SHIYAN SHEJI YU SHUJU CHULI

实验设计与数据处理

张成军　主编

序号 \ 列号	1	2	3	4	5	6
1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	2	2	2
3	1	2	2	1	1	2
4	1	2	2	2	2	1
5	2	1	2	1	2	1
6	2	1	2	2	1	[illegible]
7	2	2	1	1	2	[illegible]
8	2	2	1	2	1	[illegible]

化学工业出版社

SHIYAN SHEJI YU SHUJU CHULI

实验设计与数据处理

张成军　主编

郭继伟　魏绪树　副主编

列号 / 序号	1	2
1	1	1
2	1	1
3	1	2
4	1	2
5	2	1
6	2	1
7	2	2
8	2	2

化学工业出版社

·北京·

图书在版编目（CIP）数据

实验设计与数据处理/张成军主编. —北京：化学工业出版社，2009.9
ISBN 978-7-122-06374-8

Ⅰ. 实… Ⅱ. 张… Ⅲ. ①试验设计（数学）②实验数据-数据处理 Ⅳ. O212.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2009）第 125736 号

责任编辑：刘丽宏　　　　装帧设计：刘丽华
责任校对：李　林

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号　邮政编码 100011）
印　　装：北京市兴顺印刷厂
787mm×1092mm　1/16　印张 11½　字数 294 千字　　2009 年 10 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686）　售后服务：010-64518899
网　　址：http://www.cip.com.cn
凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定　　价：29.00 元　　

序

实验设计与数据处理在各个科学领域的实验研究中起着重要的作用，科学合理的实验设计可以使实验达到事半功倍的效果，而严密准确的数据处理则可以帮助研究者从纷乱的数据中寻找出事物的内在规律。因此，对于以实验研究为主的各学科专业的高校学生来说，掌握实验设计与数据处理方法是十分必要的。

在众多的实验研究领域中有一类实验的特点是，影响因素种类繁多且每一因素往往要考虑多个取值，对于这种多因素多（取值）水平影响条件下对某一指标（或某几项指标）值进行优化，按常规的实验方法往往要进行数目庞大的遍历实验后，才能找出影响规律，以确定最显著的影响因素及水准。这对于许多的实验体系当影响因素过多和/或各因素取值水准划分过细时，进行遍历实验研究通常是难以实现的。例如，在新牌号高温合金（合金化元素可多达十余种）的研制过程中，其最佳成分组合的选择及熔配工艺参数的确定等，便具有这样的实验特点。而最早始于农业实验研究的正交实验便是这样一种科学的实验设计方法，即从试验次数尽可能少的实验中获取影响因素及水准最显著的信息。正交实验设计已成为包括材料科学、化学工程及生命科学等学科工程领域在内的重要的、高效率的科学实验方法。

张成军教授开设《正交实验设计》等课程以来，已积累了二十多年的教学经验。作者编著的这本以正交实验分析为主的《实验设计与数据处理》教科书，既考虑到了作为教材的基础理论性，给出了比较严谨的实验方法的数学描述，又省略了过于繁杂的数学推导。本书兼顾了理论分析与实际应用，书中附有相当数量的例题和习题，这既可使在校学生通过课程的学习获取较强的相关理论知识，也便于研究人员的自学参考。本书从待求的未知目标函数出发，通过数学化简，然后利用实验设计指导实验方案，经实验获取数据后再用回归的方法得出目标函数的解析表达式。这就构成了一个从未知到已知、完整的实验研究过程。这种首尾呼应是本书编写的一个特点，也使本书的内容形成了一个相对完整的正交优化设计体系。

相信本书的出版会使读者从中获益，使他们在实验研究中尽可能地减少盲目性，增加科学性，并高效率地完成科学实验工作。

中国工程院院士 傅恒志教授

傅恒志

前 言

在工农业生产中，经常要进行技术革新以提高产品质量，降低生产成本，从而获得更高的经济效益。在这一过程中常常要遇到从众多的参数中选择优化组合，得到最优效果的情况。对这种情况，传统的方法是采用盲人摸象的方法，做若干个实验并从中选择效果较好的参数组合。这种方法有两个致命的缺点：一是实验量很大，往往要做几十个、上百个实验；二是难以选出最优的参数组合。

比如，如果在实验中要考察 10 个参数，其中有 5 个参数要取两个不同的值，另 5 个参数要取三个不同的值，这在工厂、农业、医药等行业是经常遇到的。此时，全部的实验组合为 7776 种，而做这么多的实验一般是不可能的。但采用传统的方法除了完全实验外，是无法保证得到最优参数组合的。

正交设计法是解决这种问题的有力武器。这种方法最早用于农业实验，随着对这种方法研究的深入，现在也广泛地用于各个领域的多因素优化实验。采用这种方法可以用较少的实验次数从众多的参数中找出最优参数组合，正确地使用该方法可以达到快、好、省的效果。正交设计还具有受系统误差、偶然误差及操作失误干扰小的特点。并且该设计法对实验数据的处理有一套独特的方法，处理中可计算实验误差的大小，可以对结果的可靠性做出分析，对指导实际生产具有重要的意义。

本书根据编者二十多年的教学和科研实践，由浅入深，对正交设计的各种实验和数据处理方法做了翔实的介绍，力求做到既讲清原理又注重实用。

编写本书时，注意避免太偏向理论化，过多地讲解深奥的数学原理和推理，同时也对各种方法从理论上给出恰当的解释，并辅以大量应用实例，以方便读者理解、应用。在本书的前四章中详细讨论了正交设计法、相应的数据处理方法以及正交设计法的灵活应用。在第 5 章中讨论了常用的回归方法以及正交设计数据的模型化处理，从而使本书构成了一个完整的体系。本书可作为大专院校涉及实验较多的各专业学生的教材，也可以作为在工农业生产中涉及实验较多的技术人员以及科研人员的参考书。

本书的第 1 章至第 3 章由佳木斯大学张成军编写；第 4 章由南京交通技师学院李晶编写；第 5 章由佳木斯大学郭继伟编写；附录部分由佳木斯大学魏绪树编写。全书由张成军统稿，由哈尔滨工业大学徐达鸣教授主审。

由于编者的水平所限，书中不当之处难免，恳请广大读者批评指正。

编　者

目录

第1章 基础知识

第2章 3水平正交设计

第3章 2水平正交设计

第 4 章 多水平正交设计及正交设计的灵活运用

第 5 章 回归分析

附　　录

第1章 基础知识

1.1 基本概念

所谓实验就是根据研究的目的，利用科学仪器与设备，人为地控制或模拟自然现象，排除干扰，突出主题和主要因素，在有利的条件下研究自然规律的方法。

尽管在实验条件下控制了一些干扰因素，但由于仪器精度、人为因素及实验条件的限制，有些因素仍然是无法精确控制的，有时也没有必要对其精确控制，这就会出现误差，使实验结果偏离真值。

例如：在某材料的淬火热处理实验中，要将温度控制在950℃保温一段时间，但由于控温仪表的精度及供电电压的变化等情况的制约，温度会在设定的温度上下的某一范围内波动，这就会造成实验结果的波动。

又如：铸造生产中要控制合金的化学成分，但由于原材料化学成分的变化及烧损等原因，成分会发生波动，尽管各炉的配料相同，不同炉次的化学成分也会不同。

如何利用有效的实验安排，将这种波动对结果的影响降到最低限度，就要借助于科学的试验设计方案以及采取有效的控制实验误差的方法。本章及第 2 章和第 3 章所讲的内容可以提供一种解决这类问题的方法——正交设计法。

控制实验误差的方法常用 Fisher 提出的三原则。Fisher 根据实验误差的控制理论，提出了实验中应遵循的三项原则。

① 重复性原则（repetition）：根据大数定律可知，实验的重复次数越多，其平均值越接近于真值。通过重复实验，然后取平均值的方法可有效地减少误差。

② 随机化原则（randomization）：将实验顺序随机化，这样就可以使系统误差随机化，从而避免某些有规律的系统误差与实验规律相叠加而造成的对客观规律的歪曲。对于这一点，将在 1.1.4 节中详细介绍。

③ 局部控制原则（local control）：局部控制原则实际上就是将不同的实验条件均匀化，避免由于实验条件的不同引起的系统误差。用实验设计的术语来说，就是正交分割设计，这将在 3.5 节中给出相关的理论分析。

为了便于以后的学习，先介绍一些基本概念。

(1) 目标函数 在实验中一般要先确定一项或几项研究指标，然后考察实验中这些指标

值随试验参数的变化情况。

例如：① 在渗硼热处理实验中主要考察渗层厚度和渗层硬度；

② 在新材料研制中，主要考察材料的强度、韧性、伸长率、耐蚀性、耐磨性等；

③ 研究焊缝质量时，主要考察裂纹深度、长度、数量等；

④ 铸件生产时，主要考察铸件成品率等；

⑤ 水稻新品种试验中，主要考察其亩产量及抗病性等；

⑥ 某种新药研制中，主要考察对疾病的治愈率、副作用的大小等；

⑦ 车床车削零件时，主要考察的精度、生产效率等。

上述各项都是在具体实验中要考察的指标。在本书中，把在实验中要考察的指标抽象出来统称为目标函数。这样可避免过多地涉及专业知识，使本书的内容具有一定的通用性。

在一批实验中，有时要同时考察多个目标函数，对几个目标函数同时进行优化。此时，可以构造一个目标函数，这个目标函数是要考察的几个目标函数的加权代数和。各目标函数的权重要遵循一定原则加以确定，该方法将在2.3节中给予简单介绍。

有时要考察的目标函数很难量化，这时可采用专家评分的方法进行量化，例如：要考察某种焊条的发烟量，在焊接现场难以测量，就可用评分的方法解决。如可以通过有经验的专家目测，把烟尘较小的评为30，烟尘较大的评为90，烟尘中等的根据实际情况评定其分值，如45、60或68等。

(2) 因素 确定了目标函数后，就要确定哪些参数会影响目标函数。一般说来，一个实验中影响目标函数的参数会有很多，其中有些参数或由于前人对其做了大量的实验研究而有了足够的了解，或限于实验条件而在实验中不准备研究其对目标函数的影响，通常对这些参数在一批实验中只各取一个固定值。而对另外一些参数则要取几个不同的值分别进行实验以比较其变化对目标函数的影响情况。例如：

① 渗硼热处理实验中，渗硼温度、保温时间、介质成分等都会对渗硼厚度（目标函数）有影响。但若在一批实验中使用相同的介质材料，考察温度及保温时间对渗硼厚度的影响，如温度分别取850℃，900℃，950℃；保温时间分别取3h，6h，9h等。

② 在研究焊缝裂纹时，对同一种母材来说，焊条材料、焊接电流、母材初始温度、环境温度、气体对流程度等都会影响裂纹的大小和数量。在一批实验中可以固定其他因素，只考虑不同焊条材料、不同焊接电流对焊缝裂纹的影响。

③ 在研制新的中药时，主要考虑各种中药成分、炮制方法等。

④ 研究机床加工效率时，主要考虑车刀的形状、主轴转速、走刀量等。

这种在实验中要进行变化而取几个不同值的参数称为因素。

对于因素应当注意以下两点：

① 实验中不变的参数不是因素。如上述①中的渗硼介质、母材温度和环境状况等都不是因素。

② 取不同的值可以是具体的数值，也可以是不可量化的变量。如温度、时间、电流等因素可以取不同的具体数值，称这类因素为数值因素；而在制药中采用山参、人工种植人参、甲地人参、乙地人参等，它们之间并没有什么数量关系；又如在研究不同的孕育剂的孕育效果时，75%Si-Fe，Re-Si，Si-Ca等孕育剂之间也没有数量关系；在研究车床生产效率时，被车件是铸铁、铸钢、铜合金等。这类不能取具体数值的因素称为标示因素。

(3) 水平 实验中，某一因素所取的每一不同值称为该因素的一个水平。

如：在热处理中保温温度取850℃、900℃、950℃等称为因素保温温度的三个水平。

水平可以用因素所取的不同值表示，如：850℃水平、900℃水平、950℃水平等，但为了方便起见在实验设计中一般是用水平代号来表示不同的水平。如可用1、2、3…l等表示

具体水平。水平代号所代表的具体值可以任意指定，不必按顺序由大到小或由小到大排列。例如可用水平代号 1、2、3 分别代表 900℃，950℃，850℃。

经过以上定义后，就可把实验过程理解为：获取各因素的不同水平组合条件下（如：第 1 因素取第 2 水平；第 2 因素取第 3 水平；……）目标函数值的过程。

通过实验获得目标函数值并不是目的，这只是整个研究过程中的一小步。关键的问题是如何利用这些目标函数值找出那些隐蔽在其中的目标函数与因素之间的关系，或找出一些具有规律性的东西，反过来指导实际生产或为进一步研究提供参考（即所谓的预测与控制）。

有了上述基本概念后。就可以着手建立正交设计系统了。

1.2 目标函数及其简化

1.2.1 目标函数的一般表达式

若在一批实验中要考虑的因素有 m 个，分别记为 x_1，x_2，…，x_m。把目标函数记为 F，目标函数与各因素间的函数关系可表示为

$$F=F(x_1,x_2,\cdots,x_m) \tag{1-1}$$

可以把 x_1，x_2，…，x_m看成是 n 维空间的点。F 是这些点的函数。现将 x_1，x_2，…，x_m记为 X，则有

$$F=F(X) \tag{1-2}$$

这种函数关系虽很笼统，但可对其进行简化，这有助于对实验设计的正确理解。本书的特点之一就是从现在的未知目标函数开始，利用实验设计的方法进行实验安排，经过实验取得若干目标函数值，进行一系列的数据处理，最后得到一个具体的目标函数表达式，也就是从未知走向已知。

1.2.2 目标函数的展开式

根据数学分析的知识，可以将目标函数展开成泰勒（Tailor）级数，若将其在 $X=X_0$ 的某点（实验范围内）展开

$$F(X)=F(X_0)+\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j!}\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i}\Delta x_i\right)^j F(X)|_{X=X_0} \tag{1-3}$$

式中，m 为因素的个数；j 为 $F(X)$ 的第 j 次展开式。

式（1-3）中方括号上的 j 次方只是一种运算的表示方法，不能进行运算，主要是用这种方法可使表达简化。在应用时需要将其展开后再进行运算。如对于 $m=3$，$j=2$ 时，可以得到以下各项

$$\frac{1}{2!}\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i}\Delta x_i\right)^2 F(X)\,|_{X=X_0}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\Delta x_1+\frac{\partial}{\partial x_2}\Delta x_2+\frac{\partial}{\partial x_3}\Delta x_3\right)^2 F(X)\,|_{X=X_0}$$

$$=\frac{1}{2}\Big[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}(\Delta x_1)^2+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}(\Delta x_2)^2+\frac{\partial^2}{\partial x_3^2}(\Delta x_3)^2+2\frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_2}\Delta x_1\Delta x_2+$$

$$2\frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_3}\Delta x_1\Delta x_3+2\frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_3}\Delta x_2\Delta x_3\Big]^2 F(X)\,|_{X=X_0}$$

$$=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1^2}|_{X=X_0}(\Delta x_1)^2+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2^2}|_{X=X_0}(\Delta x_2)^2+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_3^2}|_{X=X_0}(\Delta x_3)^2+$$
$$\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1\partial x_2}|_{X=X_0}\Delta x_1\Delta x_2+\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1\partial x_3}|_{X=X_0}\Delta x_1\Delta x_3+\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2\partial x_3}|_{X=X_0}\Delta x_2\Delta x_3$$

在数学分析中对一个函数进行展开时要求讨论该函数的可展性，也就说要求被展函数具有 $n+1$ 阶的连续偏导数。但对于一个实际问题，不一定具有 $n+1$ 阶的连续偏导数，也就是说不一定能对其进行展开。一个函数可展的本质是该函数是足够光滑的，其光滑程度越高，所具有的连续偏导数的次数就越高。

实际上对于一个特定的应用问题，尽管其实际的目标函数在数学意义上可能是不可展的，但总可以用一个足够光滑的近似的函数来代替实际的目标函数。这在工程实践中是可行的。因为对于一个实际的问题，很多时候不可能也没必要非求出目标函数真值不可。通过实验求出的都是目标函数的近似值。既然如此，也就没有必要非要研究确切的目标函数。也就是说，只要研究一个与目标函数足够近似的可展函数就可以了。对于这个函数就可以进行泰勒（Tailor）展开了。

式（1-3）详细的表达可写成以下形式

$$F(X)=F(X_0)+\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{j!}\left[\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i}(x_i-x_{i0})\right]^j F(X)|_{X=X_0}$$
$$=F(X_0)+\left[\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i}(x_i-x_{i0})\right]F(X)|_{X=X_0}+\frac{1}{2!}\left[\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i}(x_i-x_{i0})\right]^2 F(X)|_{X=X_0}+\cdots$$
$$+\frac{1}{k!}\left[\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i}(x_i-x_{i0})\right]^k F(X)|_{X=X_0}+\cdots$$
$$=F(X_0)+\left[\frac{\partial F(X)}{\partial x_1}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})+\frac{\partial F(X)}{\partial x_2}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})+\cdots\right.$$
$$\left.+\frac{\partial F(X)}{\partial x_m}|_{X=X_0}(x_m-x_{m0})\right]+$$
$$\frac{1}{2!}\left[\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1^2}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})^2+\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2^2}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})^2+\right.$$
$$2\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 x_2}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})(x_2-x_{20})+\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_3^2}|_{X=X_0}(x_3-x_{30})^2+$$
$$2\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 x_3}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})(x_3-x_{30})+2\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 x_3}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})(x_3-x_{30})+\cdots$$
$$\left.+\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_m^2}|_{X=X_0}(x_m-x_{m0})^2\right]+\cdots$$

$$F(X)=F(X_0)+\left[\frac{\partial F(X)}{\partial x_1}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})+\frac{1}{2!}\frac{\partial F^2(X)}{\partial x_1^2}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})^2+\right.$$
$$\left.\frac{1}{3!}\frac{\partial F^3(X)}{\partial x_1^3}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})^3+\cdots+\frac{1}{j!}\frac{\partial F^j(X)}{\partial x_1^j}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})^j+\cdots\right]$$
$$+\left[\frac{\partial F(X)}{\partial x_2}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})+\frac{1}{2!}\frac{\partial F^2(X)}{\partial x_2^2}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})^2+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{3!}\frac{\partial F^3(X)}{\partial x_2^3}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})^3+\cdots+\frac{1}{j!}\frac{\partial F^j(X)}{\partial x_2^j}|_{X=X_0}(x_2-x_{20})^j+\cdots\right]$$
$$+\cdots+\left[\frac{\partial F(X)}{\partial x_m}|_{X=X_0}(x_m-x_{m0})+\frac{1}{2!}\frac{\partial F^2(X)}{\partial x_m^2}|_{X=X_0}(x_m-x_{m0})^2+\right.$$

$$\frac{1}{3!}\frac{\partial F^3(X)}{\partial x_m^3}|_{X=X_0}(x_m-x_{m0})^3+\cdots+\frac{1}{j!}\frac{\partial F^j(X)}{\partial x_m^j}|_{X=X_0}(x_2-x_{m0})^j+\cdots\Big]+$$
$$\Big[\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1\partial x_2}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})(x_2-x_{20})+\frac{\partial^3 F(X)}{\partial x_1^2\partial x_2}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})^2(x_2-x_{20})+$$
$$\frac{\partial^3 F(X)}{\partial x_1\partial x_2^2}|_{X=X_0}(x_1-x_{10})(x_2-x_{20})^2+\cdots\Big]+\cdots$$

上式可简写成

$$\begin{aligned}F(X)=&F(X_0)+F_1(\Delta x_1)+F_2(\Delta x_2)+F_{1,2}(\Delta x_1,\Delta x_2)+F_3(\Delta x_3)+\\&F_{1,3}(\Delta x_1,\Delta x_3)+F_{2,3}(\Delta x_2,\Delta x_3)+\cdots+F_m(\Delta x_m)+\\&F_{1,m}(\Delta x_1,\Delta x_m)+F_{2,m}(\Delta x_2,\Delta x_m)+\cdots+\\&F_{1,2,\cdots m}(\Delta x_1,\Delta x_2,\cdots,\Delta x_m)\end{aligned}\tag{1-4}$$

或写成更简便的形式

$$\begin{aligned}F(X)=&F_0+F_1+F_2+F_{1,2}+F_3+F_{1,3}+F_{2,3}+F_{1,2,3}+\cdots+\\&F_m+F_{1,m}+F_{2,m}+F_{3,m}+\cdots F_{1,2\cdots m}\end{aligned}\tag{1-5}$$

式中，$F_0=F(X_0)$ 为展开式的常数项；$F_i=F_i(\Delta x_i)$ 该项既可以看成是 Δx_i 的函数，也可以看成是 x_i 的函数。

式 (1-3)～式 (1-5) 是目标函数的泰勒展开式及其简写形式，由式 (1-4) 可知，除 F_0 外，F_1，F_2，…，$F_{1,2,\cdots m}$ 各项内都有无穷多项（有时可能为有限项），都分别构成了一个级数。同时由式 (1-4) 可以看出，$F_{1,2}$，$F_{1,3}$，$F_{2,3}$…各项的最小阶为二阶，称之为二阶交叉项。同样，$F_{1,2,3}$，$F_{1,2,4}$，$F_{2,3,4}$，…各项的最小阶为三阶，称之为三阶交叉项。依次类推，$F_{1,2,\ldots m}$ 称之为 m 阶交叉项。三阶以上的交叉项（包括三阶交叉项）称为高阶交叉项。假定二阶及高阶交叉项可忽略不计（本假定具有不合理的成分，事实上有时这些交叉项中部分项是不可以忽略的，这将在 2.2 节中进行详细讨论），则式 (1-5) 就可化简为

$$F(X)=F_0+F_1(x_1)+F_2(x_2)+\cdots+F_m(x_m)\tag{1-6}$$

这样就把一个多元函数化成了多个一元函数的和。其成立的条件是各交叉项很小，可忽略不计。交叉项不能忽略的情况在 2.2 节中详细讨论。

$F_1(x_1)$，$F_2(x_2)$，…，$F_m(x_m)$ 分别是因素 x_1，x_2，…，x_m 的函数，当因素 x_i 取某一水平的值时 F_i 就有一确定的值与之对应。x_i 取几个值 F_i 就有几个值与之对应。因此，可将 $F(X)$ 看成是 $F_1(x_1)$，$F_2(x_2)$，…，$F_m(x_m)$ 的函数，则 $F(X)$ 就成了这些变量的代数和。

如果能确定 F_0 及 $F_1(x_1)$，$F_2(x_2)$，…，$F_m(x_m)$ 对应于各自每一水平的值，就可计算出 $F(X)$ 对应于各种水平组合的值。

例如：某实验中有 4 个因素 $F_i(i=1, 2, 3, 4)$，每个因素有 3 水平 $(j=1, 2, 3)$，将实验中第 i 因素取第 j 水平的值用符号 $x_{i,j}$ 表示，则该实验所含的所有实验参量的取值可表示为：$x_{i,j}(i=1, 2, 3, 4; j=1, 2, 3)$。

若通过实验数据计算出了 F_0 及 $F_1(x_{1,1})$，$F_1(x_{1,2})$，$F_1(x_{1,3})$，$F_2(x_{2,1})$，$F_2(x_{2,2})$，$F_2(x_{2,3})$，$F_3(x_{3,1})$，$F_3(x_{3,2})$，$F_3(x_{3,3})$，$F_4(x_{4,1})$，$F_4(x_{4,2})$，$F_4(x_{4,3})$ 这十三个未知数的值，就可以求出实验中未做的水平组合的目标函数值。根据线性代数理论可知，要求出上述十三个未知数需要十三个线性无关的方程。在正交设计中这些数据最少可用 9 次实验的结果求出，而总的组合数为 81 次。也就是说，可以用 9 次实验来解决相当于 81 次实验的问题。

应当注意，$F(x_i)$ 表示的是 x_i 的函数，而 $F(x_{i,j})$ 表示的是当 x_i 取第 j 水平值时 $F(x_i)$

的函数值。

不失一般性，假定计算出了 F_0 及 $F_1(x_{1,1})$，$F_1(x_{1,2})$，$F_1(x_{1,3})$，$F_2(x_{2,1})$，$F_2(x_{2,2})$，$F_2(x_{2,3})$，$F_3(x_{3,1})$，$F_3(x_{3,2})$，$F_3(x_{3,3})$，$F_4(x_{4,1})$，$F_4(x_{4,2})$，$F_4(x_{4,3})$，如果要计算 $x_{1,2}$，$x_{2,1}$，$x_{3,2}$，$x_{4,3}$所对应的值，就可用下式求出

$$F(x_{1,2},x_{2,1},x_{3,2},x_{4,3})=F_0+F_1(x_{1,2})+F_2(x_{2,1})+F_3(x_{3,2})+F_4(x_{4,3})$$

这样利用 9 次实验的结果求出各因素的 $F(x_{i,j})$ ($i=1$，2，3，4；$j=1$，2，3) 后，就可以计算出 81 种组合的结果，仅做了总实验的 11%，达到了快、好、省的目的。

设各因素 x_1，x_2，…，x_m 的水平数分别为 l_1，l_2，l_3，…，l_m，则 F_1 的值一共有 l_1 个，分别记为

$$F_1^1,\ F_1^2,\ F_1^3,\ \cdots,\ F_1^{l_1}$$

同样 F_2 的值一共有 l_2个分别记为

$$F_2^1,\ F_2^2,\ F_2^3,\ \cdots,\ F_2^{l_2}$$

依次类推 F_m 的值共有 l_m个，分别记为

$$F_m^1,\ F_m^2,\ F_m^3,\ \cdots,\ F_m^{l_m}$$

连同 F_0 在内其值的总个数为

$$l=1+\sum_{i=1}^{m} l_i$$

如何求 F_0，F_1^1，F_1^2，…，F_2^1，F_2^2，…，F_3^1，F_3^2…，$F_m^{l_m}$ 这 l 个数值呢？下面就来讨论这个问题。

可以通过实验的方法获得不同因素不同水平组合条件下的目标函数值 $F(X)$，一般每做一次实验就可求得 $F(X)$ 的一个值。例如：在渗硼热处理实验中，可以通过实验获得在处理温度为 900℃，保温 9h 的渗层厚度，比如说 0.1mm，则 0.1mm 就是 $F(X)$。

若在一次实验中 F_1 取 $l_{1,1}$ 水平，F_2 取 $l_{2.1}$ 水平，F_m 取 $l_{m,1}$ 水平，并求得了一个函数值，这样就可列出一个方程

$$F(X_1)=F_0+F_1^{l_{1,1}}+F_2^{l_{2,1}}+\cdots+F_m^{l_{m,1}}$$

式中，$F(X_i)$ 的值可通过实验求出，故上式为一个关于 F_0，F_1，F_2，…F_m 的不同分量的线性方程。据此，若做 l 次实验，就可以得到 l 个方程

$$F(X_1)=F_0+F_1^{l_{1,1}}+F_2^{l_{2,1}}+\cdots+F_m^{l_{m,1}}$$
$$F(X_2)=F_0+F_1^{l_{1,2}}+F_2^{l_{2,2}}+\cdots+F_m^{l_{m,2}}$$
$$\vdots$$
$$F(X_i)=F_0+F_1^{l_{1,i}}+F_2^{l_{2,i}}+\cdots+F_m^{l_{m,i}}$$
$$\vdots$$
$$F(X_l)=F_0+F_1^{l_{1,l}}+F_2^{l_{2,l}}+\cdots+F_m^{l_{m,l}}$$

上列各式中

$1\leqslant l_{k,i}\leqslant l_k$，　$1\leqslant k\leqslant m$，　$1\leqslant i\leqslant l$

若上述这 l 个方程是线性无关的，就可联立这 l 个方程，从而解出这 l 个未知数，F_0，F_1^1，F_1^2，…，$F_1^{l_1}$，F_2^1，F_2^2，…，$F_2^{l_2}$，F_3^1，F_3^2，…，$F_3^{l_3}$，…F_m^1，F_m^2，…$F_m^{l_m}$

解出这 l 个未知数后，就可求出下述结果：

① 目标函数随某一因素不同水平的变化规律，也可找出目标函数随所有因素的变化规律。

② 对任意给定的各因素的不同组合就可计算出其相对应的目标函数值。

③ 找出最优组合及其对应的目标函数值。

以上内容将在 2.1 节中讨论。

所有因素所有水平的组合次数总共有 n 个

$$n=\prod_{i=1}^{m} l_{\mathrm{i}}$$

一般情况下 n 远大 l 于，也就是说只需要做较少的 l 次实验，就可以从较多的 n 次实验中找到最优的水平组合了。

例如：在绪论中所提到的 7 因素、3 水平的实验中

$$l_1=l_2=\cdots\cdots=l_7=3$$

$$l=1+3\times7=22$$

$$n=3^7=2187$$

$$l\approx1\%n$$

这就是说可用 1%左右的实验（22 次）量解决 100%（2187 次）的问题。一般地说，可用较少的实验次数代替较多的实验，尤其是当因素数很多时，甚至可以用不到 1%的实验解决 100%的问题，从而达到快、省的目的。然后，再在此基础上力求达到好的效果。

通过比较每一个因素的不同水平对目标函数的影响，就可以确定出该因素的最优水平了。若把每一因素的最优水平组合起来就可得到总体最优组合，并可根据每一个因素最优水平对目标函数的影响，求出最优组合所对应的目标函数值，这样就达到了优化的目的。

然而，如何设计出足够的线性无关的方程却是有一定难度的。即使碰巧设计出了足够的线性无关的方程，求解这些方程也是相当麻烦的。例如，对于一个 7 因素、3 水平的实验，而要设计出 22 个线性无关的方程。尽管总共有 2187 种组合，要从中找出 22 个线性无关的组合也不是很容易的。而找出了 22 个线性无关的组合，并经过实验后会得到一个 22 元一次方程组。

因此，寻求一种简单易行的方法来解决线性无关方程的设计，及方程组的求解就显得十分必要了。本书后面几章就介绍一种行之有效的方法—正交设计法，先从 3 水平正交设计开始，逐渐深入地进行讨论。

第2章 3水平正交设计

2.1 设计方法

顾名思义，3 水平正交设计就是各因素都是 3 水平的正交设计。最简单的正交设计是 2 水平正交设计，但它具有一些与多水平正交设计不一样的特殊性质，将在以后有关章节单独分析。因此首先研究中等难度、在多水平正交设计中具有代表性的 3 水平正交设计。掌握了 3 水平正交设计后，就可以将其比较简单地推广到多水平正交设计。下面首先介绍正交设计的定义。

定义 若一个实验设计满足如下两条：

① 每因素的各水平在总实验中出现的次数相同；

② 每两个因素的各水平组合在总实验中出现的次数也相同。

则称该设计为正交设计。

通常上述条件①、②称为均衡搭配原则，它包括两项内容：

① 每因素内部各水平间的均衡搭配，若某因素有个 l_i 水平，则每水平出现的次数为

$$r_i = n/l_i \tag{2-1}$$

式中，r_i 为该因素每个水平的重复次数，n 为实验的总次数，也称为实验的容量或实验的大小。

② 每两个因素的水平组合间的均衡搭配，若某两个因素的水平分别为 l_i，l_j，则每一种水平组合出现的次数为

$$r_{i,j} = n/(l_i \times l_j) \tag{2-2}$$

式中，$r_{i,j}$ 为所考察的两个因素的每种水平组合的重复次数。

实际上，如果一个实验能满足第 2 个条件就必然能满足第 1 个条件，具体的证明方法参见文献［1］。

对于普通的实验人员来说，要构造一个实验次数较多的正交设计是很麻烦的，需要具备专门的知识。幸运的是前人已经为我们构造好了一些常用的正交设计，并列成了表格，以备使用时查阅。通常把这种表格称为正交表，本书附录 D 中给出了一些常用的正交表。

例 2-1 表 2-1 给出了一个最简单的 3 水平正交表，通过该表即可看出这种均衡搭配关系。

这是个总实验次数为 9 的 3 水平正交表。该表共有 4 列，表示可以安排 4 个 3 水平因素，每列安排一个。读者可以验证：每因素的各水平出现的次数都是 3 次，每两个因素各水平的组合共有 9 种：(1，1)、(1，2)、(1，3)、(2，1)、(2，2)、(2，3)、(3，1)、(3，2)、(3，3)，每种组合都出现了 1 次。

表 2-1　$L_9(3^4)$ 正交表

序号 \ 列号	1	2	3	4
1	1	1	1	1
2	1	2	2	2
3	1	3	3	3
4	2	1	2	3
5	2	2	3	1
6	2	3	1	2
7	3	1	3	2
8	3	2	1	3
9	3	3	2	1

为什么将这种设计称为正交设计呢？主要是因为用这种方法安排的实验，最后解出的未知数的值可以看成实验数据在 n 维空间坐标系上的投影，而各因素所占的子空间及平均值空间是两两正交的。初学者对此可不予考虑。关于正交概念的解释及其应用在本节最后加以说明。

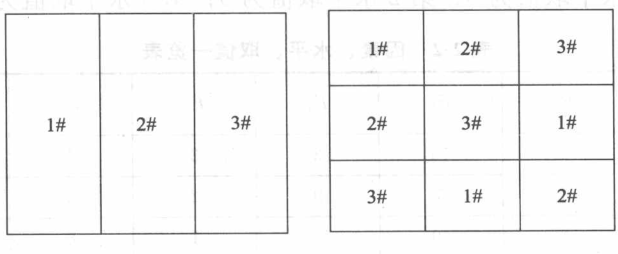
下面讨论 3 水平正交设计的表头设计、实验数据的综合分析、统计分析等应用问题。

2.1.1 正交表

附录 D 列出了一些常用的正交表，例如：表 D-10 和表 D-11 是两个 3 水平正交表。这两个表的代号分别用 $L_9(3^4)$ 和 $L_{27}(3^{13})$ 表示。

一般正交表的代号形式为：$L_n(l^k)$，其中，L 为正交表的代号，是拉丁方（Latin Square）的英语字头，这是因为正交表是由拉丁方演变而来的；n 表示实验的容量或称实验的大小，也就是一批实验不重复的次数；l 表示用该表可安排的因素的水平数；而 k 表示最多可按排的因素数，选定正交表后，可以安排的因素数只能小于 k，不能多于 k。

Latin Square 一开始是用在农业实验中。例如：若要引进 3 种小麦品种，想通过实验来比较这三种品种的优劣。最初的实验方法是如图 2-1（a）所示，将三种小麦分别播于 1＃、2＃、3＃区，但由于农作物易受周边环境的影响，使得这三种小麦的实验结果出现了一定的误差。而按图 2-1（b）的安排方法，则三种小麦在四周所受的影响相同，不管是东南风还是西北风，作用在这三种作物上的影响一样大。图 2-1（b）就是一种拉丁方（Latin Square），正交表就是按照这种思路建立起来的。



(a) 普通按条种植　　(b) 按拉丁方安排种植

图 2-1　两种小麦实验安排方法

利用正交表进行实验时，实验次数是受到严格限制的，即一批实验必须按正交表的要求做 n 次。否则难以进行实验数据的处理。

在第 4 章还会介绍一些混水平正交表，其表示方法为 $L_n(l_1^{k1} \times l_2^{k2})$。其意义是该正交表最多可安排 l_1 水平的因素 k_1 个，l_2 水平的因素 k_2 个。例如，$L_{36}(2^3 \times 3^{13})$ 表示该正交表最多可以安排 3 个 2 水平的因素和 13 个 3 水平的因素。附表 D-24～表 D-27 给出了一些常用的混水平正交表。