

9

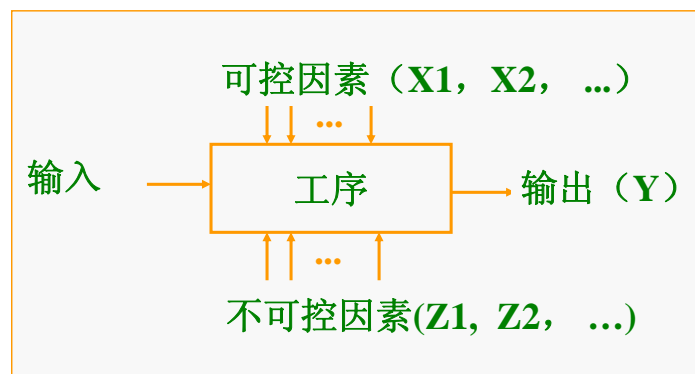
试验设计概述

CHAPTER OUTLINE

- 9.1 试验设计概述
- 9.2 试验设计的基本步骤
- 9.3 2水平全因子试验设计
- 9.4 2水平部分因子试验设计
- 9.5 响应曲面分析



9.1 试验设计概述



试验设计的目的

- 确定显著性影响因素(析因)
 - Screening
- 优化工艺参数
 - Optimization
- 容差设计
 - Tolerance Design
- 稳健性设计
 - Robust Design

DOE的基本类型

- 全因子试验
- 部分因子试验
- 田口方法
- 响应曲面分析
- 其它试验设计方法

9.2 试验设计的基本步骤

- 明确试验目标
- 确定响应输出
- 确定影响因素
- 选择试验类型
- 确定试验策略
- 运行试验、记录结果和试验数据检查
- 模型拟合和诊断
- 解释模型
- 验证结果

一、明确试验的目的

- 为什么做试验？
- 试验欲达到什么目标？
- 绘制工序流程图
- 举例：通过试验设计优化SMT的工艺参数

练习：分组讨论，根据企业的生产流程，选择一个试验设计的对象，并说明试验设计的目的。

二、选择响应输出（Y）

- 输出尽量是计量值数据
- 输出应真正反映工序/产品的关键质量特征
- 测量系统的能力必须充足
- 当响应输出不止一个时，可以同时考虑多个响应输出，但Y的个数太多时，会增加问题的复杂性
- 对于每一个响应输出，确定其目标（望大、望小、望目或减少变异）

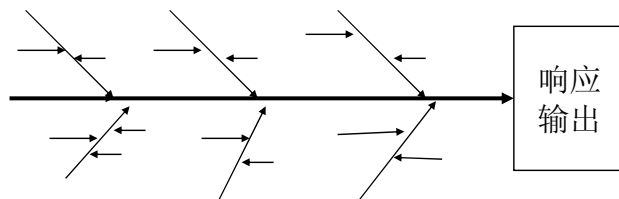
确定响应输出的格式举例

响应输出：锡浆厚度
测量单位：MIL
测量仪器：三维激光测厚仪 型号：
测量方法：
测量系统能力（R&R%）：8%
是否存在其它的测量方法或工具：

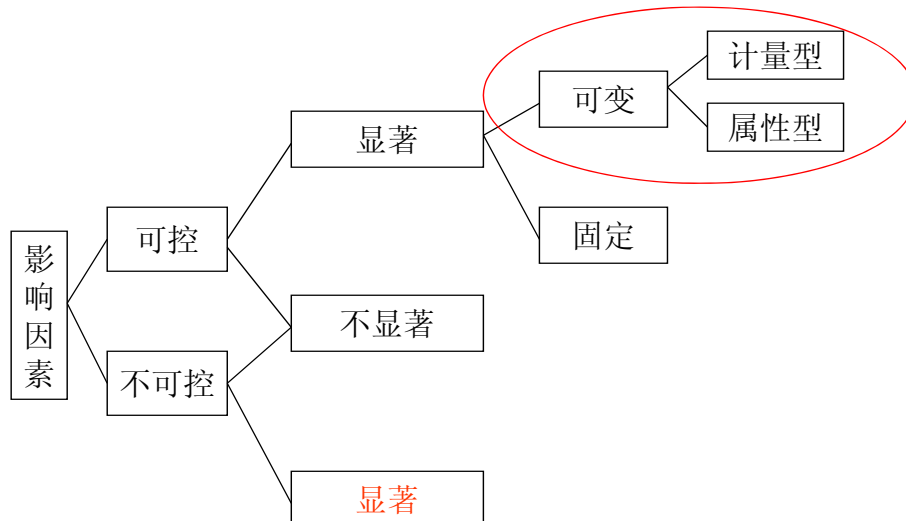
练习：分组讨论，根据所选的试验对象，确定响应输出Y，并给出Y的目标。

三、确定影响响应输出的主要因素（X）

1、采用因果分析找出所有可能的影响因素

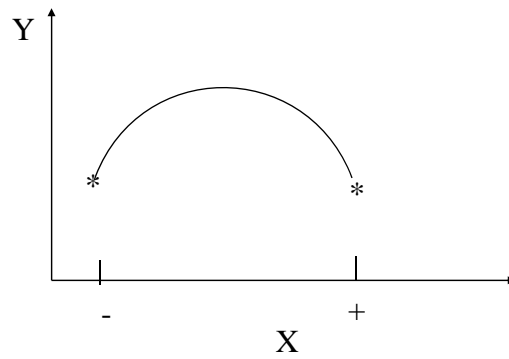


2、对影响因素进行分类

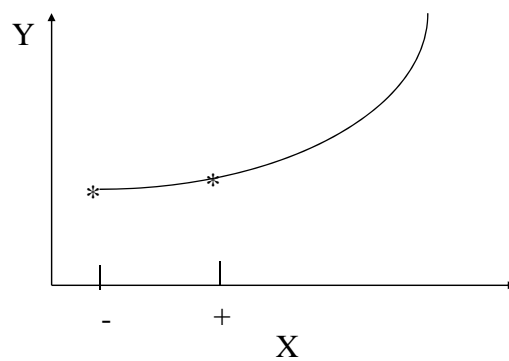


3、确定因素的位级

因素的位级不宜选得过大



因素位级的选取也不应太小



因素位级选择应注意的问题

- 位级的选择会对试验结果有显著的影响
- 要考虑到有些试验条件是否可行
- 要根据工程经验进行分析
- 要考虑因素间是否存在交互作用
- 一次试验不可能解决所有问题，试验本身也是一个知识发现和学习的过程，确定位级时，往往要考虑上一次试验的结果

确定影响因素的格式举例：

试验中可变的影响因素

影响因素	类型	位级	测量单位	是否有中心点
角度	计量型	60-70	度	有
速度	计量型	20-40	mm/s	有
压力	计量型	5-9	kg	有

可能存在的交互作用：

速度/压力

角度/压力

试验中固定的因素：

因素名	固定水平	测量单位
Stencil 厚度	6	mil
锡浆黏度	280	cps

不可控因素及其对不可控因素的监测方式：

对位级采用编码数据表示

如实际压力为30-50kg, 编码数据为-1和+1

$$X_c = \frac{X - X_{mid}}{\left(\frac{X_{\max} - X_{\min}}{2}\right)}$$

如实际压力为46kg, 编码数据为:

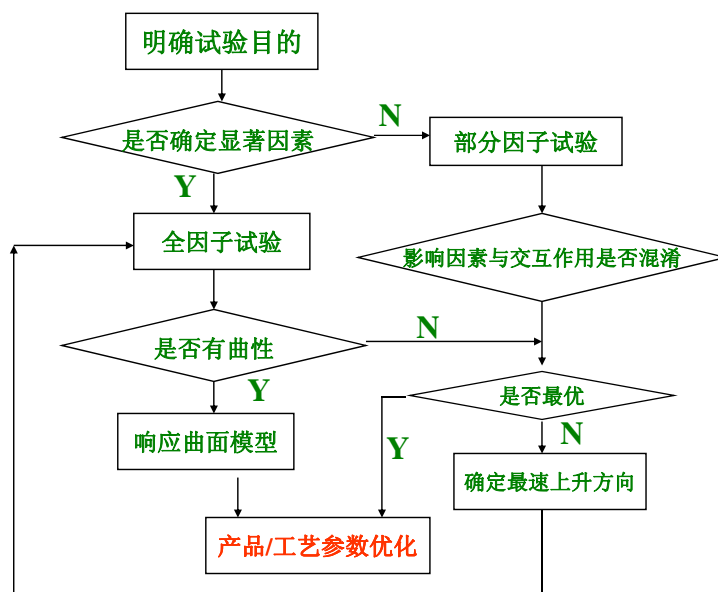
$$X_c = \frac{46 - 40}{\left(\frac{50 - 30}{2}\right)} = 0.6$$

练习

根据选定的试验, 在步骤1和2的基础上, 确定试验的影响因素。

四、选择试验类型

- 试验类型包括：
 - 全因子试验
 - 部分因子试验
 - 田口方法
 - 响应曲面分析
 - 其它试验设计方法



五、确定试验策略

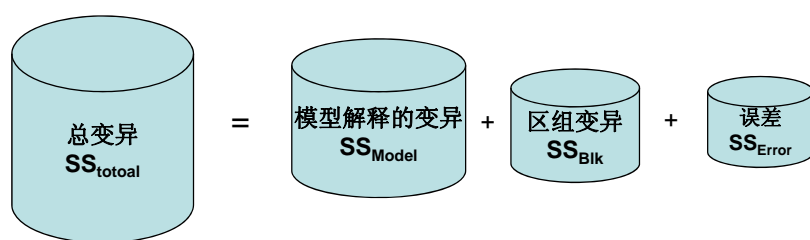
- 确定试验的单位产品
- 确定响应输出的变异来源-多变异分析
- 决定是否进行区组化
- 确定试验的随机化方法

六、进行试验

- 除试验过程应改变的因素外，其它因素均不应改变
- 试验过程中要记录不可控因素的变化
- 试验要随机化
- 试验是否需要区组化设计

随机化：试验顺序是随机的，确保试验过程中不可控因素导致的误差均匀地分配在每次试验中。

区组化：将一组试验根据某些因素的变化区分为不同的区组，将区组内的变异作为随机误差，随机化在区组内进行。区组化减少了随机性误差。



七、模型拟合和诊断

- 根据所选择的试验方法进行模型拟合
- 检查模型总体拟合情况(R^2 和 R^2_{adj})
- 检查模型是否显著 (ANOVA)
- 检查模型中的每一项是否显著 (F检验或t检验)
- 检查模型是否存在曲性 (Lack of Fit 拟合不良检验)
- 删除模型中的非显著项
- 计算拟合模型的残差和预测值

模型诊断

- 残差正态性检验
- 异方差检验
- 响应独立性检验

另外在模型诊断中，
还要检查是否存在减少方差的可能性

八、解释模型

根据模型确定最优的工艺参数，对于一阶模型，若最优点不在试验设计的区间内，要根据模型确定最速上升方向。

九、验证试验结果

根据模型解释的结果确定最优工艺参数，并运行试验。检查是否达到了期望的结果

9.3 2水平全因子试验设计

2水平全因子试验设计的特点：

- 所有因子的水平完全组合 (2^n)
- 所有主因子和交互作用均可估计出
- “线性”模型

对于两因子和三因子的问题，其模型为：

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \varepsilon$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{123} X_1 X_2 X_3 + \varepsilon$$

2³ 全因子DOE

主因子

交互作用

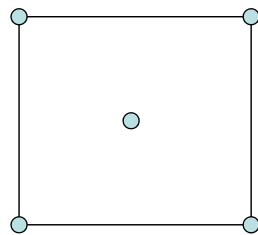
No.	X1	X2	X3	X1X2	X2X3	X1X3	X1X2X3	Y
1	-	-	-	+	+	+	-	
2	+	-	-	-	+	-	+	
3	-	+	-	-	-	+	+	
4	+	+	-	+	-	-	-	
5	-	-	+	+	-	-	+	
6	+	-	+	-	-	+	-	
7	-	+	+	-	+	-	-	
8	+	+	+	+	+	+	+	
9	0	0	0	0	0	0	0	
10	0	0	0	0	0	0	0	
11	0	0	0	0	0	0	0	



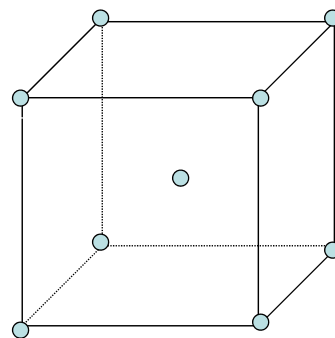
天津大学

27

全因子试验的几何解释



两因子



三因子



天津大学

28

试验设计的平衡性和正交性

平衡性：-简化试验数据分析

$$\sum X_i = 0$$

正交性：-每一项都可以独立地被估计

$$\sum (X_i \times X_j) = 0$$

中心点的作用

- 检验线性假设是否成立
- 取得纯误差项
- 增加中心点不会破坏试验的平衡性和正交性

2²全因子试验设计

- 2² 设计，无交互作用，无重复试验
- 2² 设计，无交互作用，有重复试验
- 2² 设计，交互作用不显著，有重复试验
- 2² 设计，交互作用不显著，有重复试验，有中心点

1、2² 设计，无交互作用，无重复试验

X ₁	X ₂	Y
-	-	10
+	-	20
-	+	15
+	+	25

因子影响分析

因子X1和X2的影响:

$$\Delta_{X1} = \frac{25+20}{2} - \frac{10+15}{2} = 10$$

$$\Delta_{X2} = \frac{15+25}{2} - \frac{10+20}{2} = 5$$

交互作用的影响:

$$\Delta_{X1X2} = \frac{10+25}{2} - \frac{15+20}{2} = 0$$

全因子试验的模型拟合

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \varepsilon$$



$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 + \hat{\beta}_2 X_2 + \hat{\beta}_{12} X_1 X_2$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\Delta_{X1}}{2} = 5$$

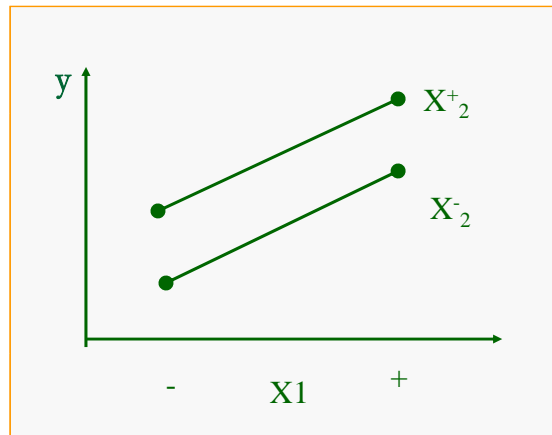
$$\hat{\beta}_2 = \frac{\Delta_{X2}}{2} = 2.5$$

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{\Delta_{X1X2}}{2} = 0$$

$$\hat{\beta}_0 = \frac{\sum Y_i}{4} = 17.5$$

$$\rightarrow y = 17.5 + 5x_1 + 2.5x_2$$

交互作用图



2、 2^2 设计，无交互作用，有重复试验

StdOrder	RunOrder	CenterPt	Blocks	X1	X2	Y	
1	1	1	1	-1	-1	10	
2	2	1	1	1	-1	20	
3	3	1	1	-1	1	15	
4	4	1	1	1	1	25	
5	5	1	1	-1	-1	11	
6	6	1	1	1	-1	21	
7	7	1	1	-1	1	14	
8	8	1	1	1	1	24	

3、 2^2 设计，交互作用不显著，有重复试验

StdOrder	RunOrder	CenterPt	Blocks	X1	X2	Y
1	1	1	1	-1	-1	10
2	2	1	1	1	-1	20
3	3	1	1	-1	1	15
4	4	1	1	1	1	25
5	5	1	1	-1	-1	12
6	6	1	1	1	-1	19
7	7	1	1	-1	1	16
8	8	1	1	1	1	26

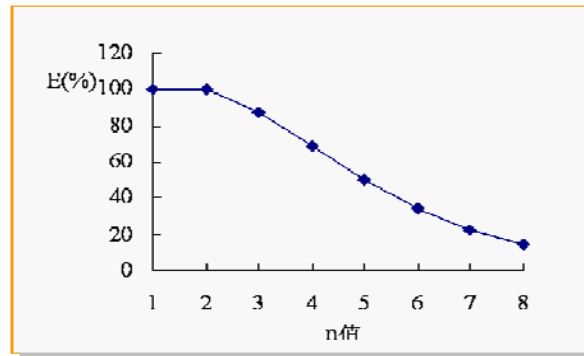
4、 2^2 设计，交互作用不显著，有重复试验，有中心点

StdOrder	RunOrder	CenterPt	Blocks	X1	X2	Y
1	1	1	1	-1	-1	10
2	2	1	1	1	-1	20
3	3	1	1	-1	1	15
4	4	1	1	1	1	25
5	5	1	1	-1	-1	12
6	6	1	1	1	-1	19
7	7	1	1	-1	1	16
8	8	1	1	1	1	26
9	9	0	1	0	0	18
10	10	0	1	0	0	17
11	11	0	1	0	0	18

全因子试验设计的应用条件

- 影响因素的个数少于5个
- 可能存在交互作用
- 响应输出和影响因素间是线性关系

全因子试验的效率随影响因素个数的增加明显降低



9.4 2水平部分因子试验设计

■ 部分因子试验基于以下三点：

□ 因子影响的不平衡性 (*The sparsity of effects principle*)

- 主因子和低阶交互作用真正影响过程质量

□ 投影特性 (*The projection property*)

- 对于一个部分因子实验，剔除非显著因素后，可投影成为一个全因子实验或带仿行的全因子实验

□ 实验的序贯性 (*Sequential nature*)

部分因子试验举例

2^3 设计

No.	X1	X2	X3
1	-	-	-
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

2^{3-1} 设计

No.	X1	X2	X1X2=X3
1	-	-	+
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	+

混淆结构
 $X1X2=X3$
 $X2X3=X1$
 $X1X3=X2$

部分因子试验的分辨力

■ 分辨力 III

- 主因子之间不混淆
- 但主因子和2阶交互作用混淆

■ 分辨力 IV

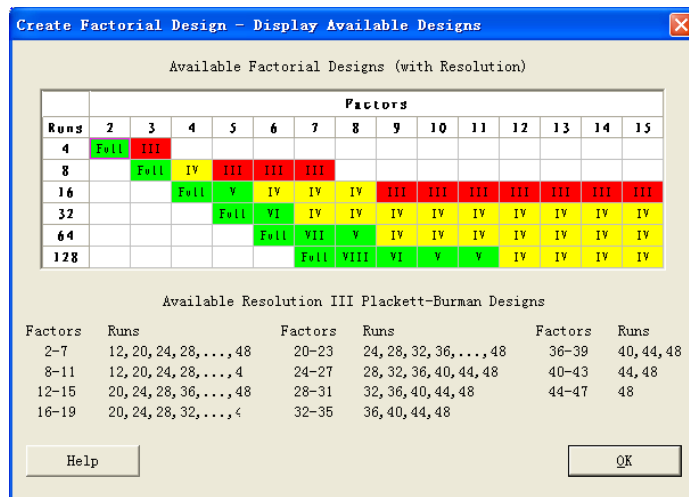
- 主因子之间不混淆
- 主因子和2阶交互作用也不混淆
- 但一些2阶交互作用项之间混淆

■ 分辨力 V

- 主因子之间不混淆
- 主因子和2阶交互作用之间不混淆
- 2阶交互作用项之间也不混淆
- 但一些2阶交互作用项与3阶交互作用项之间混淆

在实际中，经常使用分辨力 IV和V

Available Designs...



部分因子试验的应用条件

- 因素的个数在5个以上
- 高阶交互作用项一般不存在
- 线性模型
- 为了检查模型是否存在曲性，也尽量在模型中 增加中心点
- 部分因子试验主要用来筛选显著因素

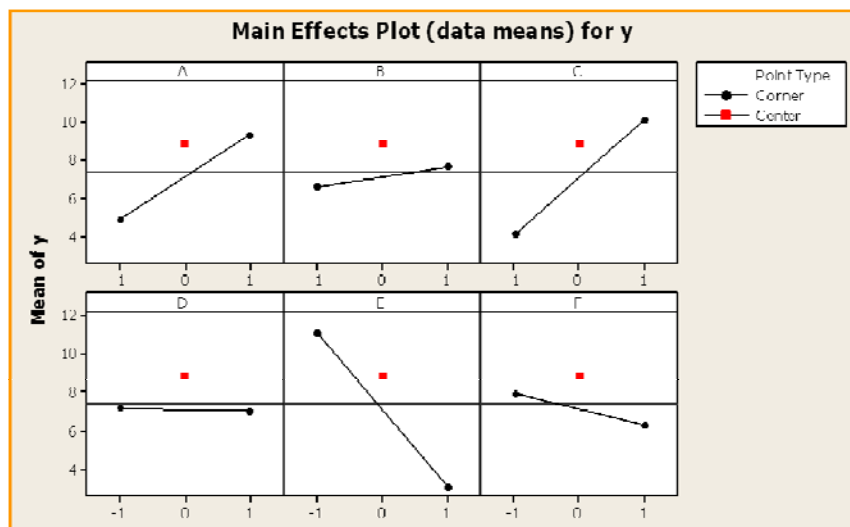
案例： 部分因子试验应用

打开`doe-autowelding`, 目标是极小化单位缺陷数 (Y)



自动焊接设备

主效应图



混淆结构

由此可以判定：
A, C, E, AC, CE, ACE
显著

Alias Structure

$I + A*B*E*F + A*C*D*F + B*C*D*E$
 $A + B*E*F + C*D*F + A*B*C*D*E$
 $B + A*E*F + C*D*E + A*B*C*D*F$
 $C + A*D*F + B*D*E + A*B*C*E*F$
 $D + A*C*F + B*C*E + A*B*D*E*F$
 $E + A*B*F + B*C*D + A*C*D*E*F$
 $F + A*B*E + A*C*D + B*C*D*E*F$
 $A*B + E*F + A*C*D*E + B*C*D*F$
 $A*C + D*F + A*B*D*E + B*C*E*F$
 $A*D + C*F + A*B*C*E + B*D*E*F$
 $A*E + B*F + A*B*C*D + C*D*E*F$
 $A*F + B*E + C*D + A*B*C*D*E*F$
 $B*C + D*E + A*B*D*F + A*C*E*F$
 $B*D + C*E + A*B*C*F + A*D*E*F$
 $A*B*C + A*D*E + B*D*F + C*E*F$
 $A*B*D + A*C*E + B*C*F + D*E*F$

9.5 响应曲面

1. 概述

- 实验设计的作用：
 - 刻画
 - 优化
- 响应曲面法的作用：通过对受多个变量影响的感兴趣的响应进行建模和分析，达到优化这个响应的目的。

响应曲面

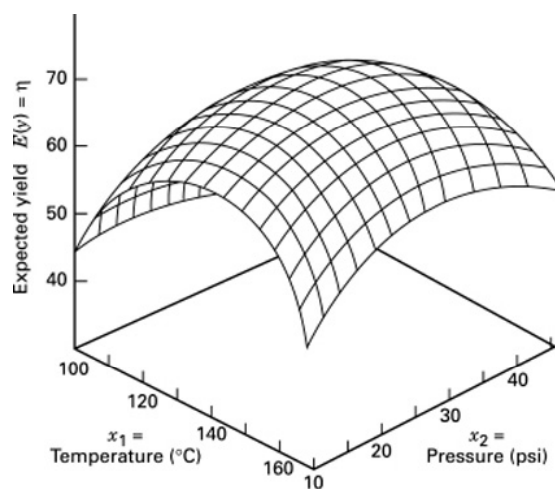
- 例如，对于一个化学反应过程，一位化学工程师想找出温度(x_1)和压强(x_2)的最佳水平配置，以使过程的产出率(y)达到最大值。
- 如果产出率是温度和压强水平的函数，则

$$y = f(x_1, x_2) + \varepsilon$$

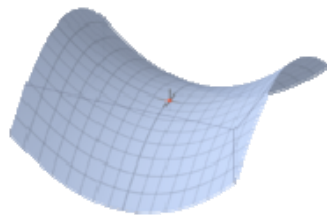
其中 ε 表示响应 y 的观测误差或噪音。

- 由于 $E(\varepsilon)=0$ ，所以 $E(y) = f(x_1, x_2)$ ，则由 $f(x_1, x_2)$ 所表示的曲面称为响应曲面。

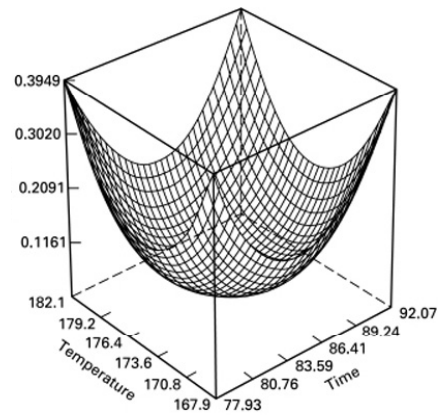
三维响应曲面



不同性质的响应曲面

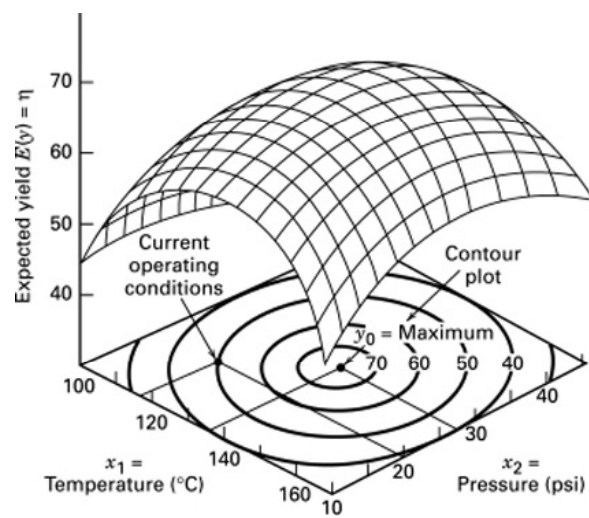


有鞍点的响应曲面

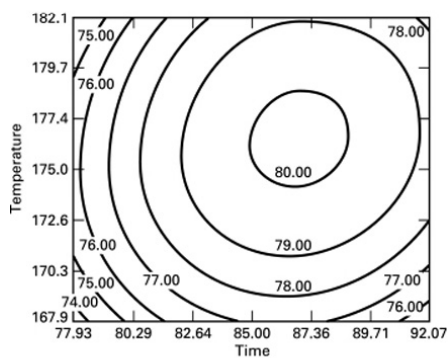


有最小值点的响应曲面

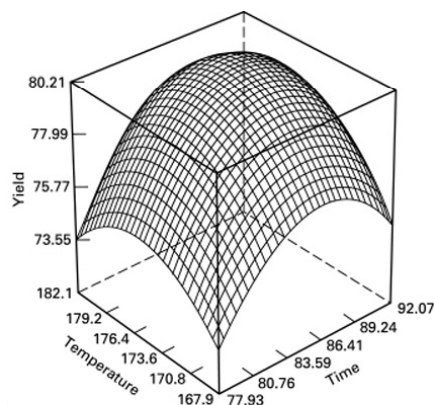
响应曲面的等高线图



用等高线目测最优响应的区域



(a) The contour plot



(b) The response surface plot

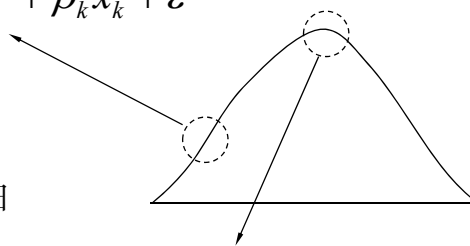
可选模型

- 一阶模型：响应是自变量的线性函数

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \varepsilon$$

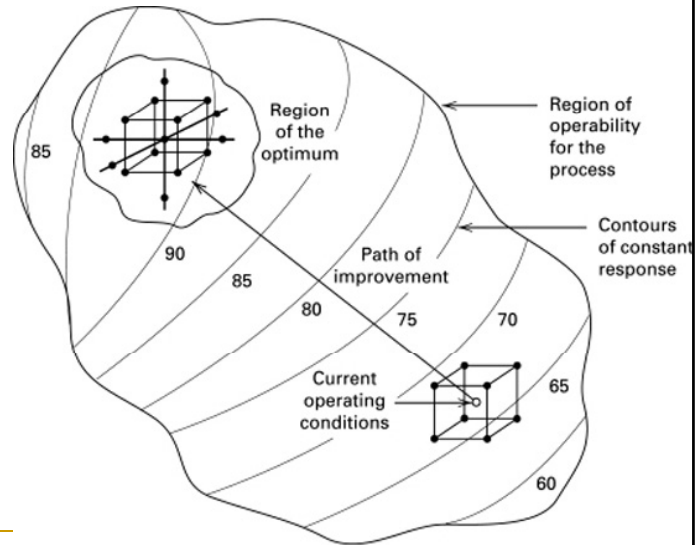
- 二阶模型：系统有弯曲

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$



序贯方法（爬到山顶/下到山谷）

- 引导实验者沿着改善系统的路径快速有效地向最优点的附近区域前进。一旦找到最优点区域，用更精细的模型分析最优点的位置。



2 最速上升法

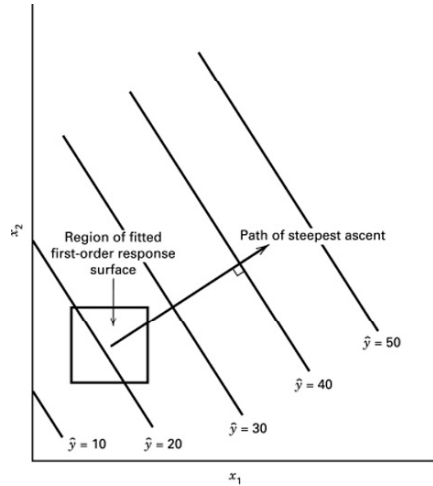
- 目的：以最快的速度进入最优点附近区域。
- **最速上升法**是沿着响应有最大增量的方向逐步移动的方法。
- 如果求的是最小值，则称为**最速下降法**。

最速上升路径

- 一阶拟合模型：

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i$$

- 等高线是一组平行直线。
- 最速上升方向是 \hat{y} 增加得最快的方向，因此是等高线的法线方向。
- 最速上升路径：**通过感兴趣区域的中心并且垂直于拟合曲面等高线的直线。

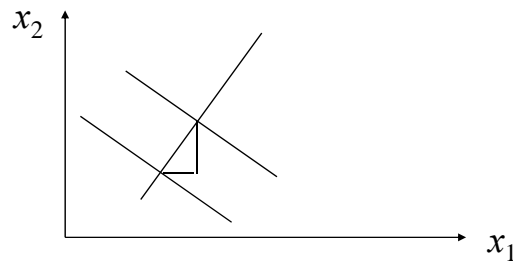


最速上升路径的确定方法

- 最速上升路径与拟合的一阶模型

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i$$

的回归系数的符号和大小成比例。



最速上升路径的确定方法

■ 假定 $x_1=x_2=\dots=x_k=0$ 为基点或原点，则

1. 选取一个过程变量的**步长**，如 Δx_j 。通常选取我们最了解的变量或选取其回归系数的绝对值最大的变量。

2. 其他变量的步长是

$$\Delta x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\beta}_j} \Delta x_j, \quad i = 1, 2, \dots, k; i \neq j$$

3. 将规范变量的 Δx_i 转换至自然变量。

基本步骤

1. 在当前所在区域拟合一个一阶模型。

2. 检验一阶模型的适合性

- 当出现一阶模型的拟合不足时，说明实验者已经到达最优点附近，则转到第4步。
- 否则，由模型找出最速上升路径，沿路径前进，直到观测到响应不再增加时停止前进，然后从第1步开始重复。

4. 执行添加实验，拟合更加精确的高阶模型，找到最优点。

例 化学反应过程产出率优化

- 一个化学反应过程，影响产出率的两个可控变量分别是反应时间(x_1)和反应温度(x_2)。当前运作条件是 $x_1=35$ 分钟、 $x_2=155^\circ\text{F}$ ，产出率约为40%。根据经验，工程师初步判断当前运作条件的附近不大可能包含最优产出率。因此，工程师决定运用最速上升法对产出率进行优化，找出最佳的配置从而获得最大的产出率。

区域选择和变量转换

- 工程师决定将拟合的一阶模型的探测区域确定为反应时间(30,40)，温度(150,160)。记 ξ 为自然变量，则在(-1,1)区间内的规范变量为

$$x_1 = \frac{\xi_1 - 35}{5} \quad x_2 = \frac{\xi_2 - 155}{5}$$

设计实验

- 采用增加5个中心点的 2^2 析因设计。中心点的重复实验用于估计实验误差，并可用于检验一阶模型的适合性。

Table 11-1 Process Data for Fitting the First-Order Model

Natural Variables		Coded Variables		Response
ξ_1	ξ_2	x_1	x_2	y
30	150	-1	-1	39.3
30	160	-1	1	40.0
40	150	1	-1	40.9
40	160	1	1	41.5
35	155	0	0	40.3
35	155	0	0	40.5
35	155	0	0	40.7
35	155	0	0	40.2
35	155	0	0	40.6

拟合一阶模型

- 采用最小二乘法，拟合规范变量的一阶模型：

由 $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'y$

得

$$\hat{y} = 40.44 + 0.775x_1 + 0.325x_2$$

检查一阶模型的适合性

1. 求误差的估计量
2. 检测模型中的交互作用（交叉乘积项）
3. 检测二次效应（弯曲性）

(1) 计算误差估计量

- 利用中心点重复实验的观测值计算误差的方差

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}^2 &= \frac{40.3^2 + 40.5^2 + 40.7^2 + 40.2^2 + 40.6^2 - 202.3^2 / 5}{4} \\ &= 0.043\end{aligned}$$

(2) 检测交互作用效应

- 在主效应一阶模型中增加交互作用项和纯二阶效应项，得

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2 + \varepsilon$$

- 用标准顺序，得出用来估计交互作用效应的对照系数是+, -, -, +，则

$$\text{对照}_{AB} = 39.3 - 40.0 - 40.9 + 41.5 = -0.1$$

$$SS_{AB} = \frac{1}{2^k n} (\text{对照}_{AB})^2 = \frac{(-0.1)^2}{4} = 0.0025$$



67

- 计算拟合不足统计量：

$$F = \frac{SS_{\text{交互作用}}}{\hat{\sigma}^2} = \frac{0.0025}{0.043} = 0.058$$

- 取 $\alpha = 0.05$ ，查F分布表得 $F_{0.05, 1, 4} = 7.71 > 0.058$ ，所以交互作用可以忽略。也就是说，模型中的交互作用项可忽略，则由交互作用效应所引起的响应曲面的弯曲可以忽略不计。



68

(3) 检查纯二次效应

- 纯二次效应的平方和：

$$SS_{\text{纯二次}} = \frac{n_F n_C (\bar{y}_F - \bar{y}_C)^2}{n_F + n_C} = \frac{4 \times 5 \times (-0.035)^2}{4 + 5} = 0.0027$$

其中 n_F 与 n_C 分别是析因设计的点数和中心重复实验点数

- 计算拟合不足统计量：

$$F = \frac{SS_{\text{纯二次}}}{\hat{\sigma}^2} = \frac{0.0027}{0.043} = 0.063$$

- 取 $\alpha=0.05$ ，查F分布表得 $F_{0.05,1,4}=7.71 \gg 0.063$ ，所以纯二次效应可以忽略。也就是说，模型中的纯二次项可忽略，则由纯二次效应所引起的响应曲面的弯曲可以忽略不计。



69

一阶模型的方差分析

Table 11-2 Analysis of Variance for the First-Order Model

Source of Variation	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Mean Square	F_0	P-Value
Model (β_2, β_2)	2.8250	2	1.4125	47.83	0.0002
Residual	0.1772	6			
(Interaction)	(0.0025)	1	0.0025	0.058	0.8215
(Pure quadratic)	(0.0027)	1	0.0027	0.063	0.8142
(Pure error)	(0.1720)	4	0.0430		
Total	3.0022	8			

- 交互作用和纯二次的弯曲效应都不显著，而一阶回归模型是显著的，说明用一阶模型拟合当前所在区域是适合的。



70

最速上升实验

- 起点 ($x_1=0, x_2=0$)
- 选取基本步长: 5分钟的反应时间($\Delta x_1=1$)
- 计算温度的步长:
 - 由 $\Delta x_1=1$, 得 $\Delta x_2=(0.325/0.775) \Delta x_1=0.42$
- 工程师计算沿此路径前进的每一步所进行的实验的变量设置。
- 实施实验, 并观测每一步产出率的响应值, 直到出现产出率下降为止。

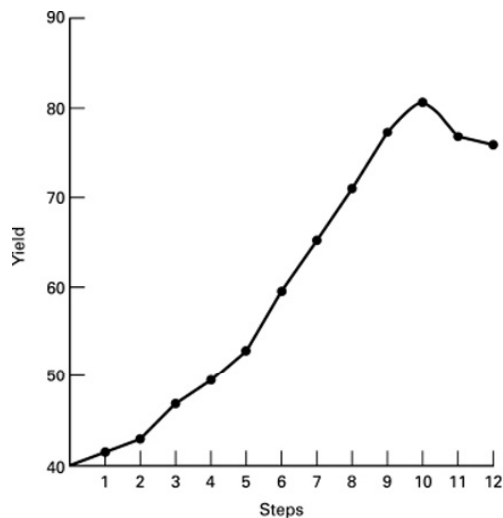
最速上升实验

Table 11-3 Steepest Ascent Experiment for Example 11-1

Steps	Coded Variables		Natural Variables		Response y
	x_1	x_2	ξ_1	ξ_2	
Origin	0	0	35	155	
Δ	1.00	0.42	5	2	
Origin + Δ	1.00	0.42	40	157	41.0
Origin + 2Δ	2.00	0.84	45	159	42.9
Origin + 3Δ	3.00	1.26	50	161	47.1
Origin + 4Δ	4.00	1.68	55	163	49.7
Origin + 5Δ	5.00	2.10	60	165	53.8
Origin + 6Δ	6.00	2.52	65	167	59.9
Origin + 7Δ	7.00	2.94	70	169	65.0
Origin + 8Δ	8.00	3.36	75	171	70.4
Origin + 9Δ	9.00	3.78	80	173	77.6
Origin + 10Δ	10.00	4.20	85	175	80.3
Origin + 11Δ	11.00	4.62	90	179	76.2
Origin + 12Δ	12.00	5.04	95	181	75.1

沿最速上升路径的产率与步长的关系图

■ 到第10步响应出现下降。因此，下一个一阶模型应在第10点 ($\xi_1=85, \xi_2=175$) 的附近区域进行拟合。



第2次拟合一阶模型

- 中心点(85,175)
- 探测区域 ξ_1 是[80,90], ξ_2 是[170,180]。
- 于是, 规范变量

$$x_1 = \frac{\xi_1 - 85}{5} \quad x_2 = \frac{\xi_2 - 175}{5}$$

- 再次使用有5个中心点的 2^2 设计。

第2个一阶模型的数据

Table 11-4 Data for Second First-Order Model

Natural Variables		Coded Variables		Response
ξ_1	ξ_2	x_1	x_2	y
80	170	-1	-1	76.5
80	180	-1	1	77.0
90	170	1	-1	78.0
90	180	1	1	79.5
85	175	0	0	79.9
85	175	0	0	80.3
85	175	0	0	80.0
85	175	0	0	79.7
85	175	0	0	79.8



75

一阶模型和适合性检验

$$\hat{y} = 78.97 + 1.00x_1 + 0.50x_2$$

■ 该模型的方差分析如下：

Table 11-5 Analysis of Variance for the Second First-Order Model

Source of Variation	Sum of Squares	Degrees of Freedom	Mean Square	F_0	P -Value
Regression	5.00	2			
Residual	11.1200	6			
(Interaction)	(0.2500)	1	0.2500	4.72	0.0955
(Pure quadratic)	(10.6580)	1	10.6580	201.09	0.0001
(Pure error)	(0.2120)	4	0.0530		
Total	16.1200	8			

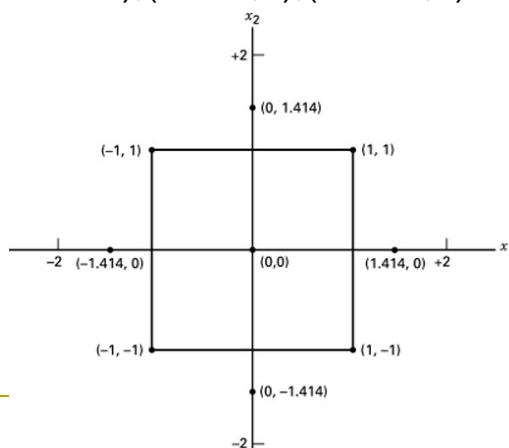
■ 可见交互作用和纯二次效应都比较显著，尤其是纯二次项非常显著。所以，一阶模型已经不是合适的近似。曲面的弯曲性表明我们已经接近最优点，必须用更加精细的模型确定最优点。



76

拟合二阶模型

- 实验者决定以足够多的点增大这个设计，从而拟合一个二阶模型。采用中心复合设计，在 $(0, 1.414), (0, -1.414), (1.414, 0), (-1.414, 0)$ 处增加4个实验。



中心复合设计

Table 11-6 Central Composite Design for Example 11-2

Natural Variables		Coded Variables		Responses		
ξ_1	ξ_2	x_1	x_2	y_1 (yield)	y_2 (viscosity)	y_3 (molecular weight)
80	170	-1	-1	76.5	62	2940
80	180	-1	1	77.0	60	3470
90	170	1	-1	78.0	66	3680
90	180	1	1	79.5	59	3890
85	175	0	0	79.9	72	3480
85	175	0	0	80.3	69	3200
85	175	0	0	80.0	68	3410
85	175	0	0	79.7	70	3290
85	175	0	0	79.8	71	3500
92.07	175	1.414	0	78.4	68	3360
77.93	175	-1.414	0	75.6	71	3020
85	182.07	0	1.414	78.5	58	3630
85	167.93	0	-1.414	77.0	57	3150

稳定点位置的一般数学解

- 将所拟合的二阶模型写成矩阵形式

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + x'b + x'Bx$$

其中

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \cdots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \vdots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \\ \text{对称} & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

b 是($k \times 1$)向量, B 是($k \times k$)对称矩阵, 其主对角线元素是纯二次系数, 非对角线元素是混合二次系数的1/2。

- 由稳定点的性质, 得 \hat{y} 关于 x 的导数等于0

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x} = b + 2Bx = 0$$

- 解得稳定点

$$x_s = -\frac{1}{2}B^{-1}b$$

- 代入模型得稳定点处的预测响应

$$\hat{y}_s = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}x'_s b$$

拟合二阶模型

- 由最小二乘法，估计回归系数

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'y$$

- 将交互作用和纯二次项都包括进去的二阶模型拟合结果如下：

$$y = 79.94 + 0.995x_1 + 0.515x_2 - 1.376x_1^2 - 1.001x_2^2 + 0.25x_1x_2$$

- 写成矩阵形式则

$$b = \begin{bmatrix} 0.995 \\ 0.515 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} -1.376 & 0.125 \\ 0.125 & -1.001 \end{bmatrix}$$



81

计算稳定点的位置

- 稳定点是

$$x_s = -\frac{1}{2} B^{-1} b = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -0.7345 & -0.0917 \\ -0.0917 & -1.0096 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.995 \\ 0.515 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.389 \\ 0.306 \end{bmatrix}$$

- 转换成自然变量

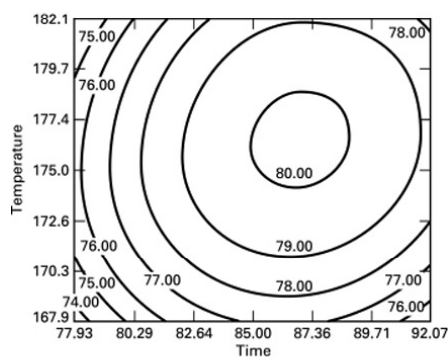
$$0.389 = \frac{\xi_1 - 85}{5} \quad 0.306 = \frac{\xi_2 - 175}{5}$$

- 得反应时间为87分钟，温度176.5°F。求得最优点的预测响应是80.21。

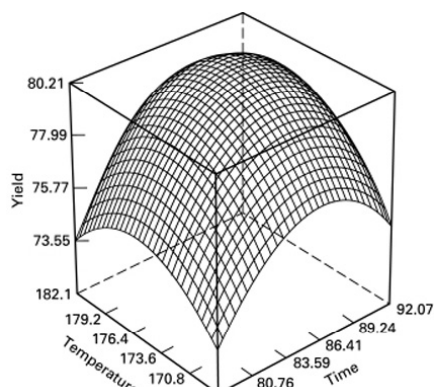


82

响应曲面和等高线

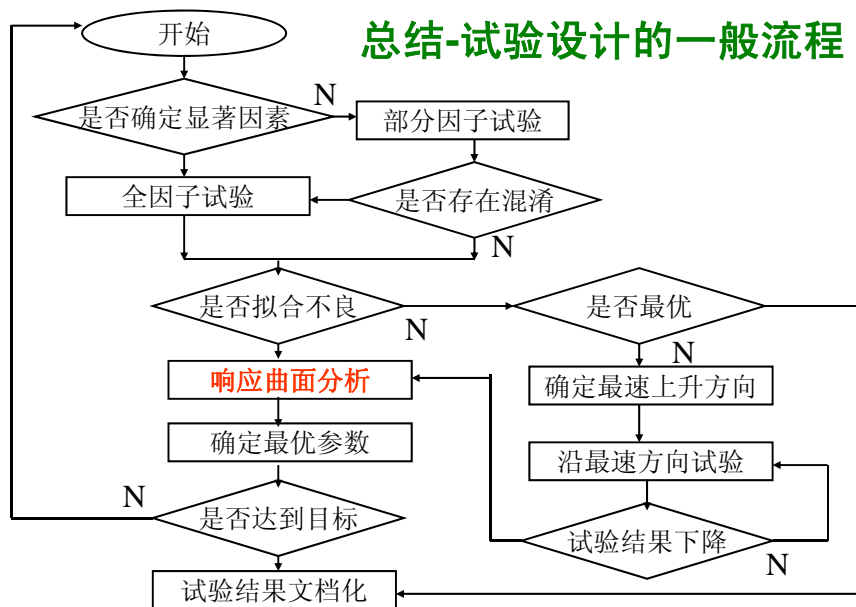


(a) The contour plot



(b) The response surface plot

总结-试验设计的一般流程



本章完，谢谢各位！

地 址：天津大学管理学院
邮 编：300072
Email: shi@tju.edu.cn

天津大学质量管理课程组

85