




# 配方试验设计

- 
- 配方试验设计（**formula experiment design**）  
混料试验设计（**mixture experiment design**）
  - 合理地选择少量的不同配比的试验，以确定最佳的产品配方

## 9.1 配方试验设计约束条件

- 若 $y$ 表示试验指标,  $x_1, x_2, \dots, x_m$ 表示配方中 $m$ 种组分各占的百分比, 则混料约束条件:
  - $x_j \geq 0$  ( $j=1, 2, \dots, m$ )
  - $x_1 + x_2 + \dots + x_m = 1$

## 9.2 单纯形配方设计

### 9.2.1 单纯形的概念

- 单纯形（**simplex**）：凸形
- 正规单纯形：  
例：正三角形，正四面体
- 高为1的正规单纯形可表示混料组成  
**正规单纯形内任一点到各个面的距离之和是1**
  - 顶点代表单一成分组成的混料
  - 棱上的点代表两种成分组成的混料
  - 面上的点代表多于两种而 $\leq m$ 种成分组成的混料
  - 内部的点则是代表全部 $m$ 种成分组成的混料

## 9.2.2 单纯形格子点设计 (simplex-lattice design)

### (1) 设计原理

- 配方试验点在单纯形格子点上
- 正三角形格子点集:  $\{3, d\}$ 
  - 3——单纯形的3个顶点, 表示3种组分
  - $d$ ——每边等分数, 称为阶数
- 四顶点单纯形格子点集:  $\{4, d\}$

.....

## (2) 单纯形格子点设计试验方案的确定

### ① 无约束单纯形格子点设计

- 无约束的配方设计：是指除了配方设计的约束条件，不再有对各组分含量加以限制的其它条件
- 各组分含量 $x_j$ 的变化范围可用高为1的正单纯形表示

- 例：当 $m=3$ ， $d=1$ 时

3个试验点

- 正三角形的三个顶点：

$(1, 0, 0)$ ， $(0, 1, 0)$ ， $(0, 0, 1)$

- 例：当 $m=3$ ， $d=2$ 时

6个试验点：

- 图示

- 表：{3, 2}单纯形格子点设计表

- 例：当 $m=3$ ， $d=3$ 时

10个试验点：

- 图示
- 表：{3, 3}单纯形格子点设计表

- 每种组分的百分比 $x_j$ 的取值与阶数 $d$ 有关，为 $1/d$ 的倍数：

$$x_j = 0, 1/d, 2/d, \dots, d/d = 1$$

- $x_j$  编码： $x_j = z_j$



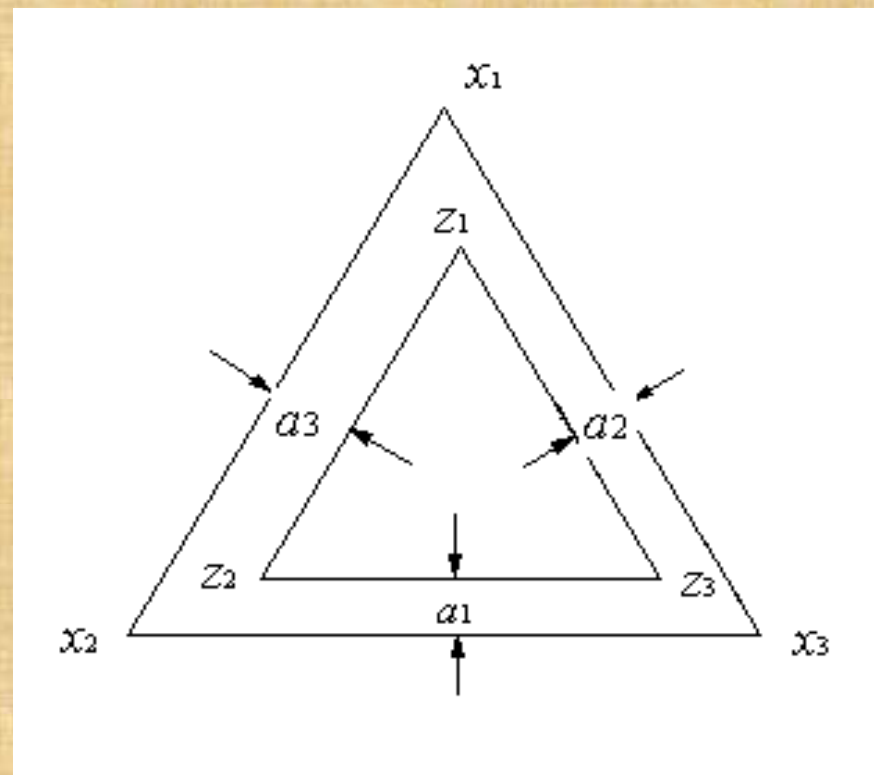
## ②有约束单纯形格子点设计

- 除配方设计的约束条件，还要受其它约束条件限制，如：

$$a_j \leq x_j \leq b_j,$$

$$j=1, 2, \dots, m$$

- 有下界约束的单纯形格子点设计：
  - $a_j \leq x_j$
  - 试验范围为原正规单纯形内的一个规则单纯形



- 单纯形格子点设计表的选用

先将自然变量 $x_j$  ( $j=1, 2, \dots, m$ ) 进行编码

➤ 编码公式:

$$x_j - a_j = \left(1 - \sum_{j=1}^m a_j\right) z_j \quad \text{或} \quad z_j = \frac{x_j - a_j}{1 - \sum_{j=1}^m a_j}$$

例:  $x_1 \geq a_1, x_2 \geq a_2, x_3 \geq a_3$

$$x_1 = [1 - (a_1 + a_2 + a_3)]z_1 + a_1$$

$$x_2 = [1 - (a_1 + a_2 + a_3)]z_2 + a_2$$

$$x_3 = [1 - (a_1 + a_2 + a_3)]z_3 + a_3$$

- 编码目的：使自然变量转变为 $0 \leq z_j \leq 1$
- 若自然变量 $x_j$ 无约束，则 $x_j = z_j$
- 根据组分数 $m$ 选择合适大小的设计表

### $\{m, d\}$ 单纯形格子点设计试验点数

组分数 $m$	阶数 $d$		
	2	3	4
3	6	10	15
4	10	20	35
5	15	35	70
6	21	56	126
8	36	120	330
10	55	220	715

### (3) 回归方程的建立

例:

- $\{m, 2\}$  单纯形格子点设计回归模型:

$$y = \sum_{j=1}^m b_j x_j + \sum_{k < j} b_{kj} x_k x_j$$

- 回归系数的计算:

$$\begin{cases} b_j = y_j \\ b_{kj} = 4y_{kj} - 2(y_k + y_j) \end{cases}$$

试验号	$z_1$	$z_2$	$z_3$	$y$
1	1	0	0	$y_1$
2	0	1	0	$y_2$
3	0	0	1	$y_3$
4	1/2	1/2	0	$y_{12}$
5	1/2	0	1/2	$y_{13}$
6	0	1/2	1/2	$y_{23}$

(4) 最优配方的确定:

- 用Excel的“规划求解”工具求最佳配方

(5) 回归方程的回代

- 有下界约束时: 将 $z_j$ 转换成 $x_j$
- 无约束时: 不用回代

## (6) 例9-1

- 编码
- 选配方设计表
- 试验方案
- 回归方程的建立
- 确定最优配方
- 回归方程回代

## 9.2.3 单纯形重心设计

### (1) 单纯形重心设计试验方案的确定

- 将试验点在单纯形的**重心**上
- 重心：
  - 单纯形的顶点
  - 棱的中点
  - 三角形的中心
  - 四个顶点的重心
  - .....
- $m$ 个顶点的单纯形重心设计共有 $(2^m - 1)$ 个重心，即试验点数为 $(2^m - 1)$ 个

■ 单纯形( $m$ 个顶点)重心设计试验点包括:

- $m$ 个单一成分的点
- 二种成分相等的试验点
- 三种成分相等的试验点
- .....
- 1个 $m$ 种成分相等的试验点

■ 例:当 $m=3$ 时

共有7个试验点

➤ 图示

➤ 重心设计表




## (2) 单纯形重心设计结果分析

- 将自然变量 $x_j$ 转换成规范变量 $z_j$
- 若 $m=3$ ，规范变量 $z_j$ 与试验指标 $y$ 之间的回归方程为：

$$y = \sum_{j=1}^3 b_j z_j + \sum_{k < j} b_{kj} z_k z_j + b_{123} z_1 z_2 z_3$$

- 回归系数的计算：

$$\begin{cases} b_j = y_j \\ b_{kj} = 4y_{kj} - 2(y_k + y_j) \\ b_{123} = 27y_{123} - 12(y_{12} + y_{13} + y_{23}) + 3(y_1 + y_2 + y_3) \end{cases}$$

- 
- 确定最优配方：  
    利用Excel的“规划求解”工具
  - 回归方程回代

## 9.3 配方均匀设计

- 单纯形设计：
  - 设计、分析简单
  - 试验点在试验范围内的分布不十分均匀
- 配方均匀设计：
  - 使试验点在单纯形中散布尽可能均匀

## 无约束的配方均匀设计步骤:

### (1) 配方均匀设计表的选用

#### ■ 配方均匀设计表:

$UM_n(n^m)$  或  $UM_n^*(n^m)$

➤  $n$ : 试验次数

➤  $m$ : 组分数

#### ■ 选表:

➤ 根据混料组分数  $m$

➤ 回归分析所需试验次数

(2) 明确试验方案，进行试验

(3) 试验结果分析

■ 直观分析：


➤ 直接选用其中最好的试验点作为最优配方

■ 回归分析：

➤ 建立试验指标 $y$ 与各组分百分比 $x_j$ 之间的回归方程

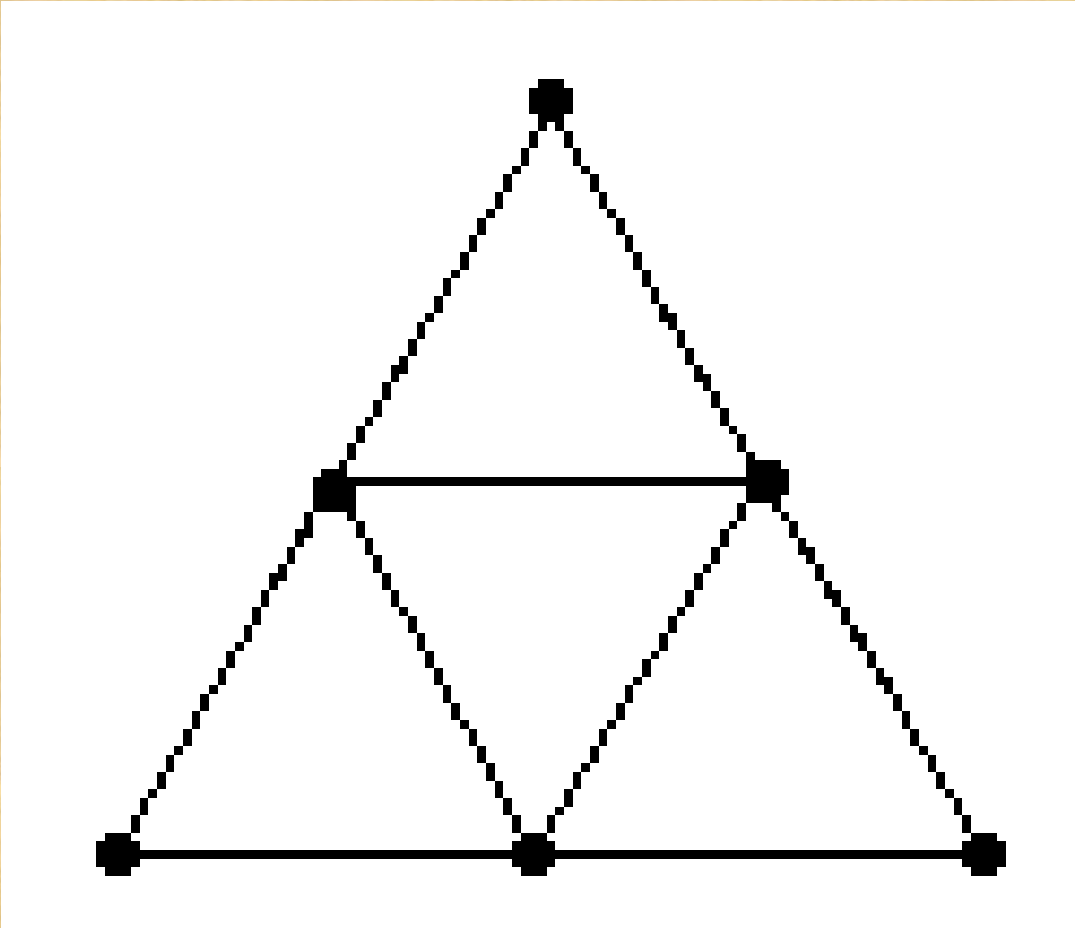
➤ 根据回归方程找出优方案

➤ 验证试验



## 9.4 Excel在配方设计中的应用

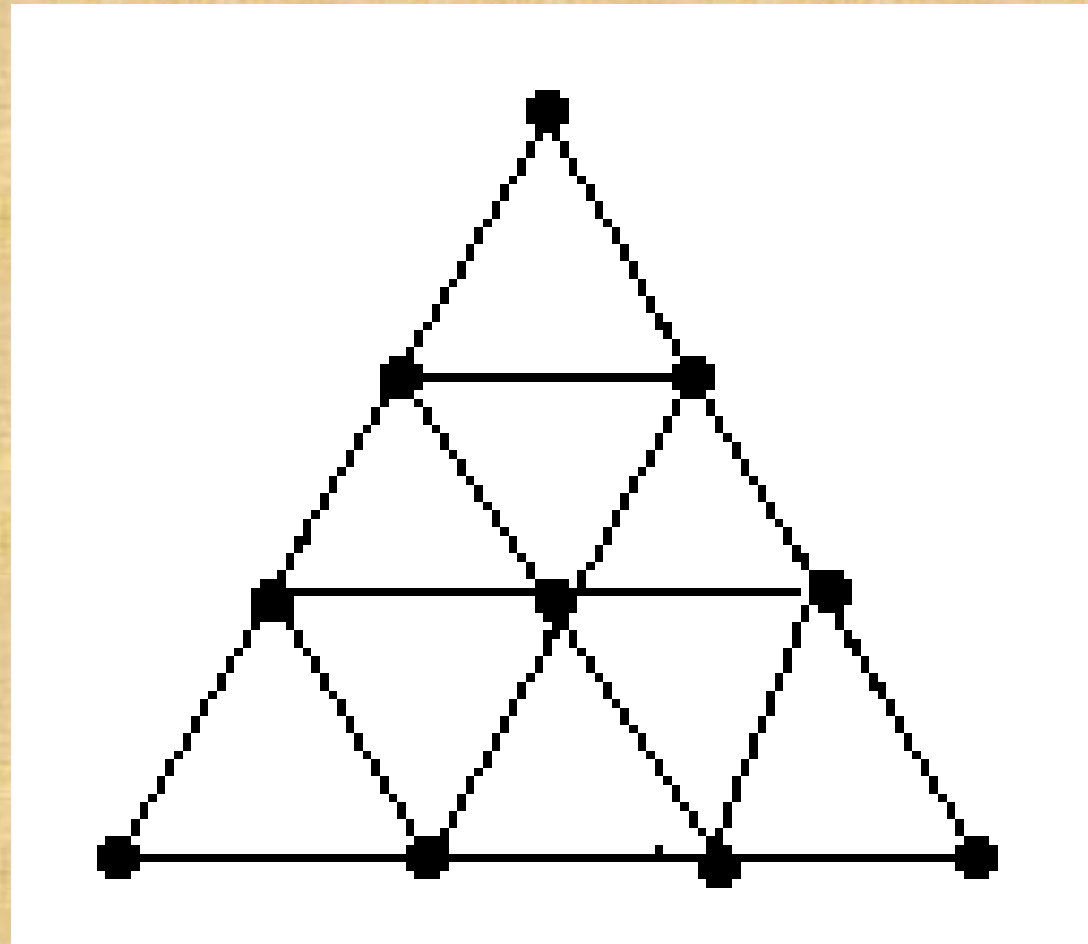
- 回归分析
- 规划求解



### {3, 2}单纯形格子点设计

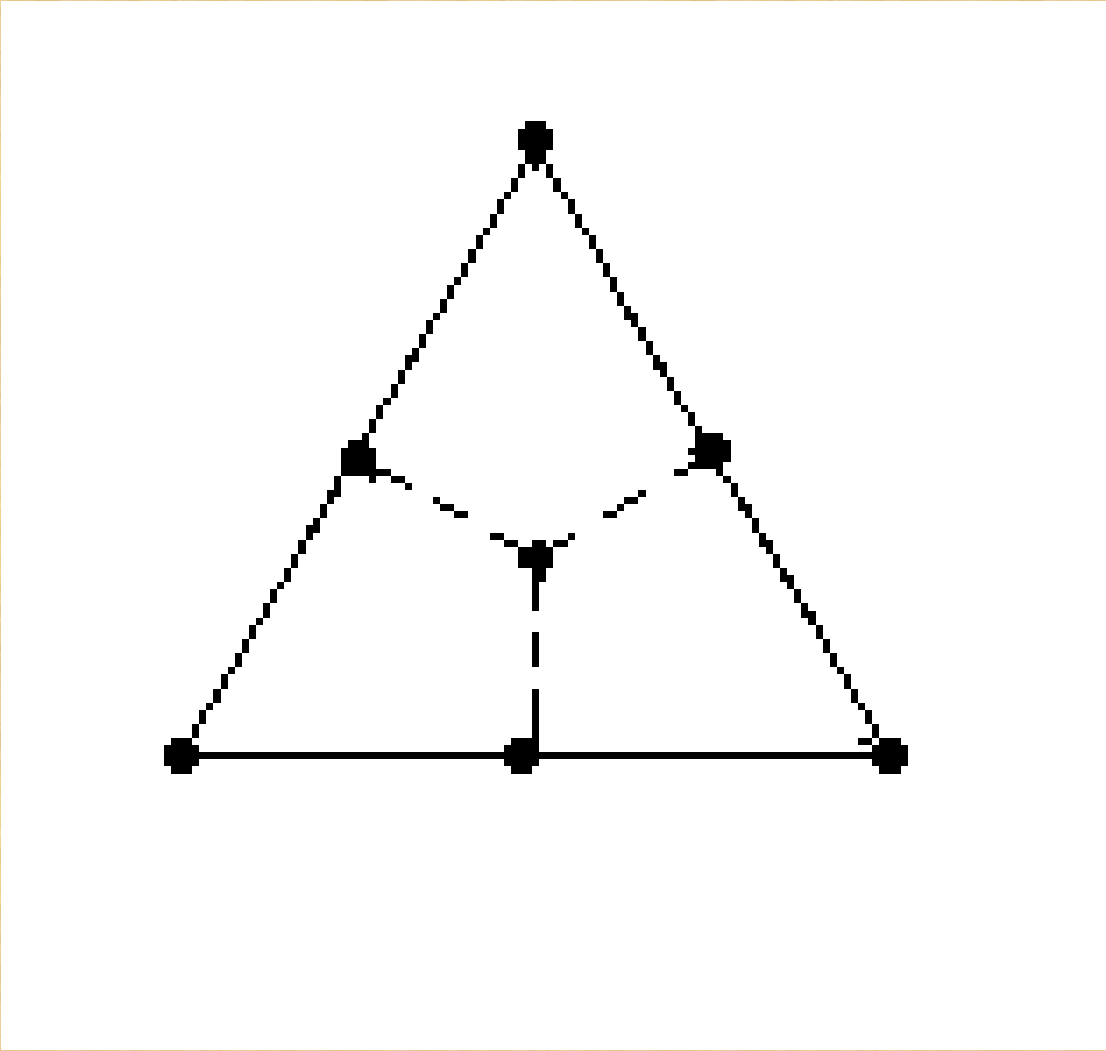
试验号	$z_1$	$z_2$	$z_3$
1	1	0	0
2	0	1	0
3	0	0	1
4	1/2	1/2	0
5	1/2	0	1/2
6	0	1/2	1/2





### {3, 3}单纯形格子点设计

试验号	$z_1$	$z_2$	$z_3$
1	1	0	0
2	0	1	0
3	0	0	1
4	2/3	1/3	0
5	1/3	2/3	0
6	2/3	0	1/3
7	1/3	0	2/3
8	0	2/3	1/3
9	0	1/3	2/3
10	1/3	1/3	1/3



### 3 组分单纯形重心设计表

试验号	$z_1$	$z_2$	$z_3$
1	1	0	0
2	0	1	0
3	0	0	1
4	1/2	1/2	0
5	1/2	0	1/2
6	0	1/2	1/2
7	1/3	1/3	1/3

