



正交试验设计

6.1 概述

- 适合多因素试验

- 全面试验：

- 每个因素的每个水平都相互搭配进行试验

例：3因素4水平的全面试验次数 $\geq 4^3=64$ 次

- 正交试验设计(orthogonal design)：

- 利用正交表科学地安排与分析多因素试验的方法

例：3因素4水平的正交试验次数：16

6.1.1 正交表(orthogonal table)

(1) 等水平正交表:

- 各因素水平数相等的正交表

①记号： $L_n(r^m)$

- L ——正交表代号
- n ——正交表横行数（试验次数）
- r ——因素水平数
- m ——正交表纵列数(最多能安排的因数个数)

正交表 $L_8(2^7)$

试验号	列 号						
	1	2	3	4	5	6	7
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	2	2	2	2
3	1	2	2	1	1	2	2
4	1	2	2	2	2	1	1
5	2	1	2	1	2	1	2
6	2	1	2	2	1	2	1
7	2	2	1	1	2	2	1
8	2	2	1	2	1	1	2

正交表 $L_9(3^4)$

试验号	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

②等水平正交表特点


- 表中任一系列，不同的数字出现的次数相同
- 表中任意两列，各种同行数字对（或称水平搭配）出现的次数相同
- 两性质合称为“正交性”：使试验点在试验范围内排列整齐、规律，也使试验点在试验范围内散布均匀

(2) 混合水平正交表

- 各因素的水平数不完全相同的正交表

正交表 $L_8(4^1 \times 2^4)$

试验号	列 号				
	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	2	2	2	2
3	2	1	1	2	2
4	2	2	2	1	1
5	3	1	2	1	2
6	3	2	1	2	1
7	4	1	2	2	1
8	4	2	1	1	2



■ 混合水平正交表性质：

(1) 表中任一系列，不同数字出现次数相同

(2) 每两列，同行两个数字组成的各种不同的水平搭配出现的次数是相同的，但不同的两列间所组成的水平搭配种类及出现次数是不完全相同

6.1.2 正交试验设计的优点

- 能均匀地挑选出代表性强的少数试验方案
- 由少数试验结果，可以推出较优的方案
- 可以得到试验结果之外的更多信息

6.2 正交试验设计结果的直观分析法

6.2.1 单指标正交试验设计及其结果的直观分析

■ 例：

□ 单指标：乳化能力

□ 因素水平：3因素3水平（假定因素间无交互作用）

因素水平表

水平	因素		
	温度 (A) / $^{\circ}\text{C}$	酯化时间 (B) /h	催化剂种类 (C)
1	130	3	甲
2	120	2	乙
3	110	4	丙

(1) 选正交表

- 要求:

- 因素数 \leq 正交表列数

- 因素水平数与正交表对应的水平数一致

- 选较小的表

- 选 $L_9(3^4)$

(2) 表头设计

- 将试验因素安排到所选正交表相应的列中
- 因不考虑因素间的交互作用，一个因素占有一列（可以随机排列）
- 空白列（空列）：最好留有至少一个空白列

表头设计

因 素	A	空 列	B	C
列 号	1	2	3	4

(3) 明确试验方案

试验号	因 素				试验方案
	A		B	C	
1	1	1	1	1	$A_1B_1C_1$
2	1	2	2	2	$A_1B_2C_2$
3	1	3	3	3	$A_1B_3C_3$
4	2	1	2	3	$A_2B_2C_3$
5	2	2	3	1	$A_2B_3C_1$
6	2	3	1	2	$A_2B_1C_2$
7	3	1	3	2	$A_3B_3C_2$
8	3	2	1	3	$A_3B_1C_3$
9	3	3	2	1	$A_3B_2C_1$

(4) 按规定的方案做试验，得出试验结果

注意：

- 按照规定的方案完成每一号试验
- 试验次序可随机决定
- 试验条件要严格控制

(5) 计算极差，确定因素的主次顺序


■ 三个符号:

- K_i : 表示任一系列上水平号为 i 时，所对应的试验结果之和。
- k_i : $k_i = K_i/s$ ，其中 s 为任一系列上各水平出现的次数
- R (极差): 在任一系列上

$$R = \max \{K_1, K_2, K_3\} - \min \{K_1, K_2, K_3\},$$

$$\text{或 } R = \max \{k_1, k_2, k_3\} - \min \{k_1, k_2, k_3\}$$

试验号	因 素				乳化能力
	A		B	C	
1	1	1	1	1	0.56
2	1	2	2	2	0.74
3	1	3	3	3	0.57
4	2	1	2	3	0.87
5	2	2	3	1	0.85
6	2	3	1	2	0.82
7	3	1	3	2	0.67
8	3	2	1	3	0.64
9	3	3	2	1	0.66
K ₁	1.87	2.10	2.02	2.07	
K ₂	2.54	2.23	2.27	2.23	
K ₃	1.97	2.05	2.09	2.08	
k ₁	0.623	0.700	0.673	0.690	
k ₂	0.847	0.743	0.757	0.743	
k ₃	0.657	0.683	0.697	0.693	
极差 R	0.67	0.18	0.25	0.16	


- 
- **R越大，因素越重要**
 - **若空列R较大，可能原因：**
 - **漏掉某重要因素**
 - **因素之间可能存在不可忽略的交互作用**

(6) 优方案的确定

- 优方案：在所做的试验范围内，各因素较优的水平组合
- 若指标越大越好，应选取使指标大的水平
- 若指标越小越好，应选取使指标小的水平
- 还应考虑：降低消耗、提高效率等

(7) 进行验证试验，作进一步的分析

- 优方案往往不包含在正交实验方案中，应验证
- 优方案是在给定的因素和水平的条件下得到的，若不限定给定的水平，有可能得到更好的试验方案
- 对所选的因素和水平进行适当的调整，以找到新的更优方案
- 趋势图



正交试验设计的基本步骤:

- (1) **明确试验目的, 确定评价指标**
- (2) **挑选因素(包括交互作用), 确定水平**
- (3) **选正交表, 进行表头设计**
- (4) **明确试验方案, 进行试验, 得到结果**
- (5) **对试验结果进行统计分析**
- (6) **进行验证试验, 作进一步分析**

6.2.2 多指标正交试验设计及其结果的直观分析

- 两种分析方法：
 - 综合平衡法
 - 综合评分法

(1) 综合平衡法

- 先对每个指标分别进行单指标的直观分析
- 对各指标的分析结果进行综合比较和分析，得出较优方案

②例

- 三个指标：
 - 提取物得率
 - 总黄酮含量
 - 葛根素含量
- 三个指标都是越大越好

■ 对三个指标分别进行直观分析:

➤ 提取物得率:

● 因素主次: **C A B**

● 优方案: **$C_3A_2B_2$ 或 $C_3A_2B_3$**

➤ 总黄酮含量:

● 因素主次: **A C B**

● 优方案: **$A_3C_3B_3$**

➤ 葛根素含量:

● 因素主次: **C A B**

● 优方案: **$C_3A_3B_2$**

■ 综合平衡: **$A_3B_2C_3$**

③综合平衡原则：

- **次服从主（首先满足主要指标或因素）**
- **少数服从多数**
- **降低消耗、提高效率**

④综合平衡特点：

- **计算量大**
- **信息量大**
- **有时综合平衡难**

(2) 综合评分法

①综合评分法:

- 根据各个指标的重要程度，对得出的试验结果进行分析，给每一个试验评出一个分数，作为这个试验的总指标
- 进行单指标试验结果的直观分析法

②评分方法:

- 直接给出每一号试验结果的综合分数
- 对每号试验的每个指标分别评分，再求综合分
- **若各指标重要性相同：各指标的分数总和**
- **若各指标重要性不相同：各指标的分数加权**

③如何对每个指标评出分数

- 非数量性指标：依靠经验和专业知识给出分数
- 有时指标值本身就可以作为分数，如回收率、纯度等
- 用“隶属度”来表示分数：

$$\text{隶属度} = \frac{\text{指标值} - \text{指标最小值}}{\text{指标最大值} - \text{指标最小值}}$$

④例

- 两个指标：取代度、酯化率
- 两个指标重要程度不同
- 综合分数 = 取代度隶属度 $\times 0.4$ + 酯化率隶属度 $\times 0.6$

⑤综合评分法特点

- 将多指标的问题，转换成了单指标的问题，计算量小
- 准确评分难

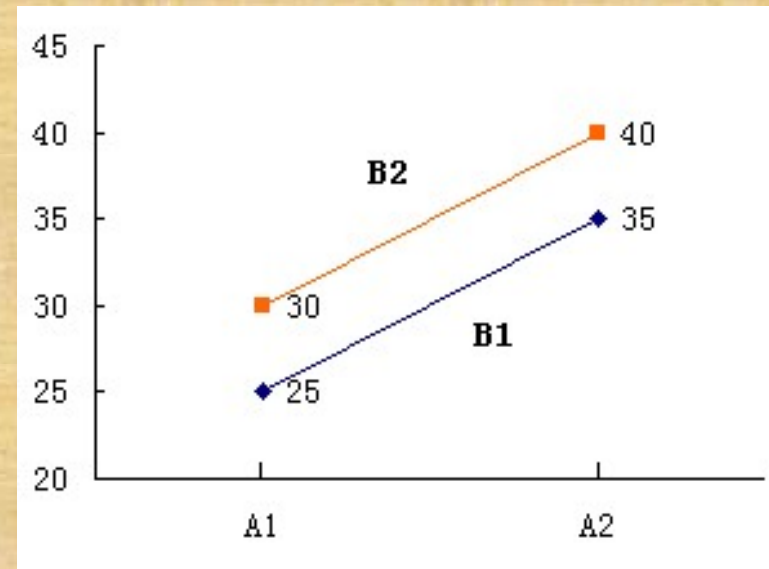
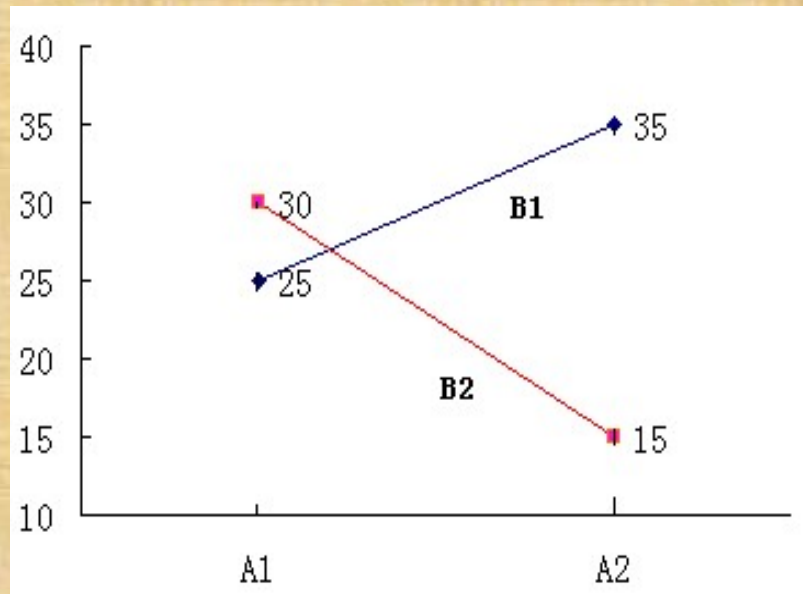
6.2.3 有交互作用的正交试验设计

(1) 交互作用的判断

- 设有两个因素A和B，各取两水平
- 在每个组合水平上做试验，根据试验结果判断

	A_1	A_2
B_1	25	35
B_2	30	15

	A_1	A_2
B_1	25	35
B_2	30	40



(2) 有交互作用的正交试验设计及其结果的直观分析

例：

- 3因素2水平
- 交互作用： $A \times B$ 、 $A \times C$
- 指标：吸光度，越大越好

①选表

- 应将交互作用看成因素
- 按5因素2水平选表： $L_8(2^7)$

②表头设计

- 交互作用应该占有相应的列——交互作用列
- 交互作用列是不能随意安排
- 表头设计两种方法：
 - 查交互作用表
 - 查表头设计表

③明确试验方案、进行试验、得到试验结果

试验号	A	B	A×B	C	A×C	空列	空列	吸光度 y_i
	1	2	3	4	5	6	7	
1	1	1	1	1	1	1	1	0.484
2	1	1	1	2	2	2	2	0.448
3	1	2	2	1	1	2	2	0.532
4	1	2	2	2	2	1	1	0.516
5	2	1	2	1	2	1	2	0.472
6	2	1	2	2	1	2	1	0.480
7	2	2	1	1	2	2	1	0.554
8	2	2	1	2	1	1	2	0.552
K_1	1.980	1.884	2.038	2.042	2.048	2.024	2.034	
K_2	2.058	2.154	2.000	1.996	1.990	2.014	2.004	
极差 R	0.078	0.270	0.038	0.046	0.058	0.010	0.030	
因素主次	B A A×C C A×B							

④计算极差、确定因素主次

注意：

- 排因素主次顺序时，应该包括交互作用

⑤优方案的确定

- 如果不考虑因素间的交互作用，优方案：A₂B₂C₁
- 交互作用A×C比因素C对试验指标的影响更大
- 因素A，C水平搭配表

因素A, C水平搭配表

	A_1	A_2
C_1	$(y_1 + y_3)/2$ $= (0.484 + 0.532)/2 = 0.508$	$(y_5 + y_7)/2$ $= (0.472 + 0.554)/2 = 0.513$
C_2	$(y_2 + y_4)/2$ $= (0.448 + 0.516)/2 = 0.482$	$(y_6 + y_8)/2$ $= (0.480 + 0.552)/2 = 0.516$


说明：

- 表头设计中的“混杂”现象（一列安排多个因素或交互作用）
- 高级交互作用，如 $A \times B \times C$ ，一般不考虑
- r 水平两因素间的交互作用要占 $r-1$ 列，当 $r \geq 2$ 时，不宜用直观分析法
- 即使不考虑交互作用，最好仍与有交互作用时一样，按规定进行表头设计

6.2.4 混合水平的正交试验设计

两种方法：

- 直接利用混合水平的正交表
- 拟水平法：将混合水平的问题转化成等水平问题来处理



6.2.5 Excel在直观分析中应用

- 函数 SUMIF
- 绘制趋势图

(1) 直接利用混合水平的正交表

- 例
- 注意：
 - 不同列 K_i 与 k_i 的计算
 - 计算极差时，按 k_i 计算
 - 混合水平正交表也可以安排交互作用

(2) 拟水平法

■ 例

➤ **拟水平**：将现有较好的水平重复一次

■ 注意：

➤ 有拟水平的列， K_i ， k_i 计算

➤ 计算极差时，按 k_i 计算

➤ 有拟水平的因素确定优水平时，应按 k_i 确定

➤ 可以对多个因素虚拟水平

6.3 正交试验设计结果的方差分析法

- 能估计误差的大小
- 能精确地估计各因素的试验结果影响的重要程度

6.3.1 方差分析的基本步骤与格式

设：

- 用正交表 $L_n(r^m)$ 来安排试验
- 试验结果为 y_i ($i=1,2,\dots,n$)

(1) 计算离差平方和

①总离差平方和

$$SS_T = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 = Q - P$$

设：

$$Q = \sum_{i=1}^n y_i^2 \quad T = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$P = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 = \frac{T^2}{n}$$

②各因素引起的离差平方和

- 第j列所引起的离差平方和：

$$SS_j = \frac{r}{n} \left(\sum_{i=1}^r K_i^2 \right) - \frac{T^2}{n} = \frac{r}{n} \left(\sum_{i=1}^r K_i^2 \right) - P$$

因此：

$$SS_T = \sum_{j=1}^m SS_j$$

③交互作用的离差平方和

- 若交互作用只占有一列，则其离差平方和就等于所在列的离差平方和 SS_j ；
- 若交互作用占有多列，则其离差平方和等于所占多列离差平方和之和，

例：r=3时

$$SS_{A \times B} = SS_{(A \times B)_1} + SS_{(A \times B)_2}$$

④试验误差的离差平方和

- 方差分析时，在进行表头设计时一般要求留有空列，即误差列
- 误差的离差平方和为所有空列所对应离差平方和之和：

$$SS_e = \sum SS_{\text{空列}}$$

(2) 计算自由度

①总自由度： $df_T = n - 1$

②任一系列离差平方和对应的自由度：

$$df_j = r - 1$$

③交互作用的自由度：（以A×B为例）

■ $df_{A \times B} = df_A \times df_B$

■ $df_{A \times B} = (r - 1)df_j$

□ 若 $r = 2$, $df_{A \times B} = df_j$

□ 若 $r = 3$, $df_{A \times B} = 2df_j = df_A + df_B$

④误差的自由度：

$$df_e = \text{空白列自由度之和}$$

(3) 计算均方

■ 以A因素为例：
$$MS_A = \frac{SS_A}{df_A}$$

■ 以A×B为例：
$$MS_{A \times B} = \frac{SS_{A \times B}}{df_{A \times B}}$$

■ 误差的均方：
$$MS_e = \frac{SS_e}{df_e}$$

注意:

- 若某因素或交互作用的均方 $\leq MS_e$, 则应将它们归入误差列
- 计算新的误差、均方

例: 若 $MS_A \leq MS_e$

则:

$$SS_e^\Delta = SS_e + SS_A$$

$$df_e^\Delta = df_e + df_A$$

$$MS_e^\Delta = \frac{SS_e^\Delta}{df_e^\Delta}$$

(4) 计算F值

- 各均方除以误差的均方，例如：

$$F_A = \frac{MS_A}{MS_e} \quad \text{或} \quad F_A = \frac{MS_A}{MS_e^\Delta}$$

$$F_{A \times B} = \frac{MS_{A \times B}}{MS_e} \quad \text{或} \quad F_{A \times B} = \frac{MS_{A \times B}}{MS_e^\Delta}$$

(5) 显著性检验

■ 例如:

- 若 $F_A > F_\alpha(df_A, df_e)$ 则因素A对试验结果有显著影响
- 若 $F_{A \times B} > F_\alpha(df_{A \times B}, df_e)$, 则交互作用A×B对试验结果有显著影响

(6) 列方差分析表

差异源	SS	df	MS	F	显著性
A					
B					
⋮					

6.3.2 二水平正交试验的方差分析

- 正交表中任一系列对应的离差平方和：

$$SS_j = \frac{1}{n}(K_1 - K_2)^2$$

- 例6-9

6.3.3 三水平正交试验的方差分析

- $r=3$ ，所以任一系列的离差平方和：

$$SS_j = \frac{3}{n} \left(\sum_{i=1}^3 K_i^2 \right) - P$$

- 例6-10

注意：

- 交互作用的方差分析
- 有交互作用时，优方案的确定


6.3.4 混合水平正交试验的方差分析

(1) 利用混合水平正交表

- 注意：不同列的有关计算会存在差别
- 例6-11

(2) 拟水平法

- 注意：
 - 有拟水平的列平方和的计算
 - 误差平方和的计算
 - 误差自由度的计算
- 例6-12



6.3.5 Excel在方差分析中应用

- 内置函数SUMSQ

$L_8(2^7)$ 二列间的交互作用

列 号 ()	列 号						
	1	2	3	4	5	6	7
(1)	(1)	3	2	5	4	7	6
(2)		(2)	1	6	7	4	5
(3)			(3)	7	6	5	4
(4)				(4)	1	2	3
(5)					(5)	3	2
(6)						(6)	1
(7)							(7)

L₈(2⁷)表头设计

因素数	列 号						
	1	2	3	4	5	6	7
3	A	B	A×B	C	A×C	B×C	
4	A	B	A×B C×D	C	A×C B×D	B×C A×D	D
4	A	B C×D	A×B	C B×D	A×C	D B×C	A×D
5	A D×E	B C×D	A×B C×E	C B×D	A×C B×E	D A×E B×C	E A×D

试验号	A	B	A×B	C	A×C	空列	空列	吸光度 y_i
	1	2	3	4	5	6	7	
1	1	1	1	1	1	1	1	0.484
2	1	1	1	2	2	2	2	0.448
3	1	2	2	1	1	2	2	0.532
4	1	2	2	2	2	1	1	0.516
5	2	1	2	1	2	1	2	0.472
6	2	1	2	2	1	2	1	0.480
7	2	2	1	1	2	2	1	0.554
8	2	2	1	2	1	1	2	0.552
K_1	1.980	1.884	2.038	2.042	2.048	2.024	2.034	
K_2	2.058	2.154	2.000	1.996	1.990	2.014	2.004	
极差 R	0.078	0.270	0.038	0.046	0.058	0.010	0.030	
因素主次	B A A×C C A×B							

$L_{27}(3^{13})$ 表头设计

因素数	列号												
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
3	A	B	$(A \times B)_1$	$(A \times B)_2$	C	$(A \times C)_1$	$(A \times C)_2$	$(B \times C)_1$			$(B \times C)_2$		
4	A	B	$(A \times B)_1$ $(C \times D)_2$	$(A \times B)_2$	C	$(A \times C)_1$ $(B \times D)_2$	$(A \times C)_2$	$(B \times C)_1$ $(A \times D)_2$	D	$(A \times D)_1$	$(B \times C)_2$	$(B \times D)_1$	$(C \times D)_1$

试验号	因素					得分
	A	B	C			
1	1	1	1	1	1	2
2	1	2	2	2	2	6
3	2	1	1	2	2	4
4	2	2	2	1	1	5
5	3	1	2	1	2	6
6	3	2	1	2	1	8
7	4	1	2	2	1	9
8	4	2	1	1	2	10
K ₁	8	21	24	23	24	
K ₂	9	29	26	27	26	
K ₃	14					
K ₄	19					
k ₁	4.0	5.2	6.0	5.8	6.0	
k ₂	4.5	7.2	6.5	6.8	6.5	
k ₃	7.0					
k ₄	9.5					
极差R	5.5	2.0	0.5	1	0.5	
因素主→次	A B C					
优方案	A ₄ B ₂ C ₂ 或 A ₄ B ₂ C ₁					

例6-8因素水平表

水平	因素			
	温度 (A) /°C	甲醇钠量 (B) /mL	醛状态 (C)	缩合剂量 (D) / mL
1	35	3	固	0.9
2	25	5	液	1.2
3	45	4	液	1.5

试验号	因素				合成率/%	(合成率-70) /%	
	A	B	C	D			
1	1	1	1 (1)	1	69.2	-0.8	
2	1	2	2 (2)	2	71.8	1.8	
3	1	3	3 (2)	3	78.0	8.0	
4	2	1	2 (2)	3	74.1	4.1	
5	2	2	3 (2)	1	77.6	7.6	
6	2	3	1 (1)	2	66.5	-3.5	
7	3	1	3 (2)	2	69.2	-0.8	
8	3	2	1 (1)	3	69.7	-0.3	
9	3	3	2 (2)	1	78.8	8.8	
K ₁	9.0	2.5	-4.6	15.6			
K ₂	8.2	9.1	29.5	-2.5			
K ₃	7.7	13.3		11.8			
k ₁	3.0	0.8	-1.5	5.2			
k ₂	2.7	3.0	4.9	-0.8			
k ₃	2.6	4.4		3.9			
极差R	0.4	3.6	6.4	6			
因素主→次	C D B A						
优方案	C ₂ D ₁ B ₃ A ₂						

$L_8(4 \times 2^4)$ 表头设计

因素数	列号				
	1	2	3	4	5
2	A	B	$(A \times B)_1$	$(A \times B)_2$	$(A \times B)_3$
3	A	B	C		
4	A	B	C	D	
5	A	B	C	D	E