第十章 正交试验设计的灵活运用

上面我们介绍了正交试验设计的几种基本方法，但是在科研与生产的实践中，所遇到的问题往往是错综复杂的，这表现在：

1、现成的正交表虽然很多，但仍然满足不了实际需要，根据选定的因素水平及试验要求，有时选不出对口的正交表。例如，4×3^3的试验，$3^2\times4\times2^5$的试验，还要考察交互作用，就根本找不到对口的正交表。有时虽然可以找到对口的正交表，但不合适。例如5×2^2的试验，若选用$L_{20}(5\times2^8)$正交表，是全面试验，显然是不合适的。

2、实际试验中常常会遇到因素多、水平不等，同时又要考察交互作用的复杂情况。但是要考察交互作用，就必须使用标准表，而标准表都是等水平的，这与实际需要相矛盾。

3.有些实际问题有些特殊要求，在试验方案设计时需要特殊照顾，否则就可能扩大试验的时空范围，增加试验次数，甚至根本无法实施试验。例如，在试验中，有些必须在前道工序，而另一些必须在下道工序；有些更换水平较难，费时费力，要尽量减少更换次数，而另一些则更换水平容易，更换次数可多些；有些应在大区域大范围内，而另一些则应在小区域小范围内；有些要求精度较高，而另一些则精度要求不高；等等。这些问题都需要在试验方案的设计时予以充分考虑，使设计出的试验方案能满足各种实际需要。

为了解决上述问题，必须针对不同的问题，在满足试验要求和尽量减少试验次数的前提下，灵活地运用正交试验设计。人们通过理论研究和实践，创造出一些灵活运用正交表的试验设计方法，下面介绍

几种最常用的方法。

第一节 并列设计法

并列法是用标准表构造水平数不同的正交表的一种方法，它是安排水平数不同的正交试验的常用方法。

一、问题的提出

例 10-1 为了研究用塑料薄膜袋保藏棕李的贮藏效果和贮藏过程中维生素 C 的变化规律。欲安排四因素多水平的正交试验，试验因素水平表见表 10-1。试验的指标为维生素 C 的含量(mg/100g)。因素 A 取四个水平，因素 B、C、D 取二个水平，并要求考察交互作用 A×B、A×C、B×C。

表 10-1 因素水平表

因素 水平	A 包装方式	B 贮藏温度(℃)	C 处理时间	D 膜剂
1	封口，内放 C_2H_4 吸收剂	4℃	采后 2 天	无钙剂膜
2	封口，内放 CO_2 吸收剂	室温	采后 10 天	含钙剂膜
3	封口，不放吸收剂			
4	不封口，不放吸收剂			

先计算所要考虑的因素及其交互作用的自由度：

$f_A=4-1=3$　　$f_B=f_C=f_D=2-1=1$

$f_{A\times B}=f_{A\times C}=(4-1)(2-1)=3$

$f_{B\times C}=(2-1)(2-1)=1$

总自由度 $=3+3\times1+2\times3+1=13$

显然，本试验可选用混合水平正交表 $L_{16}(4^1\times2^{12})$来安排试验，但该表没有二列间交互作用表。这样在表头设计时，应如何安排交互作用列？这就必须知道 $L_{16}(4^1\times2^{12})$是如何构造的。

二、正交表的并列

凡是标准表，例如 $L_8(2^7)$、$L_{16}(2^{15})$、$L_{27}(3^{13})$等，都可以把任意两列和它的交互作用列放在一起，进行并列，以得到一张新的正交表。

以 $L_{16}(2^{15})$为例来说明，首先从 $L_{16}(2^{15})$中任取两列，譬如取第 1、2 两列，将此两列同行的水平数看成四种有序数对(1，1)(1，2)(2，1)(2,2)，将每一种有序数对分别对应一个水平，例如我们规定对应关系为：

(1，1)→1，(1，2)→2，(2，1)→3，(2，2)→4

于是第 1、2 列就变成了一个具有四个水平的新列，再将第 1、2 列的交互作用列，即第 3 列，从正交表中划掉，因为它已不能再安排任何因素了。这样就等于将第 1，2，3 列合并成一个新的四水平列，可以安排一个四水平因素。由于四水平因素的自由度是 3，而二水平正交表中每一列的自由度是 1，所以从自由度的角度来看，四水平列在二水平正交表中应占三列，在新的列上安排一个四水平因素是完全恰当的。这样就将 $L_{16}(2^{15})$的标准表改造成一个新的正交表 $L_{16}(4^1\times 2^{12})$。

可以证明，新表 $L_{16}(4^1\times 2^{12})$仍然是一张正交表，因为它满足正交表的两个性质：

(1) 任一列中各水平均出现，且出现的次数相同；

(2) 任两列的所有水平组合均出现，且出现的次数相同。

用同样的方法，可以将 $L_8(2^7)$改造成 $L_8(4^1\times 2^4)$，可将 $L_{27}(3^{13})$改造成 $L_{27}(9^1\times 3^9)$。$L_{16}(2^{15})$除可以改造成 $L_{16}(4^1\times 2^{12})$外，还可以改造成 $L_{16}(4^2\times 2^9)$，$L_{16}(4^3\times 2^6)$，$L_{16}(4^4\times 2^3)$和 $L_{16}(4^5)$。

那么并列后的正交表是怎样安排交互作用列的呢？正交表 $L_{16}(4^1\times2^{12})$的任意两列的交互作用仍可由 $L_{16}(2^{15})$的二列间的交互作用表查出。它的四水平列与任一个二水平列的交互作用都有三列，而且就是这第 1、2、3 列与该列的三个交互作用列。例如它与第 4 列的交互作用列就是第 5、6、7 列。

三、表头设计

并列后的正交表的表头设计与等水平的正交表的表头设计一样，必须遵循不混杂的原则。

用新的正交表 $L_{16}(4^1\times2^{12})$来安排例 10-1 的试验，首先可将四水平因素 A 放在四水平列上，把因素 B 放在第 4 列，则 A 与 B 的交互作用列为 5、6、7 列，再把因素 C 放在第 8 列上，则 A 与 C 的交互作用列为第 9、10、11 列，B 与 C 的交互作用列为第 12 列，最后把因素 D 放在第 13 列上。第 14、15 列为空列，用来估计试验误差，这样就完成了表头设计，如表 10-2 所示。

表 10-2 表头设计

因素	A	B	A×B	C	A×C	B×C	D	
列号	1 2 3	4	5 6 7	8	9 10 11	12	13	14 15

试验方案和试验结果如表 10-3 所示。

表 10-3 试验方案和结果计算表

因素	A	B	A×B			C	A×C			B×C	D			试验结果 x_i
列号 / 试验号	1’	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0.41
2	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	0.25
3	1	2	2	2	2	1	1	1	1	2	2	2	2	0.37
4	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	0.30

5 6 7 8	2 2 2 2	1 1 2 2	1 1 2 2	2 2 1 1	2 2 1 1	1 2 1 2	1 2 1 2	2 1 2 1	2 1 2 1	1 2 2 1	1 2 2 1	2 1 1 2	2 1 1 2	0.13 0.25 0.08 0.31
9 10 11 12	3 3 3 3	1 1 2 2	2 2 1 1	1 1 2 2	2 2 1 1	1 2 1 2	2 1 2 1	1 2 1 2	2 1 2 1	1 2 2 1	2 1 1 2	1 2 2 1	2 1 1 2	0.33 0.58 0.39 0.51
13 14 15 16	4 4 4 4	1 1 2 2	2 2 1 1	2 2 1 1	1 1 2 2	1 2 1 2	2 1 2 1	2 1 2 1	1 2 1 2	1 2 2 1	2 1 1 2	2 1 1 2	1 2 2 1	0.29 0.48 0.35 0.44
K_{1j} K_{2j} K_{3j} K_{4j}	1.33 0.77 1.81 1.56	2.72 2.75	2.73 2.74	2.75 2.72	2.72 2.75	2.35 3.12	3.00 2.47	2.98 2.49	3.07 2.40	2.72 2.75	2.95 2.52	2.71 2.76	2.74 2.73	T=5.47 $CT=\frac{T^2}{n}=$ 1.87
S_j	0.148	5.63×10^{-5}	6.25×10^{-6}	5.63×10^{-5}	5.63×10^{-5}	3.71×10^{-2}	1.76×10^{-2}	1.50×10^{-2}	2.81×10^{-2}	5.63×10^{-5}	1.16×10^{-2}	1.56×10^{-4}	6.25×10^{-6}	$S_T=\sum_{i=1}^{16}x_i^2-$ CT=0.257

对于四水平列 $$S_j=\frac{1}{r}\sum_{i=1}^{m}K_{ij}^2-CT=\frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}K_{ij}^2-CT$$

对于二水平列 $$S_j=\frac{1}{n}(K_{1j}-K_{2j})^2=\frac{1}{16}(K_{1j}-K_{2j})^2$$

四、方差分析

例 10-1 试验结果的方差分析见表 10-4。

表 10-4 试验结果的方差分析

方差来源	偏差平方和	自由度	方差	F 值	显著性
A	$S_A=S_1$,=0.148	3	0.0493	875.7	**
B△	$S_B=S_4=5.63\times10^{-5}$	1	5.63×10^{-5}		
A×B△	$S_{A\times B}=S_5+S_6+S_7$ $=1.19\times10^{-4}$	3	3.97×10^{-5}		
C	$S_C=S_8=3.71\times10^{-2}$	1	3.71×10^{-2}	659.0	**
A×C	$S_{A\times C}=S_9+S_{10}+S_{11}$ $=6.07\times10^{-2}$	3	2.02×10^{-2}	358.8	**
B×C△	$S_{B\times C}=S_{12}$ $=5.63\times10^{-5}$	1	5.63×10^{-5}		
D	$S_D=S_{13}=1.16\times10^{-2}$	1	1.16×10^{-2}	206.0	**
误差 e	$S_e=S_{14}+S_{15}$ $=1.62\times10^{-4}$	2	8.1×10^{-5}		

误差 e^{Δ}	$S_{e^{\Delta}}=3.94\times10^{-4}$	7	5.63×10^{-5}	
总和	$S_T=0.257$	15	$F_{0.05(3,7)}=4.35$ $F_{0.01(3,7)}=8.45$ $F_{0.05(1,7)}=5.59$ $F_{0.01(1,7)}=12.25$	

注：因为 V_B、$V_{A\times B}$、$V_{B\times C}$ 均小于 $2V_e$，将其偏差平方和和自由度均并入 S_e 和 f_e，得到新的 $V_{e^{\Delta}}$。

方差分析的结论：

(1) 因素 A、C、D 和交互作用 A×C 高度显著，因素 B、交互作用 A×B 与 B×C 对试验结果无显著影响。因素的主次顺序为：A、C、A×C、D。

(2) 通过比较 K 的大小，可确定 A 的优水平为 A_3，C 和 D 的优水平为 C_2、D_1，因为因素 A 和 C 对试验结果的影响均比 A×C 显著，因此 A 和 C 的优水平即为 A×C 的优搭配。最优水平组合为 $A_3C_2D_1$。

第二节 拟水平设计法

在正交试验设计中，有时会遇到这样的情况：某个或几个试验因素的水平数是自然形成的，只有确定的个数，不能随意选取水平数；或有的试验因素由于受到某种条件的限制，不能多取水平，而又没有现成的混合型正交表可用，这时可采用拟水平设计法。这种方法是将水平数少的因素虚拟一个或几个水平，使它与正交表相应的列的水平数相等。这是一种用多水平的正交表安排水平数较少的因素的方法。

例 10-2 在用高效液相色谱法测定食品中β—胡萝卜素的研究中，欲通过正交试验选择柱层析法的净化条件，试验指标为β—胡萝卜素回收率，不考虑交互作用，试验因素水平表见表 10-5。

表 10-5 因素水平表

因素 水平	A 活化温度(℃)	B 柱高(cm)	C 过柱体积(ml)
1	100	8	15
2	120	12	20
3	140		25

由表 10-5 可以看出，试验因素 A、C 均为三水平，而因素 B 由于受试验条件的限制，只能取二个水平。本试验可选用 $L_{18}(2\times3^7)$正交表来安排试验，但试验次数太多。另外还可以看出，若 B 也是三水平，就可以直接用 $L_9(3^4)$的正交表来安排试验。因此我们可以采取虚拟一个水平的方法，将因素 B 凑足三个水平，即将因素 B 的两个水平中的一个虚设为它的第三个水平。一般可根据试验的需要，将重点要考察的那个水平选为虚拟水平，本例选用因素 B 的第二个水平为虚拟的第三个水平。这样虚拟的结果相当于把 $L_9(3^4)$的正交表的第二列作如下的改造：

第二列： 1→1，2→2，3→2

用拟水平法改造后，一般把表中被改造的那列称为拟水平列，常用“ ’”表示。本例的试验方案和试验结果见表 10-6。

表 10-6 试验方案与结果

因素	A	B		C		试验结果
列号 试验号	1	2	2’	3	4	x_i
1	1	1	1	1	1	90.5
2	1	2	2	2	2	90
3	1	3	2	3	3	95
4	2	1	1	2	3	85
5	2	2	2	3	1	92
6	2	3	2	1	2	75
7	3	1	1	3	2	100
8	3	2	2	1	3	80
9	3	3	2	2	1	90
K_{1j} K_{2j}	275.5 252	275.5 262	275.5 522	245.5 265	272.5 265	T＝797.5

K_{3j}	270	260		287	260	
$\overline{K}_{1j}$	91.8	91.8	91.8	81.8	90.8	
$\overline{K}_{2j}$	84	87.3	87	88.3	88.3	
$\overline{K}_{3j}$	90	86.7		95.7	86.7	
R	7.8		4.8	13.9	4.1	
优水平	A_1	B_1		C_3		
优组合	$A_1B_1C_3$					
主次顺序	C A B					

二、试验结果分析

(一）采用拟水平法的极差分析

采用拟水平法的试验结果的极差分析法与一般正交试验基本相同。所不同的是，计算采用拟水平法的那个因素的 K 值和极差 R 时，应与其他因素区别对待。对本例，因为在 9 次试验中 B_1 重复了 3 次，B_2 重复了六次，所以 $\overline{K}_{1B}=\frac{K_{1B}}{3}=\frac{275.5}{3}=91.8$，而 $\overline{K}_{2B}=\frac{K_{2B}(即K_{22'})}{6}=\frac{522}{6}=87$，极差分析的结果见表 10-6。

(二）采用拟水平法的方差分析

采用拟水平法的试验结果的方差分析步骤与一般正交试验的基本相同。主要区别在于拟水平列的偏差平方和与自由度的计算。

1、拟水平列的偏差平方和与自由度的分解

$$S_B=S_{2'}=\frac{K_{12'}^2}{3}+\frac{K_{22'}^2}{6}-CT$$

$$=\frac{K_{12}^2}{3}+\frac{(K_{22}+K_{32})^2}{6}-CT$$

$$=\frac{K_{12}^2}{3}+\frac{K_{22}^2}{6}+\frac{K_{22}\times K_{32}}{3}+\frac{K_{32}^2}{6}-CT$$

令 $S_{2''}=\frac{1}{6}(K_{22}-K_{32})^2$

则 $S_{2'}+S_{2''}=\frac{K_{12}^2}{3}+\frac{K_{22}^2}{3}+\frac{K_{32}^2}{3}-CT$

又因为 $S_2=\frac{K_{12}^2}{3}+\frac{K_{22}^2}{3}+\frac{K_{32}^2}{3}-CT$

所以 $S_2=S_{2'}+S_{2''}$

这说明将 $L_9(3^4)$正交表用拟水平法改造后，原来第二列的偏差平方和可分解为两个部分，一部分为拟水平列(2'列)的偏差平方和（$S_{2'}$），另一部分则属于误差引起的偏差平方和($S_{2''}$)，应并入误差项中。同样，原来第二列的自由度也分为两部分，一部分为拟水平列的自由度 $f_{2'}=1$，另一部分为误差的自由度 $f_{2''}=1$。

2、各列偏差平方和与自由度的计算。

$CT=\frac{T^2}{n}=\frac{797.5^2}{9}=70667.4$

$S_B=S_{2'}=\frac{275.5^2}{3}+\frac{522^2}{6}-70667.4=46.7$

$f_B=f_{2'}=1$

$S_{2''}=\frac{1}{6}(262-260)^2=0.67$

$f_{2''}=1$

$S_A=S_1=\frac{1}{3}(275.5^2+252^2+270^2)-70667.4=100.7$

$S_C=S_3=\frac{1}{3}(245.5^2+265^2+287^2)-70667.4=287.4$

$S_e=S_4=\frac{1}{3}(272.5^2+265^2+260^2)-70667.4=26.4$

$f_A=f_C=f_e=3-1=2$

$$S_{e'}=S_e+S_{2'}=26.4+0.67=27.07$$

$$f_{e'}=f_e+f_{2'}=2+1=3$$

拟水平法的偏差平方和与自由度也可以这样计算：

$$CT=\frac{T^2}{9}=\frac{797.5^2}{9}=70667.4$$

$$S_A=S_1=\frac{1}{3}(275.5^2+252^2+270^2)-70667.4=100.7$$

$$S_B=S_{2'}=\frac{275.5^2}{3}+\frac{522^2}{6}-70667.4=46.7$$

$$S_C=S_3=\frac{1}{3}(245.5^2+265^2+287^2)-70667.4=287.4$$

$$S_T=\sum_{i=1}^{9}x_i^2-CT=71129.25-70667.4=461.85$$

$$S_e=S_T-S_A-S_B-S_C=27.05$$

$$f_T=9-1=8 \qquad f_A=2 \qquad f_B=1 \qquad f_C=2$$

$$f_e=f_T-f_A-f_B-f_C=3$$

3、列出方差分析表

根据以上计算，列出方差分析表，如表 10-7 所示。

表 10-7 方差分析表

方差来源	偏差平方和	自由度	方差	F 值	F	显著性
A	100.7	2	50.35	5.58	$F_{0.05(2,3)}=9.55$	
B	46.7	1	46.7	5.18	$F_{0.01(2,3)}=30.28$	
C	287.4	2	143.7	15.93	$F_{0.05(1,3)}=10.13$	*
误差 e’	27.07	3	9.02			
总和	461.87	8				

从表 10-7 可以看出，因素 C 对试验结果的影响显著，因素 A 和 B 的影响不显著。因素的主次顺序为 CAB。优水平组合为 $A_1B_1C_3$。

拟因素设计法

拟因素设计法是综合运用并列法和拟水平法，将水平数较多的因素安排在水平数较少的正交表中的方法。它不仅可以解决多因素不等水平的试验问题，还可以考察交互作用，可以大大减少试验次数。拟因素设计法常用于把三水平因素安排在二水平正交表中的多因素试验。

一、问题的提出

例 10-3 在用麦芽进行双醪(lao2，浊酒、醇酒)浸出糖化工艺的研究中，欲通过正交试验探讨糖化醪糖化工艺条件，试验因素与水平表见表 10-8。

表 10-8 因素水平表

因素 水平	A 酶渗出时间 (min)	B 蛋白质休上期 (℃/min)	C 糖化时间 (min)	D 糖化温度 (℃)	E 过滤温度 (℃)	F 过滤前保温期 (min)
1	0	50/45	50	61	72	0
2	10	50/90	90	65	78	10
3	30	45/90		69		30

除了考察各试验因素外，还要求考察交互作用 E×F，试验指标为麦芽汁的浸出率。

这是一个 $3^4×2^2$ 的六因素试验问题，显然没有对口的混合水平正交表可以直接使用。如果用拟水平法，则应选用 $L_{27}(3^{13})$的正交表，试验次数较多。若遇到更复杂的试验，如 $4^1×3^2×2^5$ 的试验，则利用上述任何一种试验设计方法都不能完成任务。拟因素法正是解决这类复杂的多因素试验问题的行之有效的方法。

二、正交表的选择

在进行拟因素设计之前，先根据实际试验问题选择一个合适的正

$f_A = f_B = f_D = f_F = 3-1 = 2$

$f_C = f_E = 2-1 = 1$

$f_{E\times F} = (2-1)(3-1) = 2$

总自由度 $f_{总} = 4\times2 + 2\times1 + 2 = 12$

试验次数应大于 $f_{总} + 1 = 13$，为此可选择 $L_{16}(2^{15})$的正交表，用拟因素设计法来安排试验。

三、正交表的改造与表头设计

拟因素设计法是先根据所选正交表的交互作用表，用并列法把两个二水平列并成一个四水平列，然后再用拟水平法，把三水平因素(例如 A)的某一个水平(通常认为是较重要的水平如 A_2)重复一次，使 A 变成四水平的因素，其水平是 $A_1A_2A_2A_3$，然后将这四水平因素 A 放入新并成的四水平列中。这是并列法与拟水平法的综合运用，相当于把两个二水平列并成一个四水平列，再安排一个三水平的因素。

具体地说，对二水平表 $L_{16}(2^{15})$中的第 2、3 列改为一个四水平列，再将一个三水平的因素安排在其中：

$(1，1)\rightarrow1$，　$(1，2)\rightarrow2$，　$(2，1)\rightarrow2$，　$(2，2)\rightarrow3$

再按上述规则将第 4、5 两列，第 6、7 两列与第 10、11 两列分别改造成四水平列，各安排一个三水平的因素。然后在改造后的正交表上进行表头设计，具体步骤如下：

(1) 先将因素 A 安排在第 2、3 两列改造成的新列 1 上，再将因素 D、F 各安排在新列 2’和 3’上。这时第 2、3 列，第 4、5 列与第 6、

1 列。为了避免混杂，这一列既不安排因素，也不考察交互作用和估计试验误差，称为赋闲列。一般地，在用二水平正交表作拟因素设计时，把任何两列改造成一个新的四水平列后，这两列的交互作用列都应该赋闲，以免引起混杂。采用拟因素法进行表头设计应遵循的一条原则是应当设法使改造后的若干新列共有一个赋闲列，以减少赋闲列的列数，提高正交表各列的使用效率。在本例中，之所以选第 2、3 列，第 4、5 列，第 6、7 列，第 10、11 列进行改造，就是因为从二列间的交互作用表可知他们的交互作用列都是第 1 列。这样可使他们共有一个赋闲列。

(2) 将因素 C、E 分别安排在第 8、9 列上，则 E×F 为第 14、15 两列。

(3) 最后把不考虑交互作用的因素 B 安排在由第 10、11 两列改造成的新列 4 上。这样就完成了表头设计，见表 10-9。

表 10-9 表头设计

因素	赋闲	A	D	F	C	E	B		E×F
列号	1	2 3 (1’)	4 5 (2’)	6 7 (3’)	8	9	10 11 (4’)	12 13	14 15

在进行表头设计时，一般应先安排需要考察交互作用的因素，后安排不需要考察交互作用的因素，对本例，如果不先安排因素 D、F 而先安排因素 B，就会发生混杂。

本例的试验方案和试验数据表见表 10-11。

表 10-11 试验方案和试验数据表

因素	赋闲	A		D		F		C	E	B				E×F		试验指标
列号 试验号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	x_i