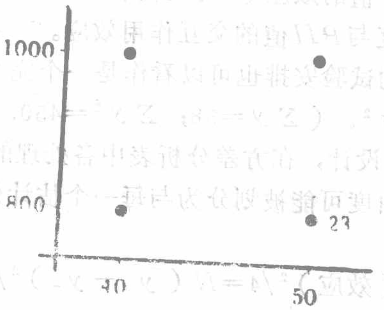
……… g 、当它为正时，表明控制变量的最优协同作用。

11、给出下列数组，试在高速搅拌和高浓度试验条件下，写出其中所缺的一个响应值，条件是搅拌和浓度的交互作用为：

……… a 、零。

……… b 、正。

……… c 、负。



12、二变量二水平因子设计的4次试验（2^2因子设计），在 x_1x_2 坐标系中形成一个

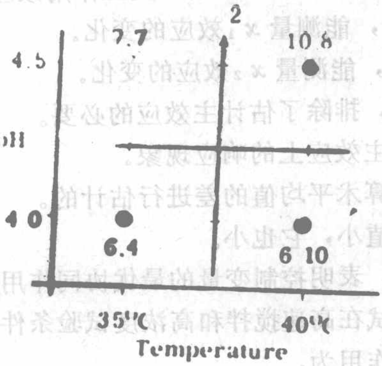
□ a 、三角形

□ b 、正方形

的顶点。

13、已知下列重复试验的二变量二水平因子设计（2^2因子设计）：

温　度	PH	x_1	x_2	y
35	4.0	－	－	6，4
40	4.0	＋	－	6，10
35	4.0	－	＋	7，7
40	4.0	＋	＋	10，8



______a、估计温度的效应（x_1效应）。

______b、估计PH值的效应（x_2效应）。

______c、估计温度与PH值的交互作用效应。

14、第13题给出的试验安排也可以看作是一个完全随机的试验，它包括$k=4$个处理。试用方差分析表估计σ^2。（$\Sigma y=58$；$\Sigma y^2=450$.）

15、对于2^k因子设计，在方差分析表中各处理的平方和有3个自由度。对于这种二水平因子设计，这些自由度可能被划分为与每一个估计效应相关的单个自由度，估计效应平方和的方程式为：

效应平方和$=N$（效应）$^2/4=N(\overline{y}_+-\overline{y}_-)^2/4$。式中的$N=$观测值总数。试用第13题的数据确定温度和$PH$值的主效应平方和以及温度与$PH$值的交互作用效应平方和。

16、a．检验“没有处理效应”的假设。

b．检验“温度主效应等于零”的假设。

17—1—3 答 案

1、下面是六种可能的模型：

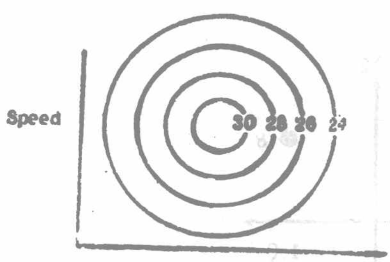
a）$\eta=\eta_0$； a＝常数　b）η＝一条二次曲线　c）η＝正弦波

d）η＝直线　e）η＝一条上升的指数曲线再按一条下降的指数曲线　f）一组超越的响应曲线

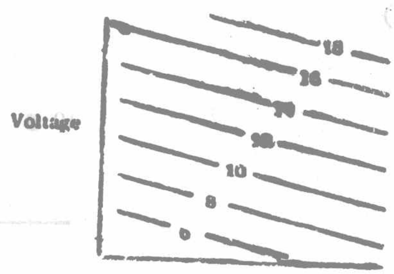
选择数学模型来代表数据取决于试验者原来所掌握的知识。通常有几种模型可供采用，一般常常从最简单的开始。

2、**平滑**（或至少是具有低阶导数）；**随机事件**（希望是$NID(O, \sigma^2)$分布）。

3、



峰形等值线



平面等值线

4、响应变量η是二个控制变量ξ_1和ξ_2的函数。

5、a）估计的温度效应＝4。

b ）估计的温度效应＝－5。

c ）估计的温度效应＝$\overline{y}_+ - \overline{y}_- = 9 - 6 = 3$。

注意：因子设计中，一个因子的**效应**是度量控制变量从最低到最高值变化时其响应的总变化。我们并不度量每一个单位（在此处是摄氏度）引起的变化。当然，如果一定要换成一个单位，那也是很简单的。当控变量的两**水平**是一些定性变量的两种形式时，用一个单位来度量是值得怀疑的。

6、估计的温度效应＝$\overline{y}_+ - \overline{y}_- = 3$.

$$V(\overline{y}_+ - \overline{y}_-) = \left(\frac{1}{n_+} + \frac{1}{n_-}\right)\sigma^2 = \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right)\sigma^2;$$

$S^2 = 2.5$； 且 $\nu = 4$.

对于真实效应的95%置信限可由下式给出：

$$(\overline{y}_+ - \overline{y}_-) \pm t_{\nu,0.025}\sqrt{\left(\frac{1}{n_+} + \frac{1}{n_-}\right)S^2}; \quad t_{4,0.025} = 2.78.$$

$$3 \pm 2.78\sqrt{\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right)2.5^2} = 3 \pm 3.6.$$

$$P_{rob}\{-0.6 \leqslant \text{真实的温度效应} \leqslant 6.6\} = 0.95$$

7、a（$\overline{y}_+$＝控制变量 ξ 取高（＋）水平时响应的算术平均值；$\overline{y}_-$＝在控制变量 ξ 取低（－）水平时的算术平均值。）

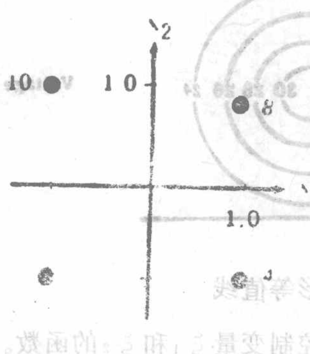
（答案 b 是效应的方差。）

8．a ）估计的温度效应＝$\dfrac{9+7}{2} - \dfrac{6+4}{2} = 8 - 5 = 3.0$。

b ）估计的PH值效应＝$\dfrac{9+6}{2} - \dfrac{7+4}{2} = 7.5 - 5.5 = 2.0$.

c ）估计的温度和PH值交互作用效应＝$\dfrac{9+4}{2} - \dfrac{7+6}{2} = 6.5 - 6.5 = 0$.

9、a ）



b ）x_1的主效应＝6－9＝－3。

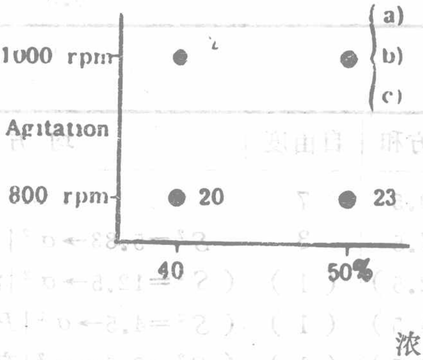
c ）x_2的主效应＝9－6＝3。

d ）x_1和x_2的交互作用效应＝8－7＝1.0

10、a ）对；b ）对c ）错；d ）对；e ）对；f ）错；g ）对。

（当x_2改变时，交互作用效应度量控制变量x_1的主效应的变动情况，**反之亦然**。交互作用是附加在主效应基值上的一种响应现象。交互作用可为正，也可为负，可大也可小，它与每一个主效应的符号和大小无关。正的交互作用是一种增效效应，页的交互作用是一种互相抵消的效应。）

11、



27

a)

b) 任何比27大的响应

c) 任何比27小的响应

12、b（四个试验条件可看作是在控制变量取值所定义的空间，即在因子空间内得到的正方形的顶点。）

13、 ）温度（或x_1）的主效应$=\frac{34}{4}-\frac{24}{4}=2.5$.

b ）PH值（或x_2）的主效应$=\frac{32}{4}-\frac{26}{4}=1.5$。

c ）温度和PH值（或x_1x_2）的交互作用效应$=\frac{28}{4}-\frac{30}{4}=-0.5$。

14、

项　目	平方和	自由度	均方值
自然平方和	450.0	8	
矫 正 因 子	420.5	1	
矫正平方和	29.5	7	
处理平方和	17.5	3	
残差平方和	12.0	4	$S^2=3.0\to\sigma^2$

处理平方和$=\frac{1}{2}\left[(10)^2+(16)^2+(14)^2+(18)^2\right]-$矫正因子$=438-420.5=17.5$。

15、效应平方和$=N$（效应）$^2/4$，式中，$N=$观测值总数。

项　　　　目	平方和	自由度
温度效应的平方和$=8\times2.5^2/4$	12.5	1
PH值效应的平方和$=8\times1.5^2/4$	4.5	1
温度和PH值交互作用效应的平方和 $=8\times0.5^2/4$	0.5	1

16.

项　　目	平方和	自由度	均 方 值
矫正平方和	29.5	7	
处理平方和	17.5	3	$S^2=5.83\to\sigma^2\mid\tau_j=0$
（温度平方和）	（12.5）	（1）	（$S^2=12.5\to\sigma^2\mid$温度主效应$=0$）
（PH值平方和）	（4.5）	（1）	（$S^2=4.5\to\sigma^2\mid PH$值主效应$=0$）
（温度与PH值交互作用平方和）	（0.5）	（1）	（$S^2=0.5\to\sigma^2\mid$交互作用效应$=0$）
残差平方和	12.0	4	$S^2=3.0\to\sigma^2$

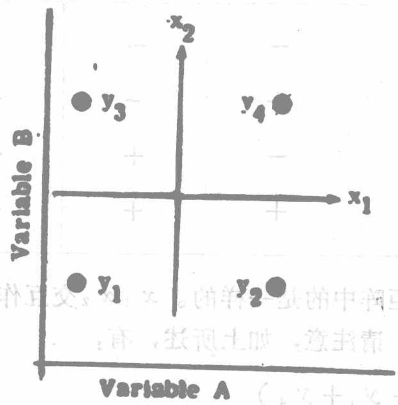
a）$F_{3,4}=5.83/3.0=1.94$。因为$P_{rob}\{F_{3,4}\geqslant6.59\}=0.05$，我们可以发现$F_{3,4}$不是罕见事件，因此，没有处理效应的假设与数据不矛盾。

b）因为$P_{rob}\{F_{1,4}\geqslant7.71\}=0.05$，所以与单独效的应有关的$F_{1,4}$比值是正常的，与零效应有关的三个假设与数据不矛盾。（因为F比值的均方值分子中具有$(k-1)=3$个自由度，所以$F_{(k-1)},\ \nu$比值可能是不显著的，而F_{1},ν比值之一是显著的。）因为F检验可能涉及到在k个处理中作统计显著的单自由度比较，所以它有时被称为**多用途**检验。与此同时，进行以单自由度为主的F检验导至多重比较的困难。

因子设计方案的主要目的是**估计**效应。如果我们发现无法拒绝效应为零的假设，这就在实际上意味着我们缺少数据，但并**不**是说效应事实上等于零。

17—2—1　讨　　论

通常，我们考虑下述的2^2因子设计。（观测的响应值的下标仅仅是为了方便，因为四种实验情况应按随机次序作试验）。



设计矩阵		观测值 y
x_1	x_2	
-1	-1	y_1
$+1$	-1	y_2
-1	$+1$	y_3
$+1$	$+1$	y_4

根据变量x_1和x_2，很容易对试验设计作出解释。x_1－1和＋1水平对应于变量A的低、高水平。同样，x_2对应于变量B。可以在几何上把试验设计的四个点看成处在x_1和x_2组成的空间内。四个点的坐标给出了**设计矩阵**。

现在来研究y_2-y_1这个统计量。从这个差值估计x_1对响应的主效应（或变量A对响应的主效应）。必须注意，这个差不是由变量x_2造成的，因为两个观测值是在x_2不变时测得的。下面，考虑统计量y_4-y_3。这是在消除了变量x_2的作用后变量x_1效应的另一种估计。这两个统计量的算术平均值$\frac{1}{2}[(y_2-y_1)+(y_4-y_3)]$提供了$x_1$效应的较好的估计。我们注意到$x_1$效应的估计可以更方便地写为$\overline{y}_+-\overline{y}_-$，其中下标“＋”和“－”分别表示$x_1$在高（＋）、低（－）水平时的观测值。同理，$x_2$主效应的最佳估计是由$\frac{1}{2}[(y_4-y_2)+(y_3-y_2)]=\overline{y}_++\overline{y}_-$给出的，在这两个算术平均值符号中的下标涉及到$x_2$的水平。虽然使用了同样的四个观测值，但两个主效应估计之间是**无关的**。x_1的主效应估计值的大小和符号并不受x_2效应估计值的大小和符号的影响。

我们用下述现象来定义交互作用效应：当改变变量B时，变量A的主效应不能保持不变。我们通过在x_2的高水平下估计x_1效应的y_4-y_3与在x_2的低水平下估计x_1效应的y_2-y_1两者的差值来衡量这一现象。如果这一差值$(y_4-y_3)-(y_2-y_1)$是零，则我们把交互作用估计为零。由于某些原因，我们使用统计量$\frac{1}{2}[(y_4-y_3)-(y_2-y_1)]$来估计交互作用，这里的系数$\frac{1}{2}$把这一估计再次地转换成两个算术平均值的差。即：

$$\frac{y_4+y_1}{2}-\frac{y_5+y_2}{2}=\overline{y}_+-\overline{y}_-.$$

为了迅速认出交互作用效应以及主效应的$\overline{y}_+$和$\overline{y}_-$中的观测值，可以利用设计矩阵。（删去1，仅保留符号）。

设计矩阵		观测值 y	效应矩阵		
x_1	x_2		x_1	x_2	x_1x_2
$-$	$-$	y_1	$-$	$-$	$+$
$+$	$-$	y_2	$+$	$-$	$-$
$-$	$+$	y_3	$-$	$+$	$-$
$+$	$+$	y_4	$+$	$+$	$+$

在**效应矩阵**中，主效应列中的正、负号与设计矩阵中的是一样的。x_1x_2交互作用列的正、负号可以方便地通过x_1和x_2符号的乘积得到。请注意，如上所述，有：

$$x_1\text{的主效应}=\frac{1}{2}(-y_1+y_2-y_3+y_4)$$

$$x_2\text{的主效应}=\frac{1}{2}(-y_1-y_2+y_3+y_4)$$

$$x_1x_2\text{的主交互作用效应}=\frac{1}{2}(y_1-y_2-y_3+y_4)$$

每一效应都是由统计量$\overline{y}_+-\overline{y}_-$的形式估计的，各效应的大小和符号彼此无关。方差$V(\overline{y}_+-\overline{y}_-)=(\frac{1}{n_+}+\frac{1}{n_-})\sigma^2=4\sigma^2/N$，$N$是观测值的总数(对二水平因子设计而言，$n_+$和$n_-$均等于$N/2$)。

正　交　对　应

请考虑线性统计量$l_1=a_1y_1+a_2y_2+\cdots a_Ny_N$。如果$\Sigma a_i=0$，则这个统计量称为**对应**。现在请考虑第二个线性统计量$l_2=b_1y_1+b_2y_2+\cdots+b_Ny_N$。其中$\Sigma b_i=0$。若$\Sigma a_ib_i=0$，则这二个对应称为**正交的**。

我们现在来看看由二水平因子产生的主效应和交互作用效应的估计值：

$$x_1\text{主效应的估计值}=-\frac{1}{2}y_1+\frac{1}{2}y_2-\frac{1}{2}y_3+\frac{1}{2}y_4,$$

$$x_2\text{主效应的估计值}=-\frac{1}{2}y_1-\frac{1}{2}y_2+\frac{1}{2}y_3+\frac{1}{2};$$

$$x_1x_2\text{交互作用效应的估计值}=\frac{1}{2}y_1-\frac{1}{2}y_2-\frac{1}{2}y_3+\frac{1}{2}y_4.$$

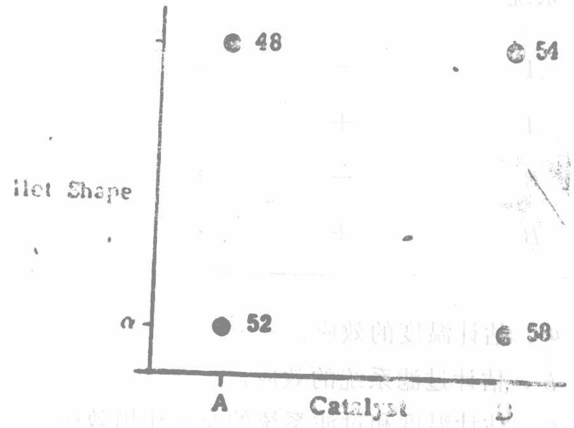
注意，在每一个表达式中，观测值系数之和等于零。也注意到在任何两个对应之间常数

的叉积之和为零。因此，我们的三个效应是互为正交对应的。

在方差分析表中，用k个处理(或观测值)的算术平均值所构成的每个对应列出了一个单自由度的平方和。如果我们构造出$k-1$个正交对应，(如我们在这个问题中所述的)，则各个对应的平方和的总和将等于处理平方和。对应的平方和由$(\Sigma a_i y_i)^2/\Sigma a_i^2$给出。因此，通过简单的代数运算之后，可得效应的平方和$=N$(效应)$^2/4$，式中的N是观测值总数。

17—2—2 问　　题

1．因子设计决不要求把控制变量限制在如温度、速度、浓度一类的定量变量上。也可以应用定性变量。在下例中，两种催化剂A和B以及两种不同形状的催化剂载体颗粒α和β也被用来研究决定它们对产品转换率的效应。



催化剂	载体颗粒	变量代号 x_1	x_2	转换率 y
A	α	$-$	$-$	52
B	α	$+$	$-$	58
A	β	$-$	$+$	48
B	β	$+$	$+$	54

________ a、估计催化剂效应。

________ b、估计载体颗粒的效应。

________ c、它们有交互作用吗？

2．如下所示的2^2因子试验中，同时采用定性的和定量的控制变量。试验是用来确定在两种温度下和经两种不同过滤系统处理后残留在水中的苯酚杂质。