

第 8 章 正交试验设计的方差分析

前面我们讨论了如何安排正交试验以及用极差分析法(即直观分析法)对试验结果进行计算分析. 极差分析法简单明了, 通俗易懂, 计算工作量少, 便于普及推广. 但这种方法不能把试验中由于试验条件的改变引起的数据波动, 同试验误差引起的数据波动区分开来. 也就是说, 不能区分因素各水平对应的试验结果间的差异, 究竟是由于因素水平不同引起的, 还是由于试验误差引起的, 即不知道试验的精度. 同时, 对影响试验结果的各个因素的重要程度, 既不能给出精确的定量估计, 也不能提供一个标准, 用来判断所考察的因素的作用是否显著.

为了弥补极差分析法的不足, 对试验结果的分析可采用方差分析法.

8.1 正交试验方差分析的基本步骤

在第 2 章中我们已经介绍过, 方差分析的基本思想是将数据的总偏差平方和(S_T)分解为因素的偏差平方和(S_A 、 S_B)和误差的偏差平方和(S_e), 然后将偏差平方和除以相对应的自由度(f) 得到方差(V_A 、 V_B), 最后利用因素方差与误差方差之比(V_A/V_e , V_B/V_e), 作 F 检验, 即可判断因素的作用是否显著. 正交试验设计的方差分析也是按这样的步骤进行的, 所不同的是这是考虑的是多因素试验的方差分析, 而第 2 章中只考虑单因素和双因素试验的方差分析.

一、计算

1. 偏差平方和与自由度的计算

方差分析的关键是偏差平方和的分解, 现在以最简单的 $L_4(2^3)$ 正交表上安排的试验为例来说明(见表 8-1, 板书). 不考虑哪些因素安排在哪些列上(即表头设计时), 设试验结果为 x_1, x_2, x_3 和 x_4 .

总的偏差平方和:

$$S_T = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{T^2}{n}$$

$$= (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2) - \frac{(x_1 + x_2 + x_3 + x_4)^2}{4}$$

$$= \frac{3}{4} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2) - \frac{1}{2} (x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_1 x_4 + x_2 x_3 + x_2 x_4 + x_3 x_4)$$

整理后可得

第 1 列各水平偏差平方和为

$$S_1 = 2(K_{11} - \bar{x})^2 + 2(K_{21} - \bar{x})^2$$

$$= 2 \left[\left(\frac{K_{11}}{2} - \frac{T}{4} \right)^2 + \left(\frac{K_{21}}{2} - \frac{T}{4} \right)^2 \right]$$

$$= 2 \left[\frac{K_{11}^2}{4} - \frac{T^2}{16} + \frac{K_{21}^2}{4} - \frac{T^2}{16} + \frac{1}{4} K_{11} T - \frac{1}{4} K_{21} T \right]$$

$$= \frac{1}{2} (K_{11}^2 - K_{21}^2) - \frac{1}{4} T^2 + \frac{1}{4} (T x_{11} - T x_{21})$$

$$= \frac{1}{2} [(x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_4)^2] - \frac{1}{4} (x_1 - x_2 - x_3 + x_4)^2$$

$$= \frac{1}{4} (x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 + x_4^2) - \frac{1}{2} (x_1 x_3 - x_1 x_4 - x_2 x_3 + x_2 x_4 - x_1 x_2 + x_3 x_4)$$

表 8-1 $L_4(2^3)$ 正交表及计算表

列号 试验号	1	2	3	试验数据
-----------	---	---	---	------

1	1	1	1	x_1
2	1	2	2	x_2
3	2	1	2	x_3
4	2	2	1	x_4
K_{1j}	$K_{11} = x_1 + x_2$	$K_{12} = x_1 + x_3$	$K_{13} = x_1 + x_4$	$T = x_1 + x_2 + x_3 + x_4$
K_{2j}	$K_{21} = x_3 + x_4$	$K_{22} = x_2 + x_4$	$K_{23} = x_2 + x_3$	
K_{1j}	$K_{11} = \frac{x_1 + x_2}{2}$	$K_{12} = \frac{x_1 + x_3}{2}$	$K_{13} = \frac{x_1 + x_4}{2}$	$\bar{x} = \frac{(x_1 + x_2 + x_3 + x_4)}{4}$
K_{2j}	$K_{21} = \frac{x_3 + x_4}{2}$	$K_{22} = \frac{x_2 + x_4}{2}$	$K_{23} = \frac{x_2 + x_3}{2}$	

注: K_{ij} 表示第 j 列第 i 水平的指标值之和; K_{ij} 表示第 j 列第 i 水平的平均指标值; T 表示指标值总和; \bar{x} 表示平均指标值.

同理, 第 2、3 列各水平的偏差平方和 S_2 、 S_3 为

$$S_2 = 2(K_{12} - \bar{x})^2 + 2(K_{22} - \bar{x})^2$$

$$= \frac{1}{2}(K_{12}^2 - K_{22}^2) - \frac{1}{4}T^2$$

$$= \frac{1}{4}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2) - \frac{1}{2}(x_1x_2 + x_1x_4 + x_2x_3 + x_3x_4 + x_1x_3 + x_2x_4)$$

$$S_3 = 2(K_{13} - \bar{x})^2 + (K_{23} - \bar{x})^2$$

$$= \frac{1}{2}(K_{13}^2 - K_{23}^2) - \frac{1}{4}T^2$$

$$= \frac{1}{4}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2) - \frac{1}{2}(x_1x_2 + x_1x_3 + x_2x_4 + x_3x_4 + x_1x_4 + x_2x_3)$$

由此可得

$$S_T = S_1 + S_2 + S_3 \quad (8-1)$$

式(8-1)是正交表 $L_4(2_3)$ 的总偏差平方和的分解公式, 即 $L_4(2_3)$ 的总偏差平方和等于各列偏差平方和之和.

若在 $L_4(2_3)$ 正交表的第 1 列和第 2 列分别安排二水平因素 A、B, 在不考虑 A、B 因素间交互作用的情况下, 则第 3 列(空列)是误差列.

同样也可以证明

$$S = S_T + S_A + S_B + S_e \quad (8-2)$$

上式也是总偏差平方和的分解公式, 即总偏差平方和等于各列因素的偏差平方和与误差的偏差平方和之和.

我们可以把上例推广到一般情况:

用饱和正交表 $L_n(m_k)$ 安排试验 (见表 8-2, p160), 总的试验次数为 n , 每个因素的水平数为 m , 则每个水平作 r 次试验, $r = \frac{n}{m}$. 试验结果

为 $x_{11}, x_{12}, x_{13}, \dots, x_{1n}$. 令

$$T = \sum_{i=1}^n x_i, \quad CT = \frac{T^2}{n}, \quad \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad Q_T = \sum_{i=1}^n x_i^2$$

则总偏差平方和为

$$S_T = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{T^2}{n} = Q_T - CT \quad (8-3)$$

列偏差平方和为

$$S_j = r \sum_{i=1}^m (K_{ij} - \bar{x})^2 = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^m K_{ij}^2 - \frac{T^2}{n} \quad (8-4)$$

$Q_j = CT \quad (i = 1, 2, \dots, k)$

其中 $Q_j = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^m K_{ij}^2$

特别地, 当 $m=2$ (即二水平) 时, 式 (8-4) 可表示成:

$$\begin{aligned}
S_j &= \frac{1}{r} (K_{1j}^2 - K_{2j}^2) \frac{T^2}{n} \\
&= \frac{m}{n} (K_{1j}^2 - K_{2j}^2) \frac{1}{n} (K_{1j} - K_{2j})^2 \\
&= \frac{2}{n} (K_{1j}^2 - K_{2j}^2) \frac{1}{n} (K_{1j} - K_{2j})^2 \\
&= \frac{1}{n} (K_{1j} - K_{2j})^2
\end{aligned} \tag{8-5}$$

列偏差平方和 S_j 是第 j 列中各水平对应的试验数据平均值与总平均值的偏差平方和，它反映了该列水平变动所引起的试验数据的波动。若该列安排的是因素，就称 S_j 为该因素的偏差平方和；若该列安排的是交互作用，就称 S_j 为该交互作用的偏差平方和；若该列为空列，则 S_j 表示由于试验误差和未被考察的某些交互作用或某些条件因素所引起的波动。在正交试验设计中，通常把空列的偏差平方和作为试验误差的偏差平方和，虽然它属于模型误差，一般比试验误差大（当作安全系数考虑），但用它作为试验误差进行显著性检验，可使检验结果更可靠些。

总偏差平方和的自由度： $f_T = n-1$

第 j 列偏差平方和的自由度： $f_j = m-1$ (m : 第 j 列水平数)

此外，可以证明：

$$S_T = \sum_{j=1}^k S_j = \sum_{k_{\text{因}}} S_j + \sum_{k_{\text{交}}} S_j + \sum_{k_{\text{空}}} S_j \tag{8-6}$$

$$f_T = \sum_{j=1}^k f_j = \sum_{k_{\text{因}}} f_j + \sum_{k_{\text{交}}} f_j + \sum_{k_{\text{空}}} f_j \tag{8-7}$$

式中 $k_{\text{因}}$ 、 $k_{\text{交}}$ 和 $k_{\text{空}}$ 分别为试验因素、试验考察的交互作用和空列在正交表中所占的列数。并且

$$k = k_{\text{因}} + k_{\text{交}} + k_{\text{空}}$$

注意：

(1) 当某个交互作用占有正交表的某几列时，该交互作用的偏差平方和就等于所占各列偏差平方之和，其自由度也等于所占各列的自由度之和；

(2) 误差的偏差平方和 (S_e) 等于所占有空列的偏差平方和之和，其自由度等于所有空列的自由度之和，即：

$$\sum_{k_{\text{空}}} S_j = S_e, \quad \sum_{k_{\text{空}}} f_j = f_e$$

(3) 上面讨论的虽然是等水平饱和正交表 $L_n(m_k)$ 的情况，但是对于饱和的混合型正交表 $L_n(m_{k1} \times m_{k2})$ 也适用，不过要换上相应的 m 和 k 值。(有关“饱和正交表”与“不饱和正交表”的概念，请参见第 6 节 (p191)!))

2、方差的计算 ($V_{\text{因}}$, $V_{\text{交}}$, V_e)

方差等于各偏差平方和除以相应的自由度，即平均偏差平方和。

$$V_{\text{因}} = \frac{S_{\text{因}}}{f_{\text{因}}} \quad V_{\text{交}} = \frac{S_{\text{交}}}{f_{\text{交}}} \quad V_e = \frac{S_e}{f_e}$$

二、显著性检验

数学上可以证明：在“假设 H_0 ：某因素或某交互作用对试验结果影响不显著”成立时，统计量 F

$$F = \frac{V_{\text{因}} \text{ (或 } V_{\text{交}} \text{)}}{V_e} \sim F_{f_{\text{因}} \text{ (或 } f_{\text{交}} \text{)}, f_e} \quad (8-9)$$

服从第一自由度为 $f_{\text{因}}$ (或 $f_{\text{交}}$)，第二自由度为 f_e 的 F 分布。

对于给定的显著性水平 α ，查 F 分布表得临界值 F_{α} ，若计算出的 F 值 $F_0 > F_{\alpha}$ 则拒绝原假设，认为该因素或该交互作用对试验的结

果有显著影响；若计算出的 F 值 $F_0 \leq F_\alpha$ ，则接受原假设，认为该因素或该交互作用对试验结果无显著影响。

经显著性检验后，可把检验结果列出方差分析表，如表 8-3 所示

表 8-3 正交试验方差分析表

方差来源	偏差平方和	自由度	方差	F 值	F_α	显著性
A	$S_A = S_1$	$f_A = m-1$	$V_A = S_A / f_A$	$F_A = V_A / V_e$	查表	
B	$S_B = S_2$	$f_B = m-1$	$V_B = S_B / f_B$	$F_B = V_B / V_e$		
A×B	$S_{A \times B} = S_3$	$f_{A \times B} = f_A \times f_B$	$V_{A \times B} = S_{A \times B} / f_{A \times B}$	$F_{A \times B} = V_{A \times B} / V_e$		
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		
误差 e	S_e	f_e	$V_e = S_e / f_e$			
总和	S_T	$f_T = n-1$				

在进行正交试验方差分析时，应注意以下几点：

(1) 进行 F 检验时，要用到 S_e 和 f_e ，而

$$S_e = \sum_{k_{\text{空}}} s_j, \quad f_e = \sum_{k_{\text{空}}} f_j$$

所以，为进行方差分析，选正交表时应留出一定的空列。当无空列时，则应进行重复试验，以便求得 S_{e_2} 的值(见 p181 第 5 节)。

(2) 误差自由度 f_e 一般不应小于 2，即 $f_e \geq 2$ ，否则 F 检验的灵敏度很低，有时即使因素对试验指标有影响，用 F 检验也判断不出来。

(3) 如果 $f_e = 1$ ，为了增大 f_e ，提高 F 检验的灵敏度，在进行显著性检验之前，先比较 $V_{\text{因}}$ 和 $V_{\text{交}}$ 与 V_e 之间的差异程度。如果与误差方差 V_e 的大小相近，说明该因素或该交互作用对试验结果的影响微乎其微，其偏差平方和是由于随机误差引起的。因此，可并入误差偏差平方和 S_e 中。通常把满足 $V_{\text{因}}$ (或 $V_{\text{交}}$) $< 2V_e$ 的那些因素或交互作用的偏

差平方和，并入误差的偏差平方和 S_e 中，从而得到新的误差偏差平方和 S_e ，相应的自由度也并入 f_e 中，从而得到 f_e ，然后用

$$F_{\square} = \frac{V_{\square}(\text{或}V_{\text{交}})}{V_e} \sim F_{\square} [f_{\square}(\text{或}f_{\text{交}}, f_e)] \quad (8-10)$$

其中，校正后的误差方差为

$$V_e = \frac{S_e}{f_e}$$

对其他因素或交互作用进行检验，这样使自由度 f_e 扩大到 f_e ，故可以提高 F 检验的灵敏度。

三、最优条件的确定

根据显著性检验结果，可以确定各因素对试验指标影响的主次顺序(通常根据 F 的大小判断)，对于显著性因素，若不考虑交互作用或交互作用不显著，则可通过比较该因素各水平对应的数据和 (K_{ij}) 的大小，确定最优水平，各因素的优水平组合即为该试验的最佳水平组合，即最优条件；对于交互作用显著的某二个因素，必须先通过比较这二个因素各水平组合下试验数据之和的大小(即相当于极差分析中的二元表或搭配表)，然后再确定其最佳水平组合。

最后，在最优工艺条件下进行验证实验。

8.2 不考虑交互作用的等水平正交试验方差分析

8.2.1 二水平正交试验的方差分析(因学时有限，不讲解！只讲解三水平情况，因为三水平会，二水平自然就会！)

例 8-1 在双歧杆菌酸奶研制中，为选择最佳发酵条件，用 $L_8(2^7)$ 正交表安排了正交试验，试验因素与水平见表 8-4，试验方案及结果见表 8-5。试对试验结果进行方差分析。

表 8-4 试验因素水平表

因素 水平	葡萄糖 % A	1#生长促进剂 % B	接种量 % C	厌氧处理 D	基质浓度 % E	2#生长促进剂 % F	试验指标
1	2	1	3	充氮气	10	0.25	活菌数的对数
2	0	0	5	不充气	12	0	

\therefore 是六因素二水平试验，且不考虑交互作用， \therefore 用 $L_8(2^7)$ 最好！

表 8-5 试验方案及结果分析

表头设计	A	B	C		D	E	F	试验数据	
列号 试验号	1	2	3	4	5	6	7	x_i	x_i^2
1	1(2)	1(1)	1(3)	1	1(充氮气)	1(10)	1(0.25)	7.580	57.456
2	1	1	1	2	2(不充气)	2(12)	2(0)	2.477	6.136
3	1	2(0)	2(5)	1	1	2	2	2.699	7.285
4	1	2	2	2	2	1	1	7.568	57.275
5	2(0)	1	2	1	2	1	2	2.477	6.136
6	2	1	2	2	1	2	1	7.531	56.716
7	2	2	1	1	2	2	1	6.602	43.586
8	2	2	1	2	1	1	2	2.000	4.000
K_{lj}	20.324	20.065	18.659	19.358	19.810	19.625	29.281	T=38.934	
K_{2i}	18.610	18.869	20.275	19.576	19.124	19.309	9.653		
$K - K_{lj - K_{2j}}$	1.714	1.196	-1.616	-0.218	0.686	0.316	19.628		
S_i	0.367	0.179	0.326	0.00594	0.0588	0.0125	48.157		

一、计算

K 值 (K_{1j} 和 K_{2j})

各列各水平的试验数据（即指标值）之和 K_{1j} 、 K_{2j} 以及 $(K_{1j} - K_{2j})$ 的值，填入表 8-5 中，如

$$K_{1c} = 7.580 + 2.477 + 6.602 + 2.000 = 18.659$$

$$K_{2c} = 2.699 + 7.568 + 2.477 + 7.531 = 20.275$$

2、计算各列的偏差平方和 S_j 及其自由度 f_j

由式 (8-5) 知， $S_j = \frac{1}{n} (K_{1j} - K_{2j})^2$

$$S_A = \frac{1}{8} \times 1.714^2 = 0.367$$

$$S_B = \frac{1}{8} \times 1.196^2 = 0.179$$

$$S_C = \frac{1}{8} \times (-1.616)^2 = 0.326$$

$$S_e = \frac{1}{8} \times (-0.218)^2 = 0.00594$$

□□

$$f_j = m - 1 = 2 - 1 = 1$$

$$f_T = n - 1 = 8 - 1 = 7$$

$$f_e = f_j = f_4 = 1$$

将求得的 S_j 值也填入表 8-5 中。为了判断是否计算有误，进行以下验算：

① S_T 的验算

$$T = \sum_{i=1}^8 x_i = 38.934, \quad CT = \frac{T^2}{n} = \frac{1}{8} \times 38.934^2 = 189.482$$

$$Q = \sum_{i=1}^8 x_i^2 = 57.456 + 6.136 + \square + 4.000 = 238.589$$

$$S_T = Q - CT = 238.589 - 189.482 = 49.107$$

$$= S_j = S_A + S_B + S_e$$

$$= 0.367 + 0.179 + \square + 0.00594 = 49.107$$

② f_T 的验算

$$f_T = \sum_{j=1}^k f_j = f_A + f_B + \square + f_e = 1 + 1 + \square + 1 = 7$$

另外 $f_T = n - 1 = 8 - 1 = 7$

$\therefore S_T$ 和 f_T 均计算无误。

3、计算方差

$$V_A = S_A / f_A = 0.367 / 1 = 0.367$$

$$V_B = S_B / f_B = 0.179 / 1 = 0.179$$

$$\square$$

$$V_e = S_e / f_e = 0.00594 / 1 = 0.00594$$

注意：

$\therefore f_e = 1 < 2$ ，F 检验的灵敏度低！

\therefore 需要校正 $f_e \rightarrow f_e$ 、 $S_e \rightarrow S_e$ 、 $V_e \rightarrow V_e$

二、显著性检验

根据上述计算结果，进行显著性检验，列出方差分析表，如表 8-6 所示。

$\therefore V_E = 0.0125$ 最小， $V_E / V_e = 0.0125 / 0.00594 = 2.10$

\therefore 因素 E 对试验指标的影响可忽略，故将其偏差平方和 S_E 并入误差平方和 S_e 中，即

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/717200036153006040>