



安徽理工大学

ANHUI UNIVERSITY OF SCIENCE & TECHNOLOGY

研究生课程

试验设计与分析

主讲 闵凡飞 教授

2020年5月

第六章 响应面试验设计与分析

1. 什么是响应面法

➤ 响应面设计方法(Response Surface Methodology, RSM)是利用合理的试验设计方法并通过实验得到一定数据,采用多元二次回归方程来拟合因素与响应值之间的函数关系,通过对回归方程的分析来寻求最优工艺参数,解决多变量非线性问题及可视化的一种统计方法。

可分为:

- 中心复合试验设计(Central Composite Design, CCD);
- Box-Behnken试验设计 (B B) 。

在响应分析中,观察值 y 可以表述为:

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

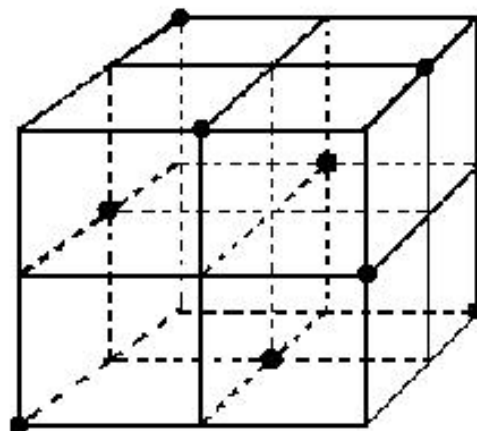
其中 $f(x_1, x_2, \dots, x_l)$ 是自变量 x_1, x_2, \dots, x_l 的函数, ε 是误差项。

在响应面分析中,首先要得到回归方程,然后通过对自变量 x_1, x_2, \dots, x_l 的合理取值,求得使 $\hat{y} = f(x_1, x_2, \dots, x_l)$ 最优的值,这就是响应面设计试验的目的。

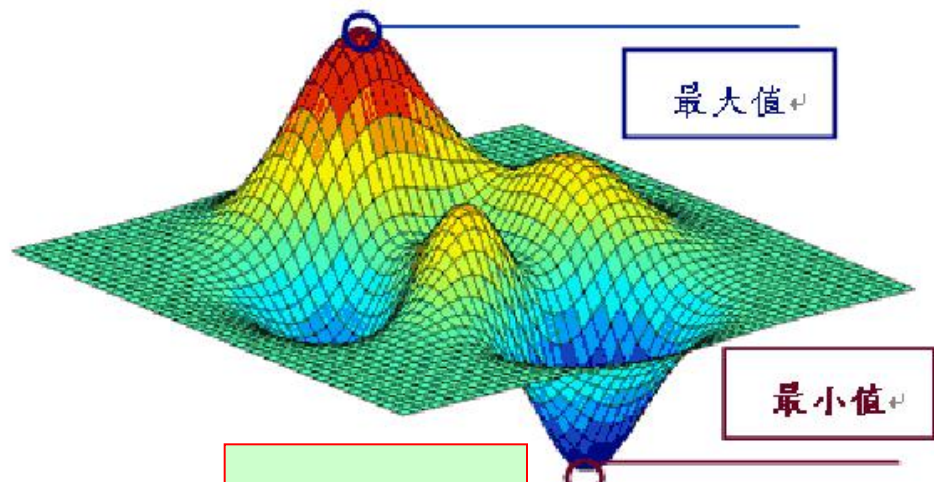
2. 适用范围

- 确信或怀疑因素对指标存在非线性
- 因素个数2-7个，一般不超过4个；
- 所有因素均为计量值数据；
- 试验区域已接近最优区域；
- 基于2水平的全因子正交试验。

- 正交设计，具有“**均匀分散，整齐可比**”的特点，不能保证**最佳点**的准确性。
- 不能保证**数学模型**的**准确性、预测性**。



正交设计



实际情况

3. 一般步骤

1. 确定因素及水平，注意水平数为2，因素数一般不超过4个，因素均为计量值数据；
2. 创建“中心复合”或“Box-Behnken”设计；
3. 确定试验运行顺序(Display Design)；
4. 进行试验并收集数据；
5. 分析试验数据；
6. 优化因素的设置水平。

4. 中心复合试验设计

- 中心复合设计（星点设计，Central Composite Designs, CCD）是应用得最为广泛的试验设计方法。

- 理解的关键 CCD设计布点 **中心**

点：点数要**足够多**，保证中央点即最佳点的**准确性**。

析因点：构建多元回归模型，一个立方体的 2^k 顶点，连续性。

轴点：**延展性**，带有参数 α 的 $2k$ 个轴向点，不需要准确性。

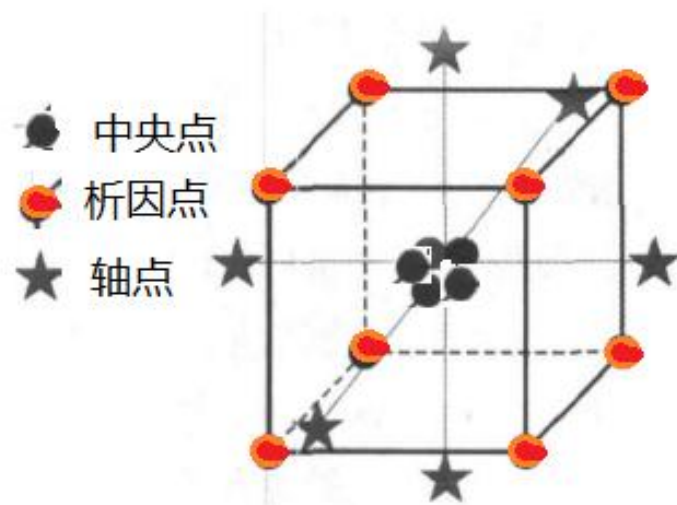
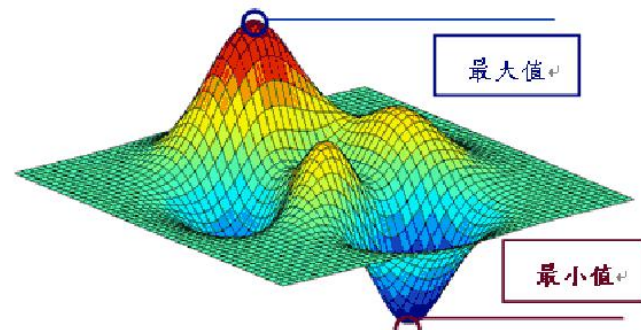


图 1 CCD 组成部分示意图

α 的选取

在 α 的选取上可以有多种出发点，旋转性是个很有意义的考虑。在 k 个因素的情况下，应取

$$\alpha = 2^{k/4}$$

当 $k=2$, $\alpha=1.414$; 当 $k=3$, $\alpha=1.682$;

当 $k=4$, $\alpha=2.000$; 当 $k=5$, $\alpha=2.378$

实例：星点设计-效应面法优选灯盏花乙素超声提取

因素水平表

通常实验表是以代码的形式编排的，实验时再转化为实际操作值，一取值为 0，±1，±α……。0：零水平（中央点）；上下水平：±1；上下星号臂±α。α=1.414，或 1.682，2.00

表 1 星点设计因素水平表
Table 1 Independent variables and their levels used for central composite design

| 因素 variables | 水平 Level ^a | | | | |
|------------------------------------|-----------------------|----|----|----|--------|
| | -1.732 | -1 | 0 | -1 | +1.732 |
| A 超声时间 Extraction time /min | 3.18 | 10 | 20 | 30 | 36.82 |
| B 乙醇浓度 Ethanol concentration /% | 49.77 | 60 | 75 | 90 | 100 |
| C 料液比 Liquid/solid ratio | 3.18 | 10 | 20 | 30 | 36.82 |

注表中a=1.862

根据因素水平表1，软件自动生成星点设计表2。

从表2可以看出，试验设计由6点轴点，8个析因点，6个中央点组成方程的总模型。

| 表 2 试验结果 | | | | | |
|--|--------|--------|--------|----------------------------|-------|
| Table 2 Results of response surface analysis of total flavonoids from tartary buckwheat seedling with factor | | | | | |
| 实验号 Run | A | B | C | 提取率 Extraction yield /% | |
| 1 | -1 | 1 | -1 | 析因 | 0.382 |
| 2 | -1 | -1 | -1 | 析因 | 0.361 |
| 3 | 1 | -1 | 1 | 析因 | 0.528 |
| 4 | 1 | 1 | 1 | 析因 | 0.604 |
| 5 | 1.732 | 1 | 1 | 轴点 | 0.609 |
| 6 | -1 | -1 | 1 | 析因 | 0.403 |
| 7 | 0 | 0 | 0 | 中央点 | 0.616 |
| 8 | 0 | 0 | 0 | 中央点 | 0.614 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 中央点 | 0.621 |
| 10 | 1 | -1 | -1 | 析因 | 0.458 |
| 11 | 0 | 0 | 0 | 中央点 | 0.620 |
| 12 | 0 | 0 | 1.732 | 轴点 | 0.622 |
| 13 | 0 | 0 | 0 | 中央点 | 0.617 |
| 14 | 0 | 1.732 | 0 | 轴点 | 0.613 |
| 15 | 1 | 1 | -1 | 析因 | 0.503 |
| 16 | -1.732 | 0 | 0 | 轴点 | 0.201 |
| 17 | 0 | 0 | -1.732 | 轴点 | 0.287 |
| 18 | -1 | 1 | 1 | 析因 | 0.397 |
| 19 | 0 | -1.732 | 0 | 轴点 | 0.469 |
| 20 | 0 | 0 | 0 | 中央点 | 0.619 |

•对表2中的实验数据进行多元线性回归和二项式拟合，获得灯盏花乙素提取的数学模型如下： $E=-0.85615+0.029944A+0.018569B+0.026062C$

$$+8.83333\times10^{-5}AB+1.42500\times10^{-4}AC$$
$$+3.33333\times10^{-6}BC-7.59177\times10^{-4}A^2$$
$$-1.23708\times10^{-4}B^2-5.84168\times10^{-4}C^2$$

表 3 回归方程的方差分析表

Table 3 Analysis of variance for response surface quadratic mode

| 方差来源 | 自由度 | 平方和 | 均方差 | F 值 | p* |
|----------------|-----|----------------------|----------------------|----------------------|---------|
| Source | df | Sum of squares | Mean Square | F Value | Prob>F |
| 总模型 | 9 | 0.30 | 0.033 | 11.49 | < 0.001 |
| A | 1 | 0.11 | 0.11 | 39.13 | < 0.001 |
| B | 1 | 0.010 | 0.010 | 3.66 | > 0.05 |
| C | 1 | 0.046 | 0.046 | 16.04 | < 0.05 |
| AB | 1 | 1.404×10^{-5} | 0.49 | 0.49 | > 0.05 |
| AC | 1 | 1.625×10^{-5} | 0.57 | 0.57 | > 0.05 |
| BC | 1 | 2.000×10^{-6} | 6.994×10^{-4} | 6.994×10^{-4} | > 0.05 |
| A ² | 1 | 0.083 | 29.05 | 29.05 | < 0.001 |
| B ² | 1 | 0.011 | 3.90 | 3.90 | > 0.05 |
| C ² | 1 | 0.049 | 17.20 | 17.20 | < 0.05 |
| 残差 | 5 | 0.029 | 2.860×10^{-5} | | |
| 总变异 | 19 | 0.32 | | | |

模型显著

因素显著性

交互项显著性

* $f_{0.05(9, 5)}=4.78$, $f_{0.01(9, 5)}=10.15$

内部的误差估计量:

- **模型的** $F > F_{0.01}(9, 5)$, 说明回归方程在 0.01 的水平显著, 表明试验设计可靠.
- **模型相关系数** $r=0.9549$, 进一步说明模型具有较好的可信度。
- **失拟度**: 不显著, 说明实验点均能用模型描述。

各因素影响显著性比较:

- 根据方差分析 (离散分析, 表3) , p 值代表了因素的显著性水平, 比较 p 值, 影响的显著性排序, 提取时间 (A , $p < 0.01$) > 料液比 (B , $p < 0.01$) > 乙醇浓度 (C , $p < 0.01$) 。
- 方程的交互项的 AB 、 AC 和 BC 均 $p > 0.05$ 表明, 交互项对灯盏花乙素得率的影响不显著, 表明三个因素无交互作用。

响应面可视化分析方法（RSM）的图形是特定的响应值 Y 对应的因素 A , B , C 构成的一个三维空间图及在二维平面上的等高图，可以直观地反映各因素对响应值的影响。

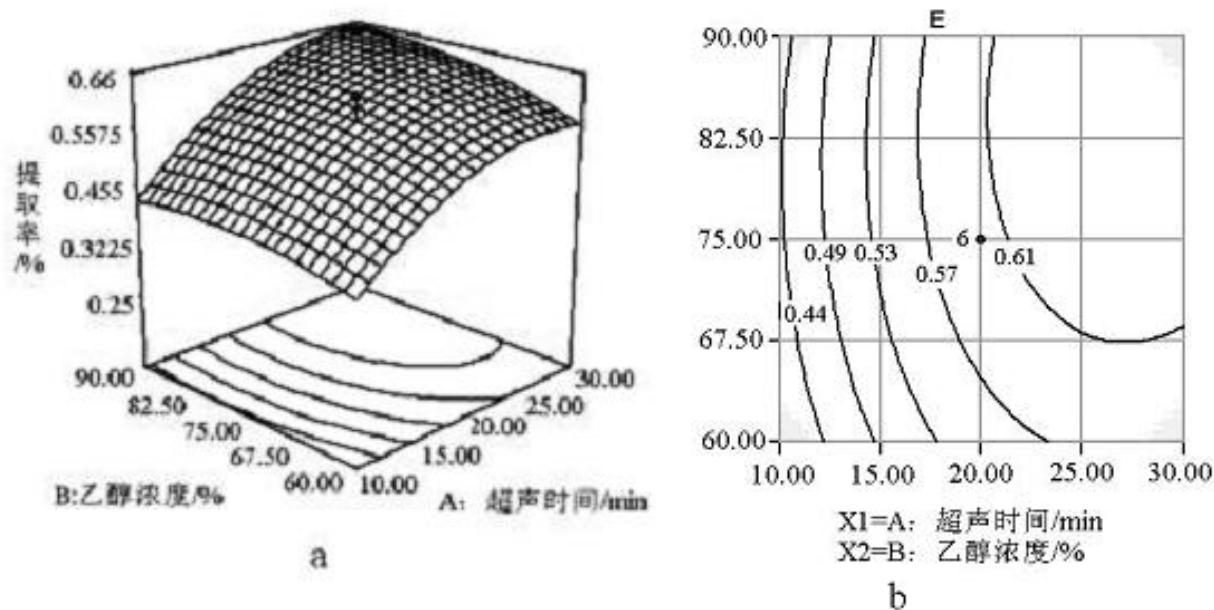


图 1 超声时间和乙醇浓度和对灯盏花乙素提取率的效应面 (a) 及等高线图 (b)
Fig.1 Response surface (a) and contour line (b) showing the effect of extraction time and ethanol concentration on extraction yield

与 B 方向比较， A 响应面曲线较陡， A 等高线密度明显高于沿 B 移动的密度，说明此时 A 对提取率 E 的影响较 B 为显著

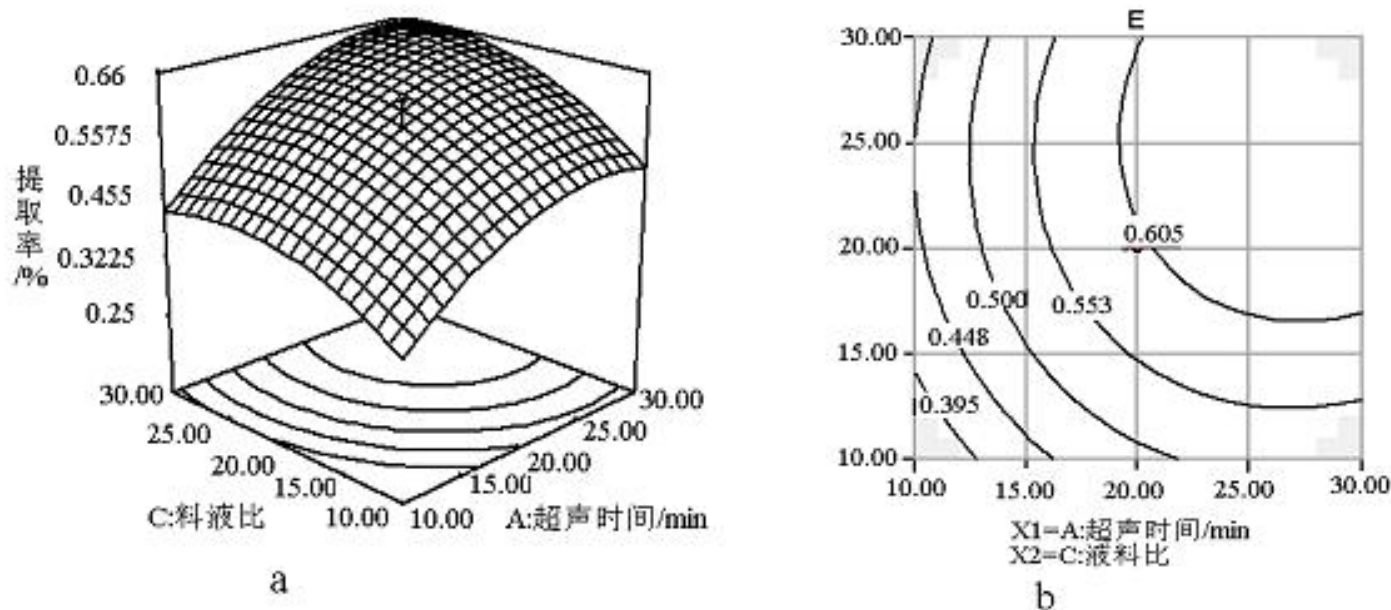


图 2 超声时间和液料比和对灯盏花乙素提取率的效应面 (a) 及等高线图 (b)

Fig.2 Response surface (a) and contour line (b) showing the effect of extraction time and liquid/solid ratio on extraction yield

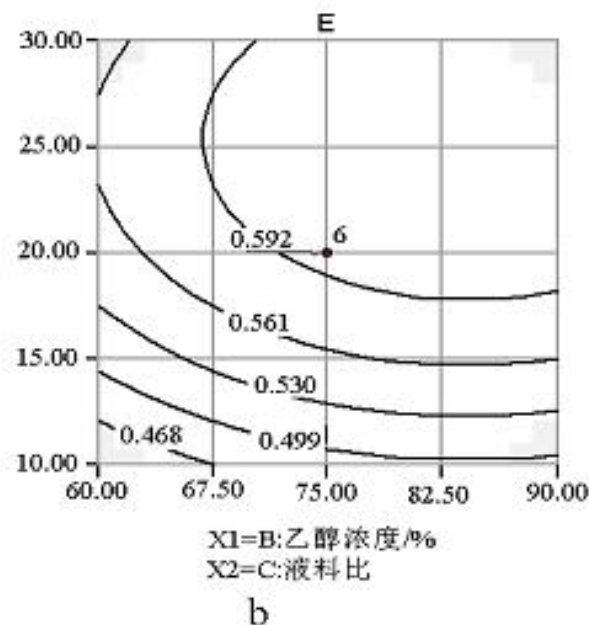
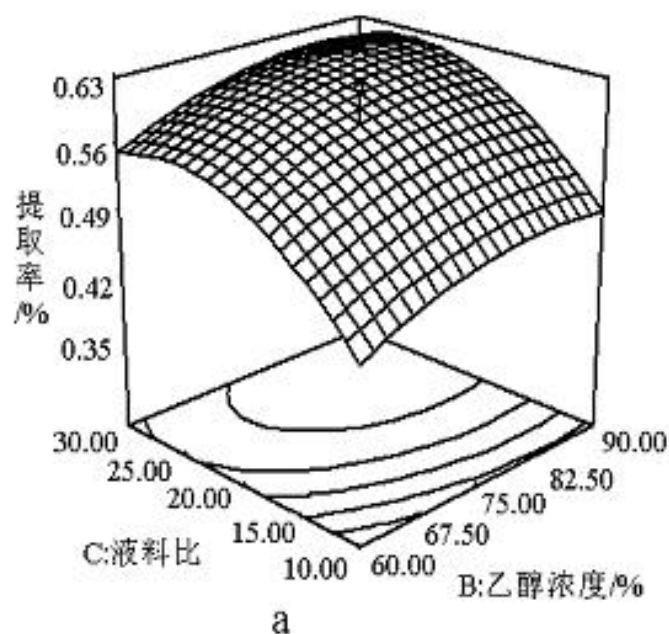


图 3 乙醇浓度和液料比和对灯盏花乙素提取率的效应面 (a) 及等高线图 (b)

Fig.3 Response surface (a) and contour line (b) showing the effect of ethanol concentration and liquid/solid ratio on extraction yield

结论：

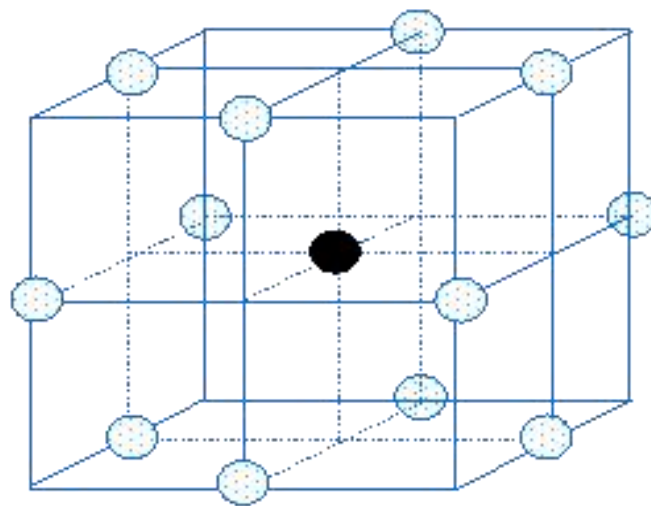
- 图1a-3a可看出，当 A 、 B 、 C 取值较小时，效应面曲线较陡，说明此时 A 、 B 、 C 对灯盏花乙素提取率 E 的影响较为明显，但 A 、 B 、 C 取值较大时，效应面曲线较平缓，此时 A 、 B 、 C 对 E 影响较小。
- 从图1b可看出，沿 A 因素（超声时间）向峰值移动，等高线密度明显高于沿 B 移动的密度，这表明超声时间对效应值的贡献更大，这与方差分析的结果一致。
- 影响显著区域：当超声时间低于20.0 min时，等高线密度大于20.0 min以上的密度，表明超声时间低于20.0 min时，对响应值的影响更大，且乙醇浓度较高时超声时间对响应值的影响更显著。

- 比较图1a-3a和图1b-3b，可知三个因素对灯盏花乙素提取率 E 的影响顺序是：超声时间 $A >$ 液料比 $B >$ 乙醇浓度 C ，这与这和方差分析结果相符合。
- 各因素的交互作用，等高线的形状可直观地看出交互效应的大小，椭圆形反映了两因素的交互作用较强，呈圆形则相反，而响应曲线曲线较陡也说明交互作用较强。从图1 b-3b可看出，各因素的相互作用的等高线并没有呈现明显的椭圆形，响应曲线相对较平缓，说明各因素之间交互作用并不显著。

5. Box-Behnken试验设计

将各试验点取在立方体棱的中点上

BBD设计的优点是每个因素只有三水平，所以因素少。 $k=3$ 的BBD设计是十分经济的，因此当 $k>5$ 时，推荐一般不再采用BBD设计。



三因子布点示意图

Box-Behnken 设计具有位于试验空间边缘中点处的处理组合，并要求至少有三个因子。

BBD设计，可以有效估计一阶和二阶系数。因为 Box-Behnken 设计的设计点通常较少，所以它们的运行成本比具有相同数量因子的中心复合设计的运行成本低。但是，因为它们没有嵌入因子设计，所以不适用于顺序试验。

如果您知道过程的安全操作区域，Box-Behnken 设计也非常有用。中心复合设计通常具有位于“立方体”以外的轴点。这些点可能不在相关区域内，也可能由于超出安全操作限制而无法运行。Box-Behnken 设计没有轴点，因此，您可以确信所有设计点都在安全操作区域内。Box-Behnken 设计还可以确保所有因子绝不会同时设置在高水平。

例如，您要确定塑料部件的最佳注塑成型条件。可设置的因子包括：

- 温度：190° 和 210°
- 压力：50Mpa 和 100Mpa
- 注塑速度：10 mm/s 和 50 mm/s

对于 Box-Behnken 设计，设计点落在高、低因子水平及其中点的组合处：

- 温度：190°、200° 和 210°
- 压力：50Mpa、75Mpa 和 100Mpa
- 注塑速度：10 mm/s、30 mm/s 和 50 mm/s

特点

- 在因素相同时，比中心复合设计的试验次数少；
- 没有将所有试验因素同时安排为高水平的试验组合，对某些有安全要求或特别需求的试验尤为适用；
- 具有近似旋转性，没有序贯性。



三因子4种响应面设计实验点计划表

[illegible]

6. 分析响应面设计的一般步骤

- ① 拟合选定模型；
- ② 分析模型的有效性：P值、 R^2 及 $R^2(\text{adj})$ 、s值、失拟分析、残差图等；
- ③ 如果模型需要改进，重复1-3步；
- ④ 对选定模型分析解释：等高线图、曲面图；
- ⑤ 求解最佳点的因素水平及最佳值；
- ⑥ 进行验证试验。

7. 响应面设计的SAS实现

SAS的一些网络资源

- SAS公司官方网站
 - <http://www.sas.com>
- SAS简体中文官方网站
 - <http://www.sas.com.cn>
- SAS中文论坛
 - <http://www.mysas.net>



SAS系统简介

概况

- SAS是美国SAS软件研究所研制的一套大型集成应用软件系统，具有完备的数据存取、数据管理、数据分析和数据展现功能。
- 尤其是创业产品——统计分析系统部分，由于其具有强大的数据分析能力，一直为业界著名软件，在数据处理和统计分析领域，被誉为国际上的标准软件和最权威的优秀统计软件包。
- 经过多年的发展，SAS已被全世界120多个国家和地区的近三万家机构所采用，直接用户则超过三百万人，遍及金融、医药卫生、生产、运输、通讯、政府和教育科研等领域。
- SAS系统全称为Statistical Analysis System。
- SAS系统最早由美国北卡罗来纳州立大学的两位生物统计学研究生编制，并于1976年成立了SAS软件研究所，正式推出SAS软件。

- SAS的模块化结构

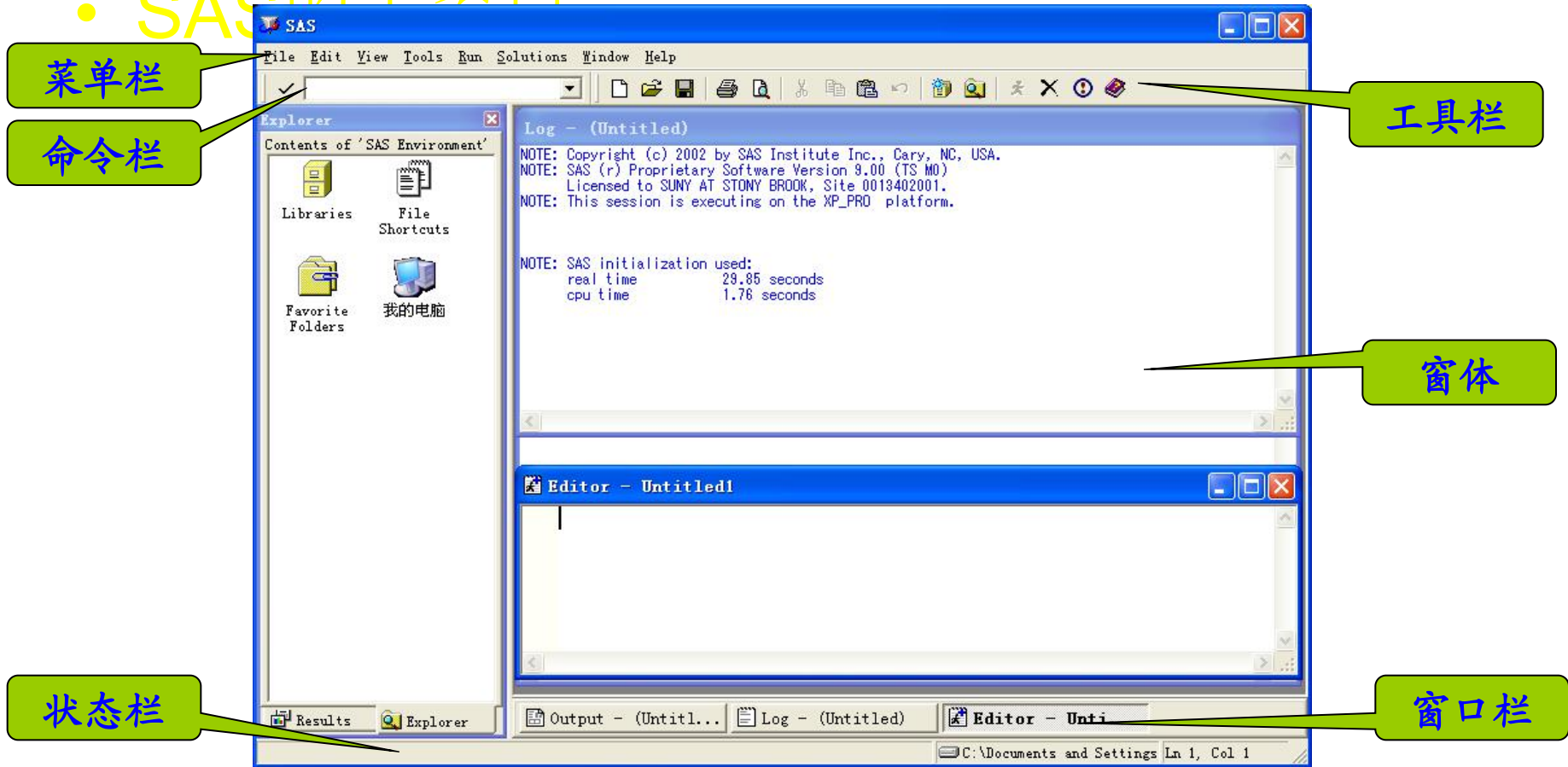
- SAS系统是一个组合软件系统，连同正在开发的模块，它一共由50个左右的功能模块组合而成。
- SAS的基本部分是SAS/BASE模块，该模块是SAS系统的核心，承担着主要的数据管理任务，并管理SAS的用户使用环境，进行用户语言的处理，调用其它SAS模块和产品。
- 在SAS/BASE的基础上，用户还可以增加各种模块而增加不同的功能，如SAS/STAT（统计分析模块）、SAS/GRAPH（绘图模块）、SAS/OR（运筹学模块）、SAS/IML（交互式矩阵程序设计语言模块）等。

- SAS的操作方式

- 经过多年的发展，SAS现在已经成为一套完整的第四代计算机语言，使用程序方式，用户可以完成所有工作，包括统计分析、预测、建模和模拟抽样等。
- 此外，SAS还提供了各类概率分析函数、分位数函数、样本统计函数和随机数生成函数，使用户能方便地实现特殊统计要求。

操作界面入门

• SAS的主窗口



SAS的子窗口

- SAS启动时，默认会打开以下五个窗口：
 - 增强型程序编辑器 (Enhanced Editor) 窗口
 - 日志 (Log) 窗口
 - 结果输出 (Output) 窗口
 - 资源管理器 (Explorer) 窗口
 - 结果 (Results) 窗口

- 增强型程序编辑器 (Enhanced Editor) 窗口
 - 系统默认提供的程序编辑窗口
 - 以不同的颜色显示出SAS程序中不同的部分，并同时
进行语法检查，
 - 如用深蓝色表示数据步/程序步开始；
 - 蓝色表示关键字；
 - 棕色表示字符串；
 - 浅黄色表示数据块；
 - 红色表示可能的错误。
 - 增强型程序编辑器窗口中的内容在保存时应当被存为SAS程序格式，实际上就是扩展名为“.sas”的纯文本文件。

- Log窗口

- Log窗口用于输出程序在运行时的各种有关信息。主要有以下几种内容：
 - 程序行，黑色，记录执行过的每一条语句。
 - 提示，蓝色，以NOTE开始，提供系统或程序运行的一些常规信息，大多数时候我们可以视而不见。
 - 警告，绿色，以WARNING开始，一般在程序中含有系统可以自动更正的小错误时出现，此时会提供错误序列号。
 - 错误，红色，以ERROR开始，当出现该信息说明程序有错误，执行结构必然是不正确的。
- Log窗口中的内容在保存时应当被存为扩展名为“.log”的纯文本文件。

- 结果输出 (Output) 窗口

- 从该窗口中，可以对SAS程序的输出结果进行阅读。
- 结果输出窗口中的内容是分页显示的，每一页最上方均显示相应的页标题，结果生成时的日期和时间。
- 当结果输出非常长时，为了能够方便地查阅某一部分结果，可以利用结果 (Results) 窗口中的目录树进行快速定位。
- 结果输出窗口中的内容可以保存为扩展名为.lst的纯文本文件。

- 结果 (Results) 窗口

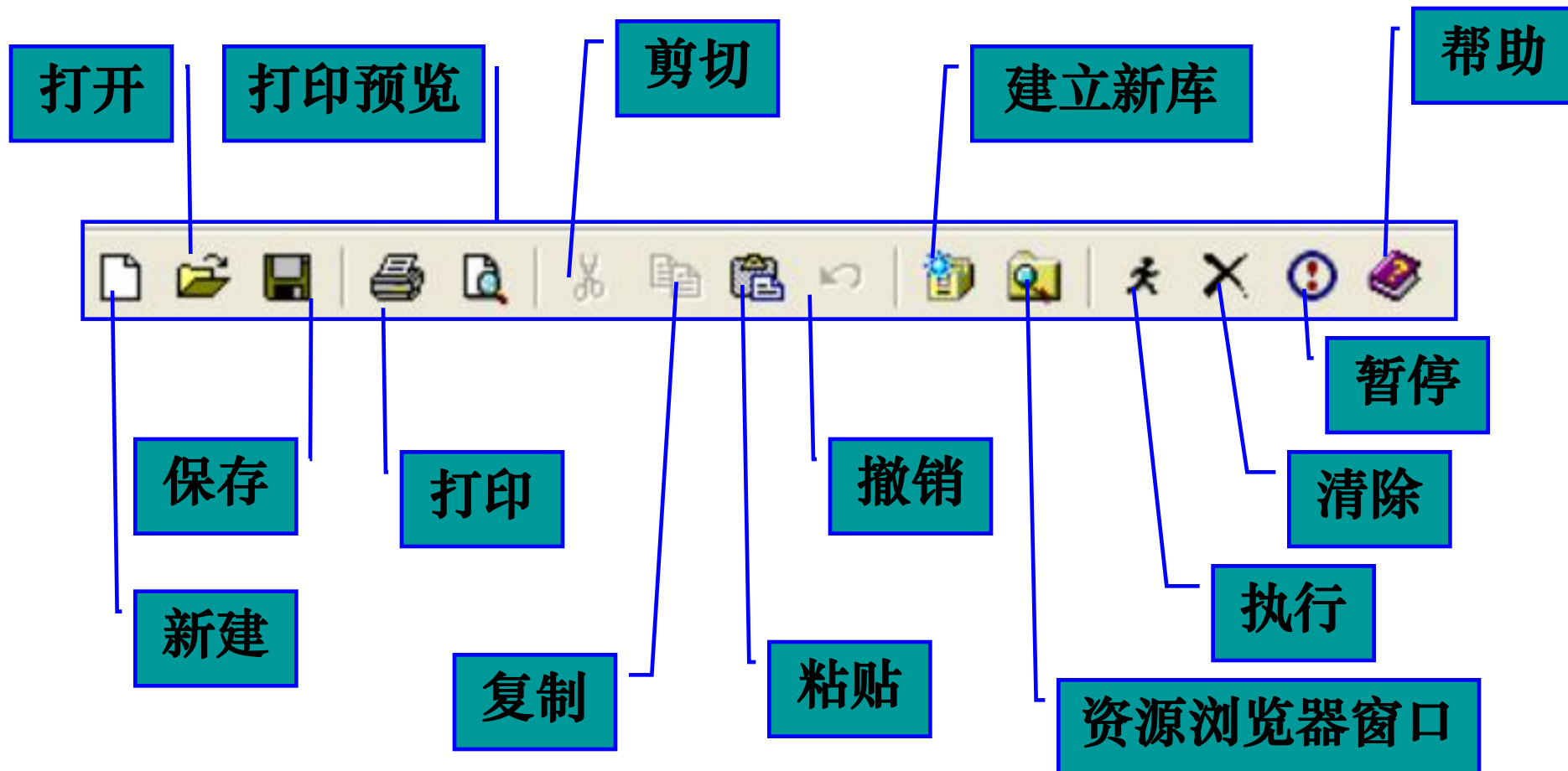
- 结果窗口帮助用户浏览和管理所提交SAS程序的输出结果。
- 在该窗口中将SAS系统的所有输出结果依次按照目录树的结构加以排列，每一个过程步的结果被表示为一个结点，展开该结点就可进一步看到表示不同输出内容的子结点，使用鼠标右键单击每个结点，就可对输出结果的各部分进行察看、存储、打印、删除等操作。

- 资源管理器 (Explorer) 窗口
 - 资源管理器窗口的作用类似于Windows操作系统的资源管理器，用于浏览和管理SAS系统中的各种文件。
- 其它子窗口
 - 除了增强型编辑器外，SAS还提供了普通的程序编辑 (program editor) 窗口；
 - 当使用SAS作图时，相应的统计图会在专门的Graph窗口中输出；
 - SAS的数据集显示窗口Viewtable等。

- SAS系统工作过程中，系统主菜单是动态变化的，随当前激活的窗口不同而有不同的组织结构，提供不同的主菜单命令。
- 其中的主要命令及功能：
 - File（文件）——支持SAS文件的调入、保存及打印的功能。
 - Edit（编辑）——支持编辑窗口的基本编辑操作（例如：清空、复制、剪切等）
 - View（浏览）——支持SAS系统用户在多窗口之间切换
 - Tools（工具）提供对各种输出结构进行编辑的工具，如：表格、图形、报告等，并支持进行系统环境和状态的设置
 - Run（运行）——用于执行或调用程序
 - Solutions（解决方案）——支持用户进行统计分析

SAS的工具栏

- 工具栏图标提供了常见任务的快捷操作方式



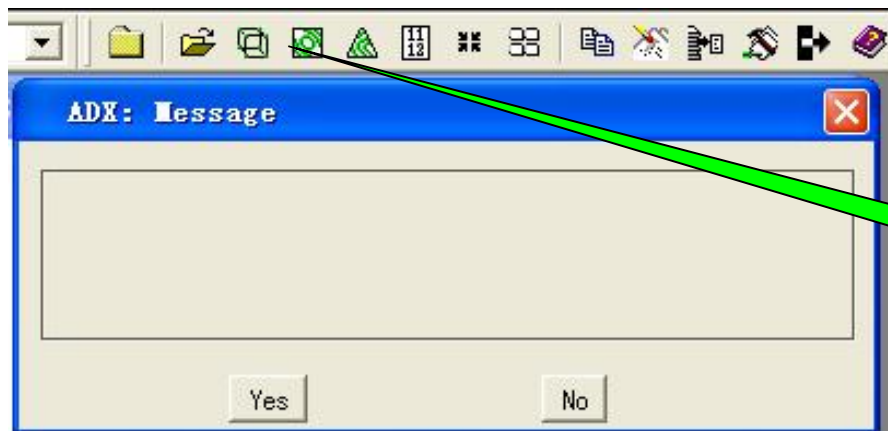
进入方法

Solution ↓ ⇒ Analysis ↓ ⇒ Design of Experiments
⇒

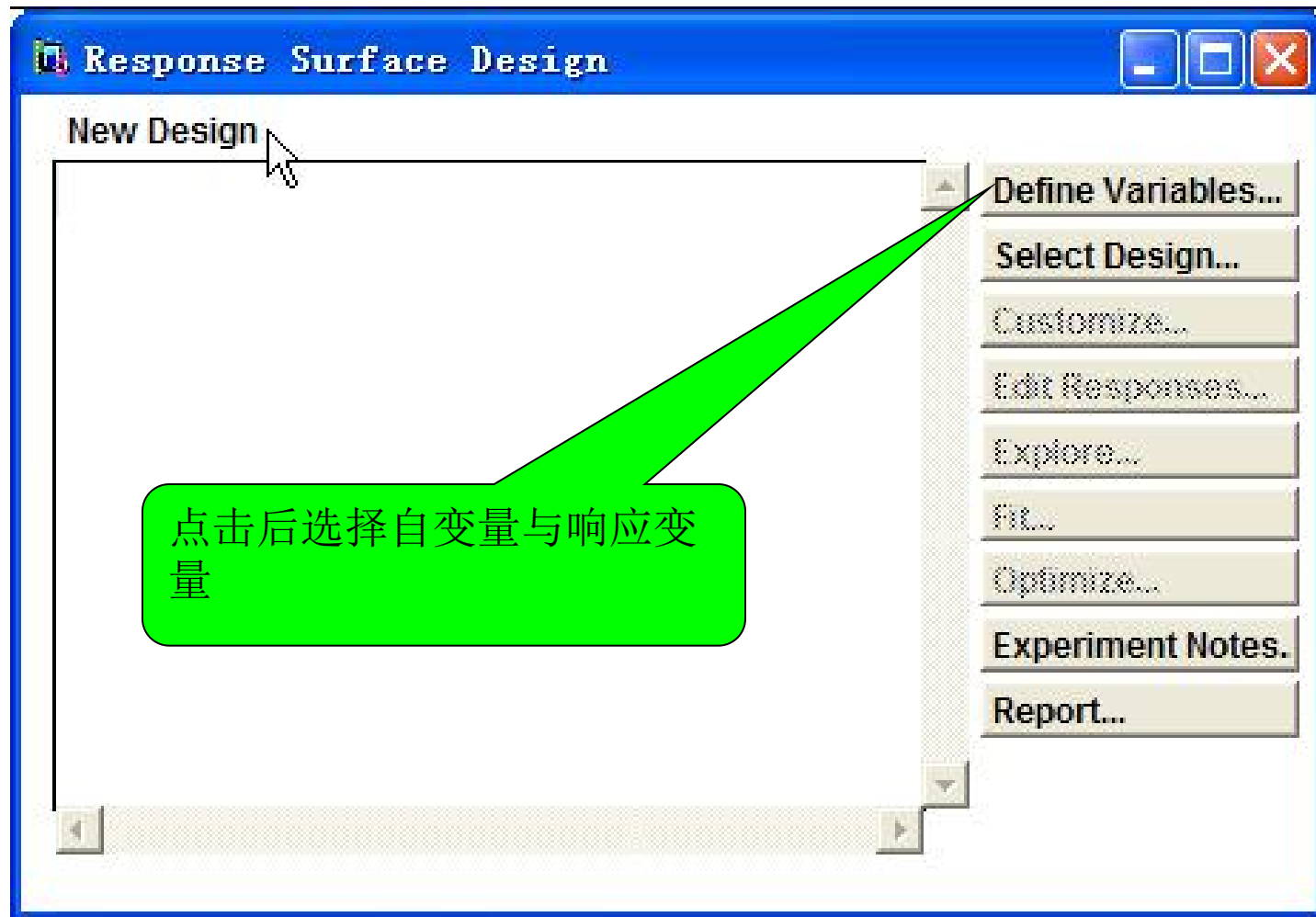
⇒ 点Yes 提供ADX 模块的操作信息

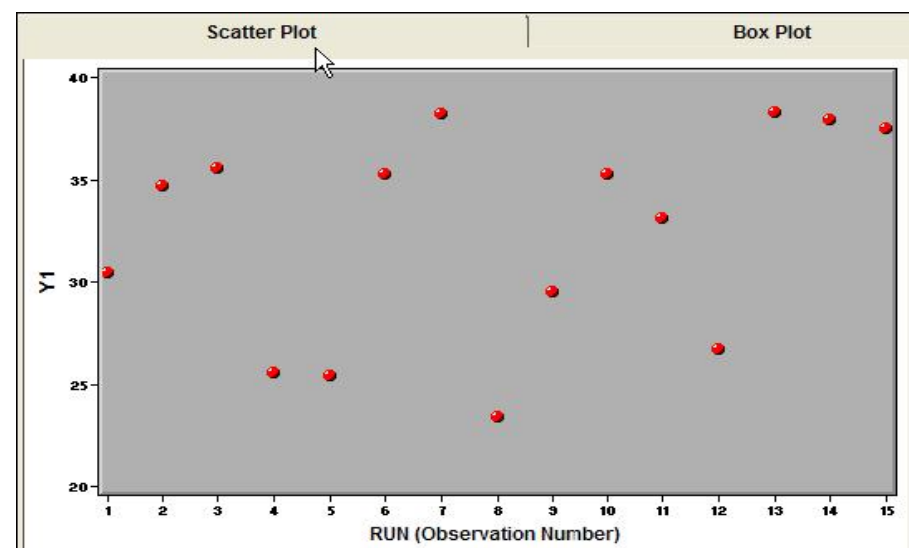
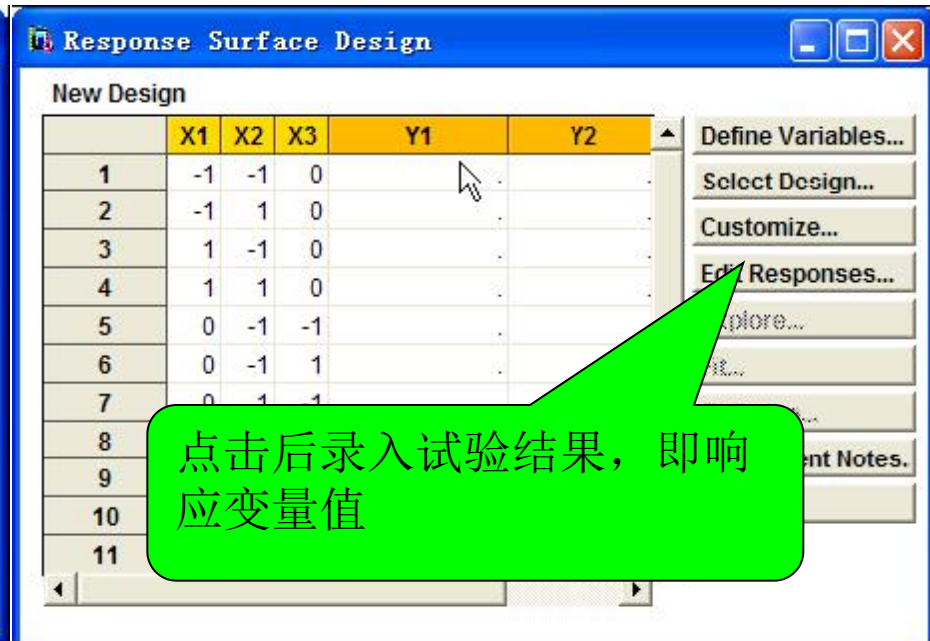
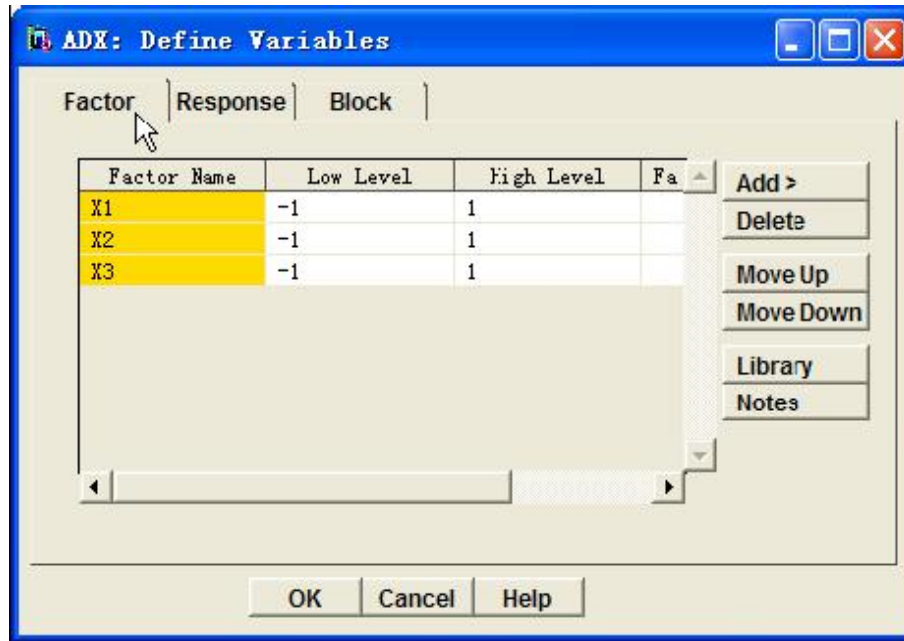
或⇒ 点No 则直接进入ADX 模块

工具栏上第3-----8 个图标分别可进入



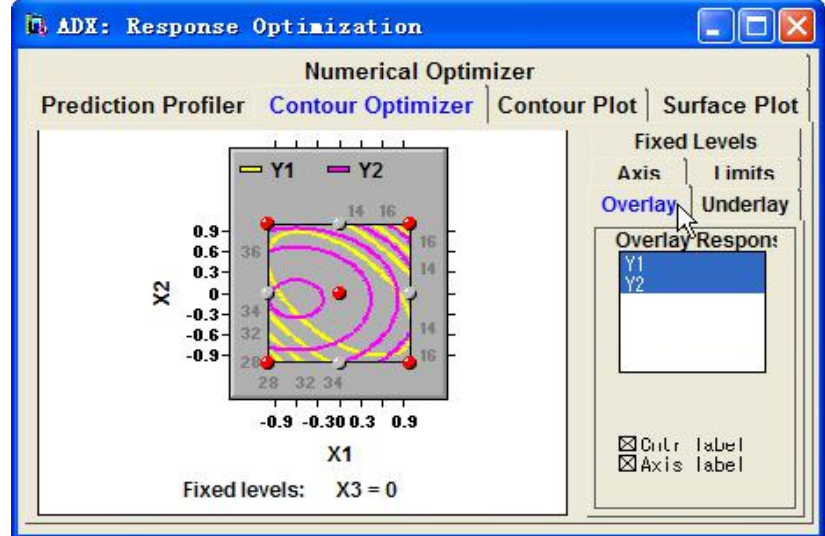
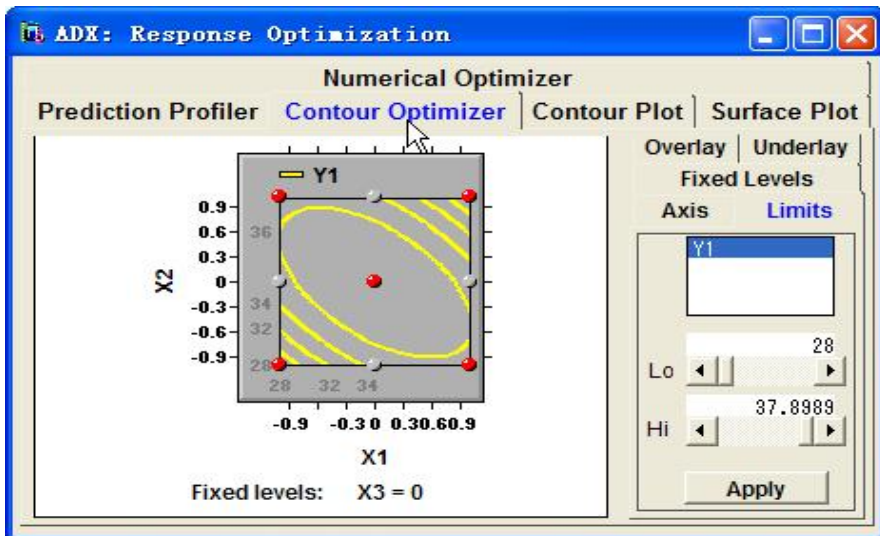
响应面分析实例

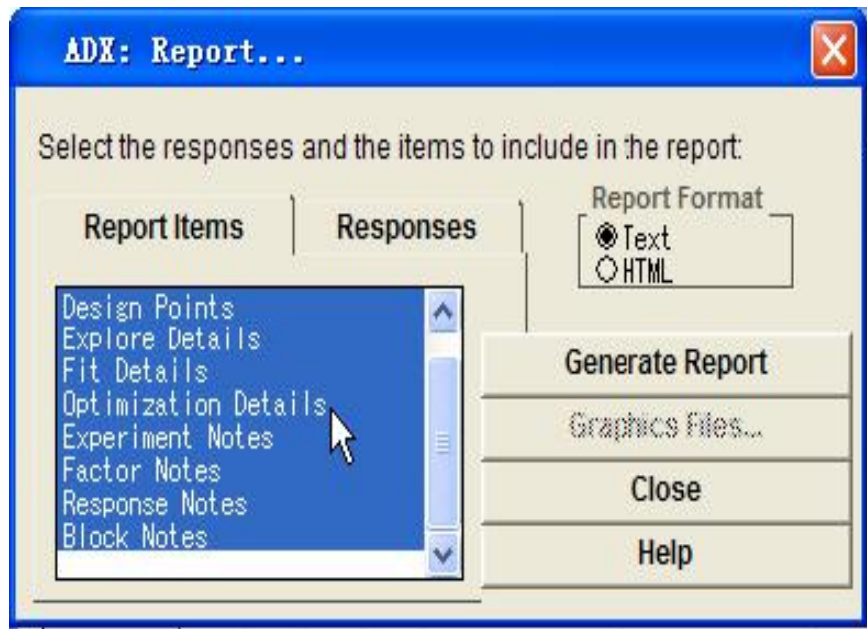
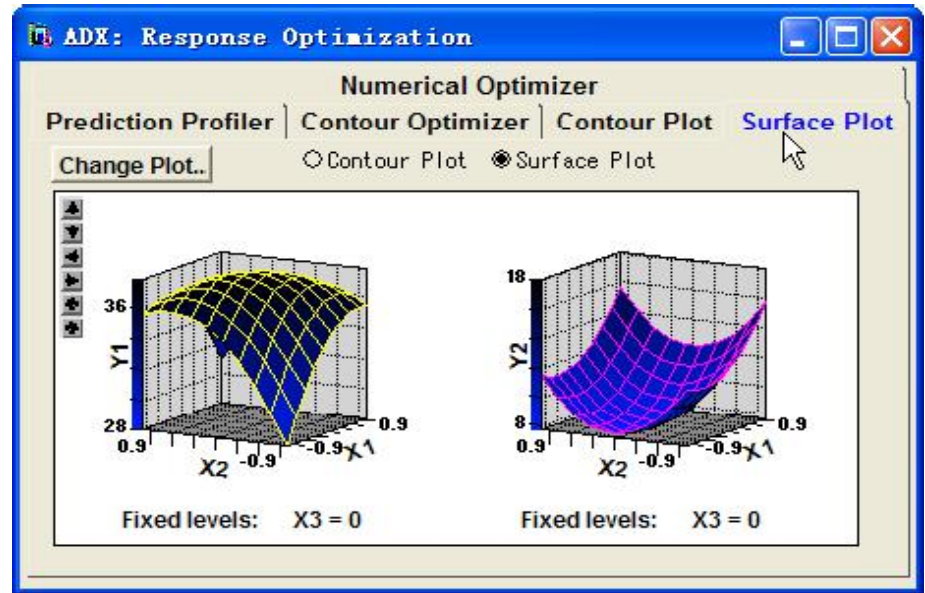
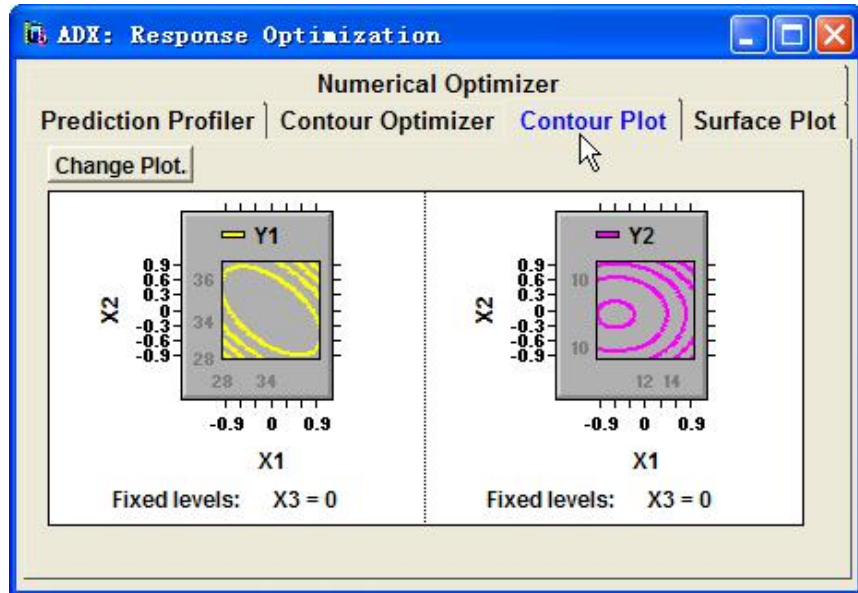




响应面设计与分析

| Effect | Estimate | Std Error | t Ratio | P Value |
|--------|----------|-----------|---------|---------|
| X1 | -0.5625 | 0.42212 | -1.3326 | 0.2402 |
| X2 | -0.6 | 0.42212 | -1.4214 | 0.2145 |
| X3 | -1.2375 | 0.42212 | -2.9316 | 0.0326 |
| X1*X1 | -2.875 | 0.62135 | -4.627 | 0.0057 |
| X1*X2 | -3.575 | 0.59697 | -5.9886 | 0.0019 |
| X1*X3 | -3.05 | 0.59697 | -5.1091 | 0.0037 |
| X2*X2 | -3.45 | 0.62135 | -5.5524 | 0.0026 |
| X2*X3 | -6.175 | 0.59697 | -10.344 | 0.0001 |
| X3*X3 | -3.875 | 0.62135 | -6.2364 | 0.0016 |





DETAILS FOR Y1:

ANOVA for Y1

| Source | DF | Master Model | | | | | DF | Predictive Model | | | | |
|--------|----|--------------|----------|----------|----------|--|----|------------------|----------|----------|----------|--|
| | | SS | MS | F | Pr > F | | | SS | MS | F | Pr > F | |
| X1 | 1 | 2.53125 | 2.53125 | 1.775693 | 0.240178 | | 1 | 2.53125 | 2.53125 | 1.775693 | 0.240178 | |
| X2 | 1 | 2.88 | 2.88 | 2.020344 | 0.214461 | | 1 | 2.88 | 2.88 | 2.020344 | 0.214461 | |
| X3 | 1 | 12.25125 | 12.25125 | 8.594353 | 0.032572 | | 1 | 12.25125 | 12.25125 | 8.594353 | 0.032572 | |
| X1*X1 | 1 | 30.51923 | 30.51923 | 21.40949 | 0.005699 | | 1 | 30.51923 | 30.51923 | 21.40949 | 0.005699 | |
| X1*X2 | 1 | 51.1225 | 51.1225 | 35.86286 | 0.001862 | | 1 | 51.1225 | 51.1225 | 35.86286 | 0.001862 | |
| X1*X3 | 1 | 37.21 | 37.21 | 26.10312 | 0.003741 | | 1 | 37.21 | 37.21 | 26.10312 | 0.003741 | |
| X2*X2 | 1 | 43.94769 | 43.94769 | 30.82967 | 0.002604 | | 1 | 43.94769 | 43.94769 | 30.82967 | 0.002604 | |
| X2*X3 | 1 | 152.5225 | 152.5225 | 106.8958 | 0.000145 | | 1 | 152.5225 | 152.5225 | 106.8958 | 0.000145 | |
| X3*X3 | 1 | 55.44231 | 55.44231 | 38.89324 | 0.001552 | | 1 | 55.44231 | 55.44231 | 38.89324 | 0.001552 | |
| Model | 9 | 371.5085 | 41.27872 | 28.95736 | 0.000864 | | 9 | 371.5085 | 41.27872 | 28.95736 | 0.000864 | |
| Error | 5 | 7.1275 | 1.4255 | | | | 5 | 7.1275 | 1.4255 | | | |
| Total | 14 | 378.636 | | | | | 14 | 378.636 | | | | |

Fit Statistics for Y1

| | Master Model | Predictive Model |
|---------------|--------------|------------------|
| Mean | 32.46 | 32.46 |
| R-square | 98.12% | 98.12% |
| Adj. F-square | 94.73% | 94.73% |
| RMSE | 1.193943 | 1.193943 |
| CV | 3.678198 | 3.678198 |

Alias Structure for Y1

| Master Model | Predictive Model |
|---------------------|---------------------|
| No effects aliased. | No effects aliased. |

Predictive Model for Y1

Coded Levels(-1,1):

$$Y1 = 37.9 - 0.5625*X1 - 0.6*X2 - 1.2375*X3 - 2.875*X1*X1 - 3.575*X1*X2 - 3.05*X1*X3 - 3.45*X2*X2 - 6.175*X2*X3 - 3.875*X3*X3$$

Uncoded Levels:

$$Y1 = 37.9 - 0.5625*X1 - 0.6*X2 - 1.2375*X3 - 2.875*X1*X1 - 3.575*X1*X2 - 3.05*X1*X3 - 3.45*X2*X2 - 6.175*X2*X3 - 3.875*X3*X3$$

Effect Estimates for Y1

| Term | Master Model | | | | Predictive Model | | | |
|-------|--------------|----------|----------|----------|------------------|----------|----------|---------|
| | Estimate | Std Err | t | Pr > t | Estimate | Std Err | t | Pr > t |
| X1 | -0.5625 | 0.422123 | -1.33255 | 0.240178 | -0.5625 | 0.422123 | -1.33255 | 0.24 |
| X2 | -0.6 | 0.422123 | -1.42139 | 0.214461 | -0.6 | 0.422123 | -1.42139 | 0.21 |
| X3 | -1.2375 | 0.422123 | -2.93161 | 0.032572 | -1.2375 | 0.422123 | -2.93161 | 0.03 |
| X1*X1 | -2.875 | 0.621348 | -4.62704 | 0.005699 | -2.875 | 0.621348 | -4.62704 | 0.00 |
| X1*X2 | -3.575 | 0.596972 | -5.98856 | 0.001862 | -3.575 | 0.596972 | -5.98856 | 0.00 |
| X1*X3 | -3.05 | 0.596972 | -5.10912 | 0.003741 | -3.05 | 0.596972 | -5.10912 | 0.00 |
| X2*X2 | -3.45 | 0.621348 | -5.55245 | 0.002604 | -3.45 | 0.621348 | -5.55245 | 0.00 |
| X2*X3 | -6.175 | 0.596972 | -10.3439 | 0.000145 | -6.175 | 0.596972 | -10.3439 | 0.00 |
| X3*X3 | -3.875 | 0.621348 | -6.23644 | 0.001552 | -3.875 | 0.621348 | -6.23644 | 0.00 |

输出结果：二次多项式回归方差分析表

此值小于0.05的项显著有效，回归的整体、二次项和交叉乘积项都显著有效，但是一次项的效果不显著。

| Source | DF | Seq SS | Adj SS | Adj MS | F | P |
|----------------|----|--------------|--------|-------------------|------|-------|
| Regression | 9 | 36.465 | 36.465 | 4.0517 | 4.08 | 0.019 |
| Linear | 3 | 7.789 | 7.789 | 2.5962 | 2.62 | 0.109 |
| Square | 3 | 13.386 | 13.386 | 4.4619 | 4.50 | 0.030 |
| Interaction | 3 | 15.291 | 15.291 | 5.0970 | 5.14 | 0.021 |
| Residual Error | 10 | 9.920 | 9.920 | 0.9920 | | |
| Lack-of-Fit | 5 | 7.380 | 7.380 | 1.4760 | 2.91 | 0.133 |
| Pure Error | 5 | 2.540 | 2.540 | 0.5079 | | |
| Total | 19 | 46.385 | | | | |
| S = 0.9960 | | R-Sq = 78.6% | | R-Sq(adj) = 59.4% | | |

此值较大，说明二次多项式回归效果比较好。

此值大于0.05，表示二次多项式回归模型正确。

输出结果：二次多项式回归系数及显著性检验

对编码值的
回归系数

P值大的
项不显著

对因素实际值的
回归系数

| Term | Coef (coded) | SE Coef | T | P | Coef (uncoded) |
|----------|--------------|---------|--------|-------|----------------|
| Constant | 10.4623 | 0.4062 | 25.756 | 0.000 | 12.4512 |
| A | -0.5738 | 0.2695 | -2.129 | 0.059 | 0.9626 |
| B | 0.1834 | 0.2695 | 0.680 | 0.512 | -2.2841 |
| C | 0.4555 | 0.2695 | 1.690 | 0.122 | -1.4794 |
| A*A | -0.6764 | 0.2624 | -2.578 | 0.027 | -0.2676 |
| B*B | 0.5628 | 0.2624 | 2.145 | 0.058 | 1.1164 |
| C*C | -0.2734 | 0.2624 | -1.042 | 0.322 | -0.2388 |
| A*B | -0.6775 | 0.3521 | -1.924 | 0.083 | -0.6001 |
| A*C | 1.1825 | 0.3521 | 3.358 | 0.007 | 0.6951 |
| B*C | 0.2325 | 0.3521 | 0.660 | 0.524 | 0.3060 |

回归方程的可信程度分析



T检验

计算得到的T如果大于 $T_{\text{临界}}$ ，表示回归效果好，否则，说明回归效果不好。

F检验

计算得到的F如果大于F临界，表示随机误差引起的波动较小，回归效果好，否则，说明回归效果不好。

标准差s

- ✓ 标准差s的值小，表示回归效果比较好；
- ✓ 特别对于同一组数据的不同回归方程，比较其回归标准差的大小，也是评价方程优劣的重要指标之一。

P值

- 在对回归系数的分析以及对回归方程的方差分析中，P值小于0.05表示回归方程或系数显著，回归效果比较理想；
- P值大于0.05表示不显著，回归效果不好。



R^2 和 $R^2(\text{adj})$

- ✓ R^2 称为多元相关的相关指数，也称决定系数，它表示用回归方程进行预测的可靠；
- ✓ 对于一元回归， R =相关系数 r ；
- ✓ $R^2(\text{adj})$ 是对回归方程式中变量过多的一种调整，在此处键入公式。
$$R^2(\text{adj}) = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-k}$$
，其中 n 为观测值的数量， k 为回归方程的项数；
- ✓ R^2 和 $R^2(\text{adj})$ 接近1，并且两者接近，表示回归方程效果好；否则，说明回归效果不显著。

残差分析

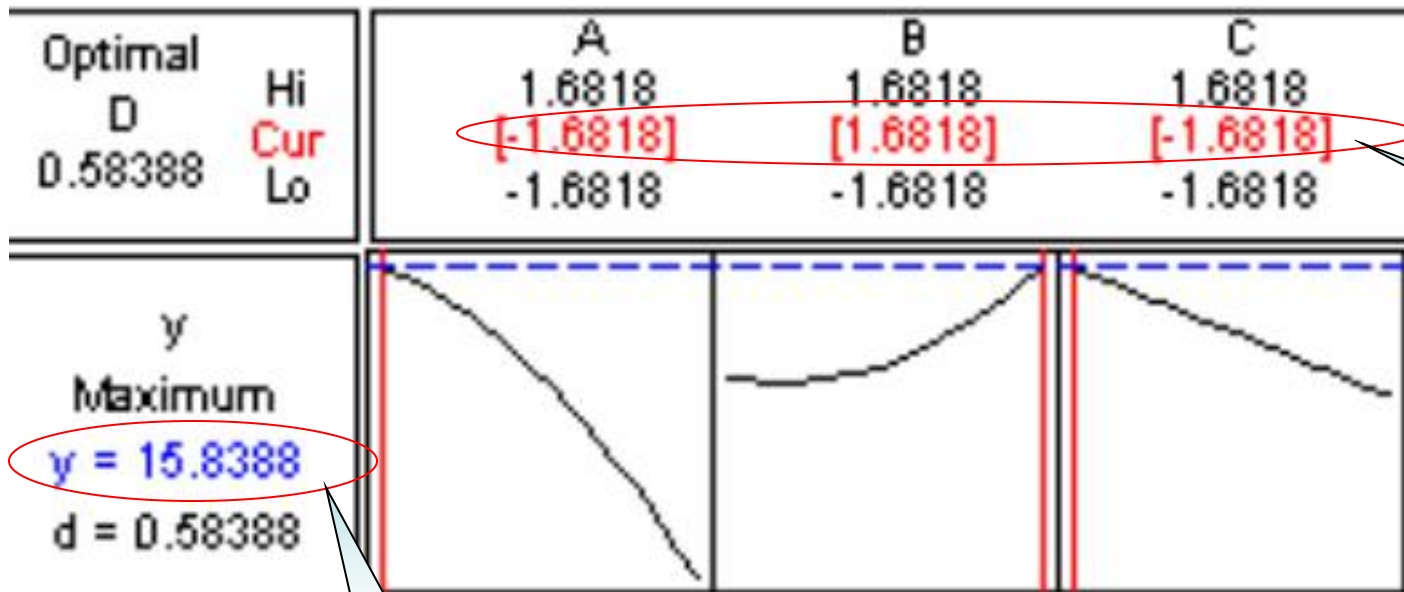
- ✓ 残差为实际值和预测值之差。
- ✓ 残差服从以0为均值的正态随机分布，则回归效果好。

失拟分析

❖ 失拟分析的原假设为回归方程没有失拟。

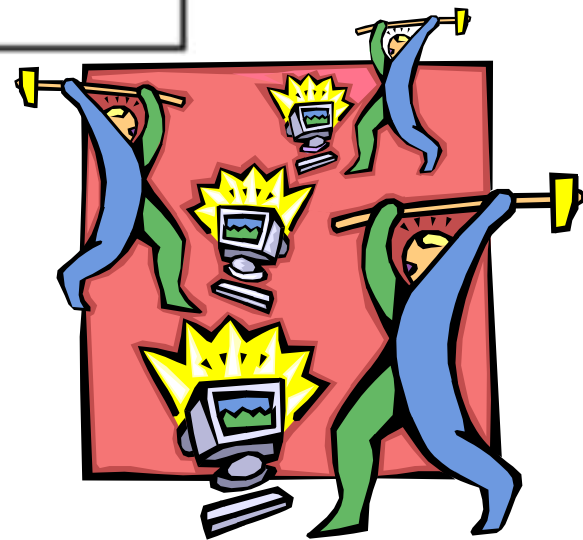
❖ 注意：如果 $P > 0.05$ ，则回归方程没有失拟，即拟合良好； $P < 0.05$ ，则回归方程失拟，即拟合欠佳。





因子最优
水平值

最优预
测值



例1 大豆施肥量最优化设计

➤ 在研究大豆产量 Y 的试验中，考虑氮肥A、磷肥B、钾肥C这三种肥料的施肥量。每个因素取两个基本水平，采用中心复合试验，其中：

氮肥的编码值-1和+1对应的实际值是2.03和5.21；

磷肥的编码值-1和+1对应的实际值是1.07和2.49；

钾肥的编码值-1和+1对应的实际值是1.35和3.49；



大豆产量试验设计与结果表

| StdOrder | RunOrder | Blocks | <i>A</i> | <i>B</i> | <i>C</i> | <i>y</i> |
|----------|----------|--------|----------|----------|----------|----------|
| 5 | 1 | 1 | -1.00000 | -1.00000 | 1.00000 | 8.94 |
| 20 | 2 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 11.02 |
| 19 | 3 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 11.53 |
| 6 | 4 | 1 | 1.00000 | -1.00000 | 1.00000 | 10.90 |
| 4 | 5 | 1 | 1.00000 | 1.00000 | -1.00000 | 7.71 |
| 16 | 6 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 10.22 |
| 15 | 7 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 10.14 |
| 1 | 8 | 1 | -1.00000 | -1.00000 | -1.00000 | 11.28 |
| 18 | 9 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 9.50 |
| 8 | 10 | 1 | 1.00000 | 1.00000 | 1.00000 | 11.03 |
| 13 | 11 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | -1.68179 | 7.98 |
| 14 | 12 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 1.68179 | 10.43 |
| 11 | 13 | 1 | 0.00000 | -1.68179 | 0.00000 | 12.08 |
| 12 | 14 | 1 | 0.00000 | 1.68179 | 0.00000 | 11.06 |
| 9 | 15 | 1 | -1.68179 | 0.00000 | 0.00000 | 8.26 |
| 2 | 16 | 1 | 1.00000 | -1.00000 | -1.00000 | 8.44 |
| 10 | 17 | 1 | 1.68179 | 0.00000 | 0.00000 | 7.87 |
| 3 | 18 | 1 | -1.00000 | 1.00000 | -1.00000 | 13.19 |
| 7 | 19 | 1 | -1.00000 | 1.00000 | 1.00000 | 11.85 |
| 17 | 20 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 10.53 |

例2 塑胶成型工艺改进

➤ 某公司生产的塑胶零件，有一个关键尺寸 $252 \pm 2\text{mm}$ 因变形而难于有效控制。经山西大学某研究小组的前期研究和分析判断，确定引起零件变形的关键因素为注塑时的射出压力、保持压力和射出时间。小组确信三个因素的交互作用对输出指标有重要影响，并怀疑因素的非线性影响也很重要。因此决定选择CCD设计进行试验。因素水平表如下：

| 因素 | | 水平 | |
|----|------|------|------|
| | | - | + |
| A | 射出压力 | 1200 | 1400 |
| B | 保持压力 | 700 | 800 |
| C | 射出时间 | 1.2 | 1.6 |

响应面设计与分析

Box-Behnken Design

Response: 1 (1 to 999)

Name: F1 Units:

For Help, press F1

Navigation: << Back Continue >>

Buttons: OK Cancel

Yellow text boxes with arrows:

- 选择响应值即变量的数量 (Points to '1')
- 因变量的单位 (Points to 'Units')
- 因变量的名称 (Points to 'F1')

两种排序方式，可任选

试验中设置的因子的水平

把每个试验对应的试验结果填入本栏内，准备做数据分析

BLOCK的含义

例如：本实验需要分两天完成，那么两天中因为其他不可控制因素的变化可能会对试验造成影响，那么就可以设置2个BLOCK，软件会在两个BLOCK中设置对应的几个中点试验重复，检查中点试验的重复性是否良好，以观察这些不可控制因素对试验造成多大影响，从而最大限度的降低试验中不可控制因素对试验的干扰。再例如，本实验其中一部分在甲实验室完成，另一部分要在乙实验室完成，那么就可以设置2个BLOCK，原因同上。

响应面设计与分析

各因素的实际值变为编码值，比如，因素1的高点设置为0.5，编码值即为+1，低点设置为0，编码值即为-1，中点为0.25，编码值即为0

完成每组试验，
将试验结果填入
对应的响应值框
内。

转变为编码值之后的
页面

点击 Analysis 下的 Yield
(Analysed)

[点击此处即开始进行数据分析](#)

Analysis Process

After you have entered your response data in the Design Layout view, choose a response by clicking on the corresponding node under Analysis. Now follow the steps displayed as buttons across the top of the view.

1. Transformation. Select response node and choose transformation.
- 2a. Fit Summary (RSM/Mix). Use this to evaluate models for RSM and Mixture.
- 2b. Effects (Factorials). Choose significant effects from graph or list.
3. Model (RSM/Mix). Choose model order and desired terms from list.
4. Analysis of Variance (ANOVA). Analyze the chosen model and view results.
5. Diagnostics. Evaluate model fit and transformation choice with graphs.
6. Model Graphs. Use these to interpret and evaluate your model.

试验设计与分析

响应面设计与分析

1, Transform 选项卡, 取默认值

2, 点击 Fit summary 选项卡

None (lambda = 1.0)

$y' = y$

Use with a typical response.

Response ranges from 76.91 to 98.
Ratio of max to min is 1.27432

A ratio greater than 10 usually indicates a transformation is required. For ratios less than 3 the power transforms have little effect.

Model 选项卡取默认值, 再点击 ANOVA 选项卡

拟合公式的处理方法, 一般取默认即可

Intercept
A-Sulfate
B-Yeast Extract
C-Ammonium Sulfate
D-Sodium Chloride
AB
AC
AD
BC
BD
CD
AB²
AC²
AD²
BC²
BD²
CD²

再点击 Diagnostics 选项卡

方差分析 (ANOVA), 方程的显著性检验, 系数显著性检验方程。

| Source | Sum of Squares | df | Mean Square | F Value | p-value | Prob > F |
|--------------------|----------------|----|-------------|-----------|---------|-----------------|
| Model | 573.43 | 14 | 40.96 | 1.71 | 0.1646 | not significant |
| A-Sulfate | 14.30 | 1 | 14.30 | 0.60 | 0.4309 | |
| B-Yeast Extract | 17.78 | 1 | 17.78 | 0.74 | 0.4639 | |
| C-Ammonium Sulfate | 95.08 | 1 | 95.08 | 5.88 | 0.0091 | |
| D-Sodium Chloride | 32.30 | 1 | 32.30 | 2.18 | 0.1019 | |
| AB | 15.61 | 1 | 15.61 | 0.58 | 0.4008 | |
| AC | 6.17 | 1 | 6.17 | 0.26 | 0.6100 | |
| AD | 7.16 | 1 | 7.16 | 0.30 | 0.5826 | |
| BC | 1.02 | 1 | 1.02 | 0.043 | 0.8304 | |
| BD | 8.72 | 1 | 8.72 | 0.36 | 0.5504 | |
| CD | 8.18 | 1 | 8.18 | 0.34 | 0.5686 | |
| AB ² | 0.46 | 1 | 0.46 | 0.020 | 0.8814 | |
| BC ² | 202.18 | 1 | 202.18 | 8.42 | 0.0116 | |
| CD ² | 0.88 | 1 | 0.88 | 0.035 | 0.8541 | |
| DF | 21006.007 | 1 | 21006.007 | 84506.600 | 0.0000 | |
| Residual | 336.14 | 14 | 24.01 | | | |
| Lack of Fit | 285.20 | 8 | 35.65 | 4.31 | 0.0014 | significant |
| Pure Error | 47.94 | 6 | 7.99 | | | |
| Cor Total | 909.57 | 28 | | | | |

例如本试验中, 拟合的方程显著性不好, 显示为不显著

残差的正态概率分布图, 越靠近直线越好

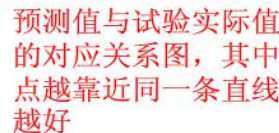
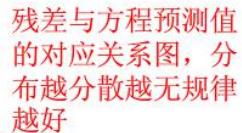
参差的正态概率分布图, 应在一条直线上

Normal Plot of Residuals

Color points by value of Yied:
90
76.91

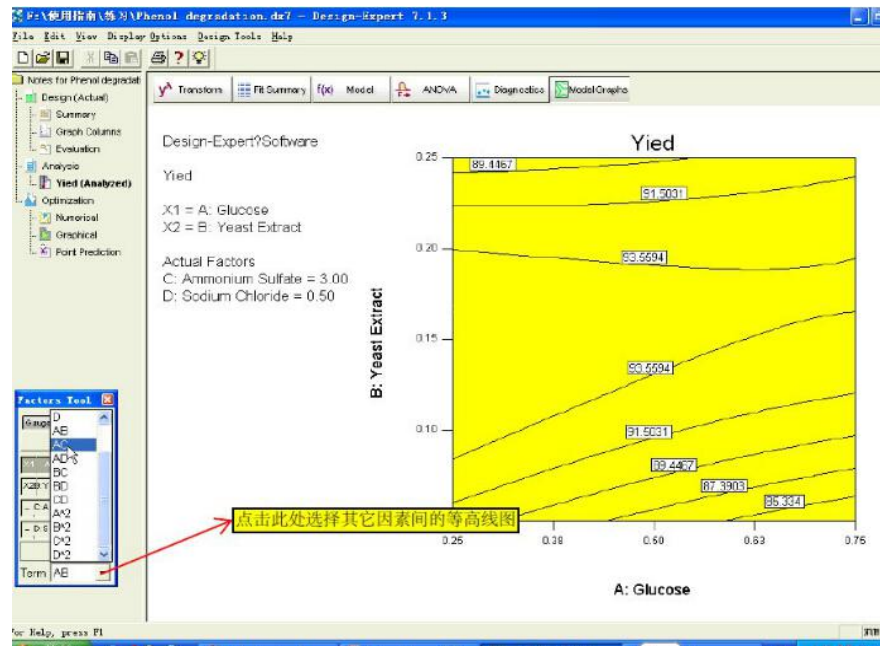
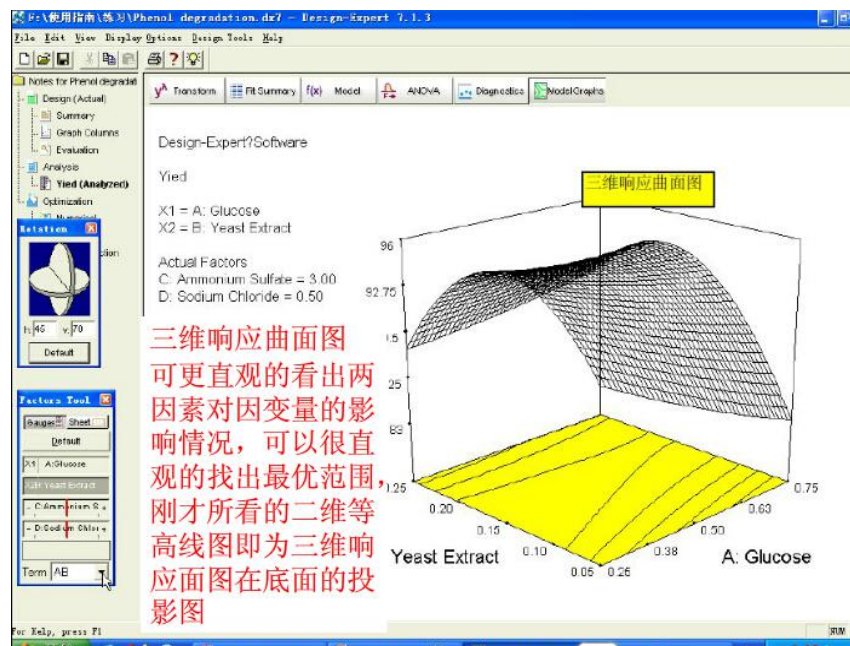
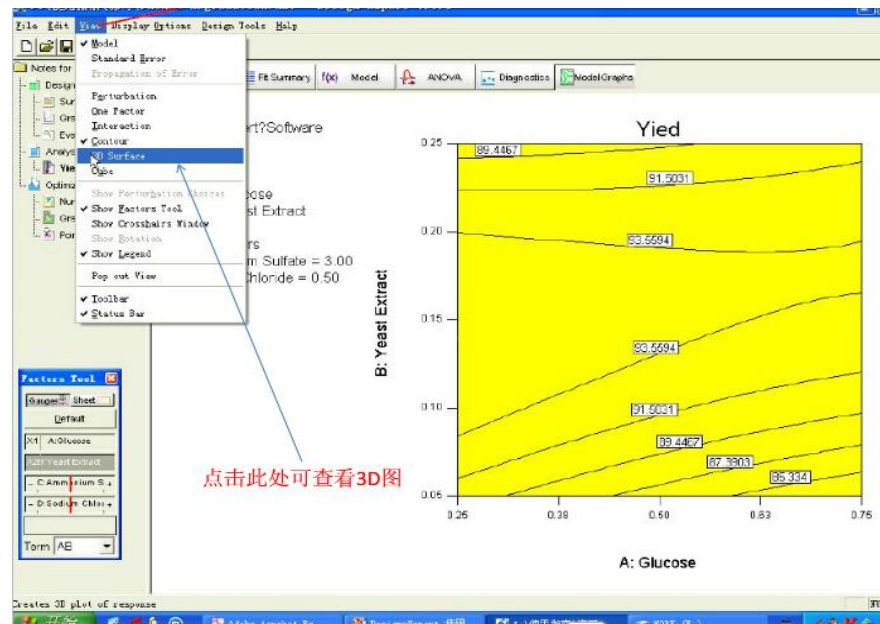
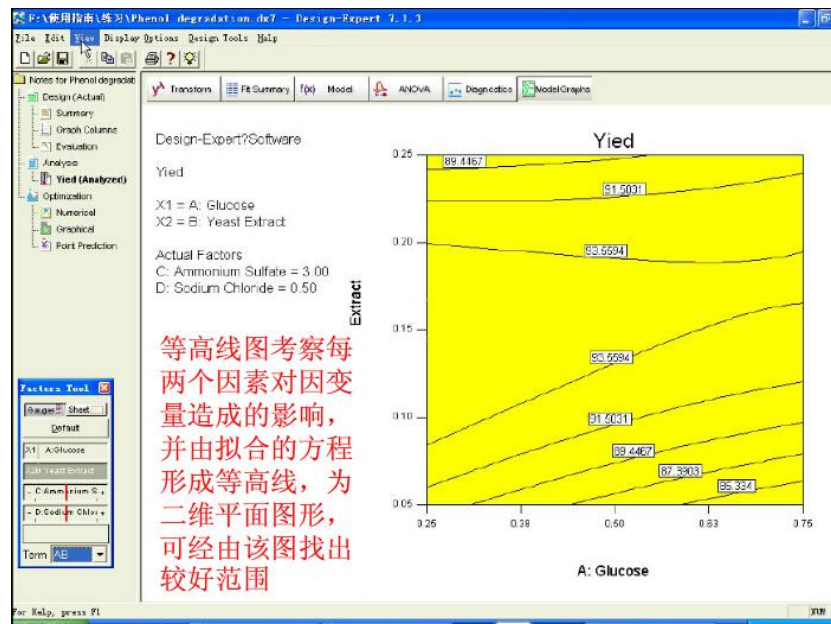
Internally Studentized Residuals

响应面设计与分析



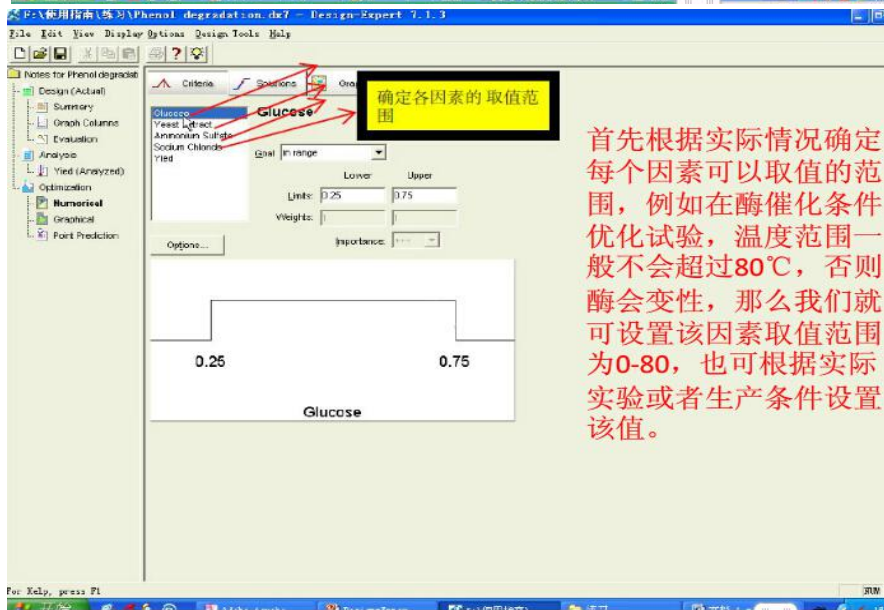
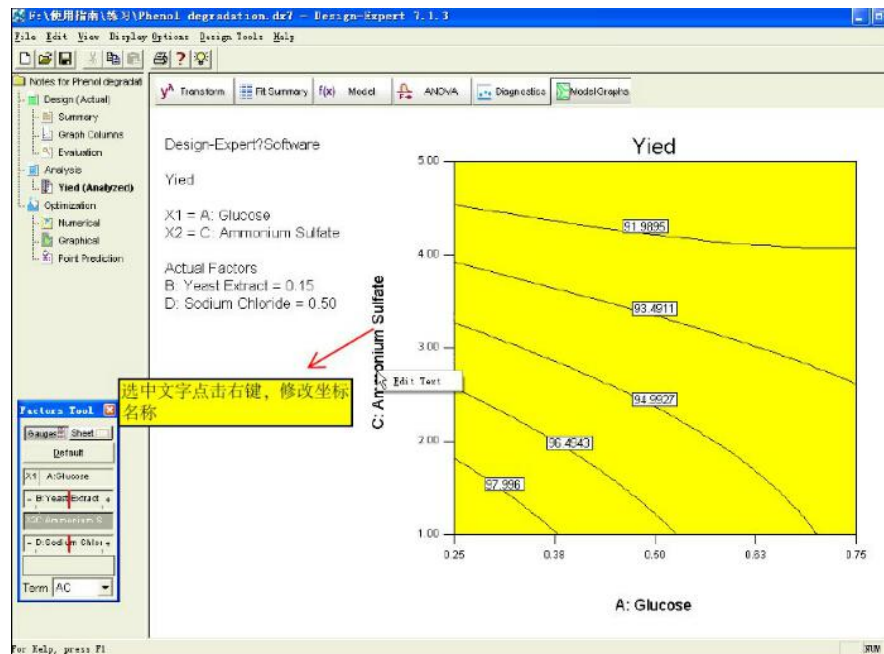
试验设计与分析

响应面设计与分析

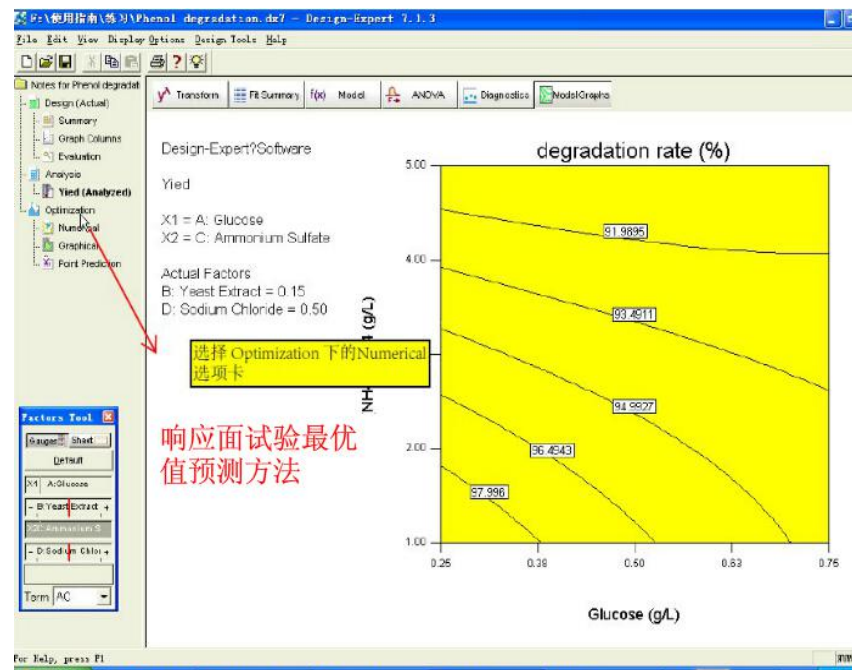


试验设计与分析

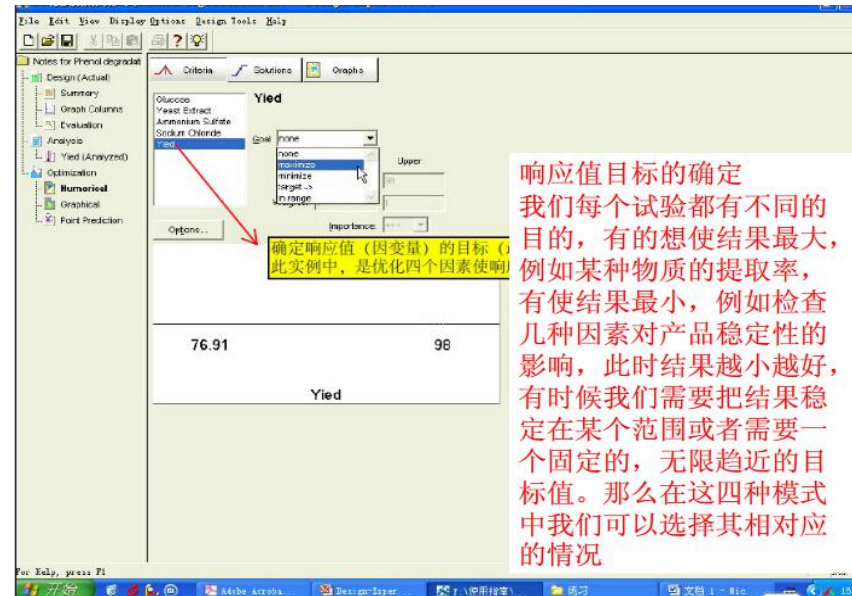
响应面设计与分析



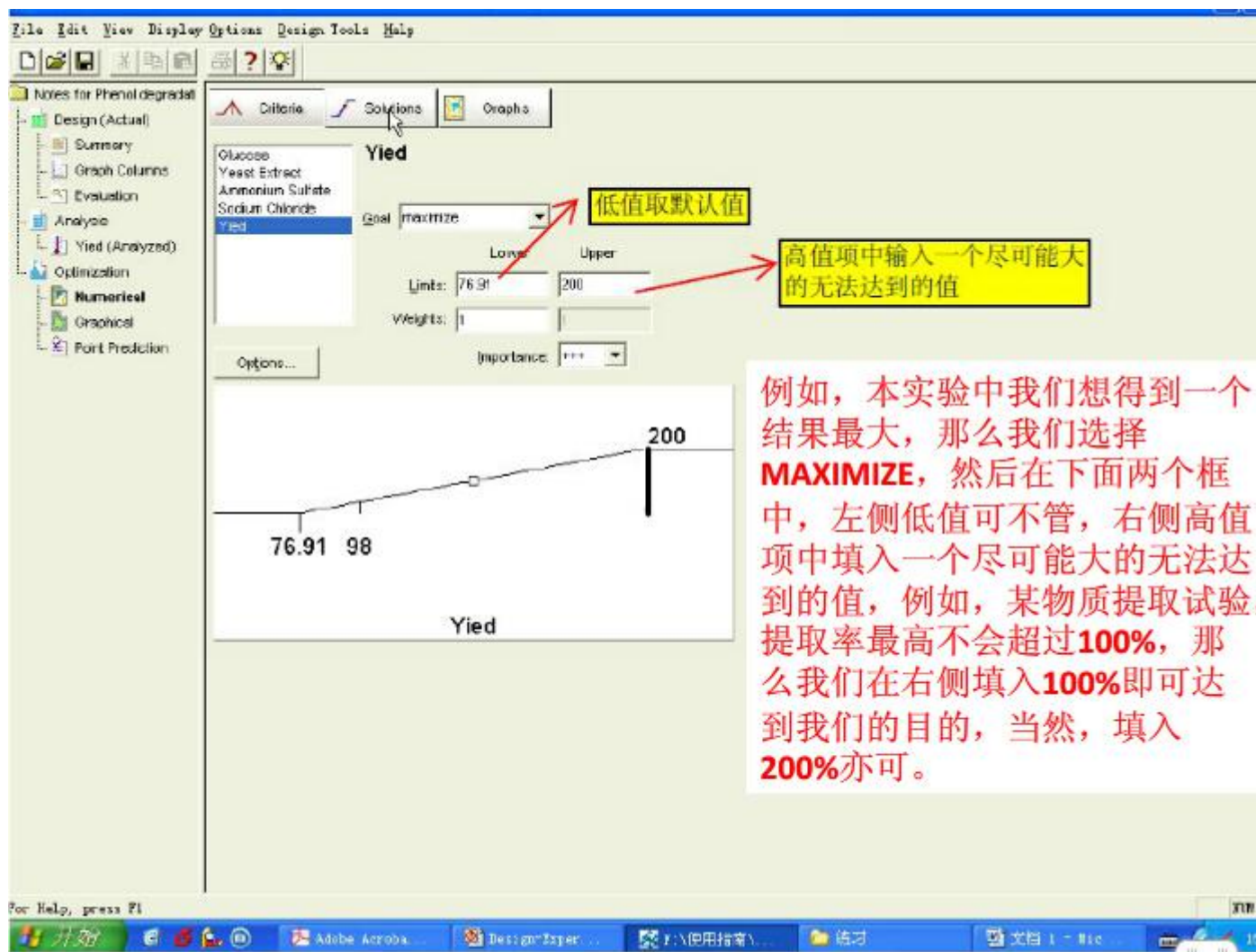
首先根据实际情况确定每个因素可以取值的范围, 例如在酶催化条件优化试验, 温度范围一般不会超过80℃, 否则酶会变性, 那么我们就可设置该因素取值范围为0-80, 也可根据实际实验或者生产条件设置该值。



响应面试验最优值预测方法



响应值目标的确定
我们每个试验都有不同的目的, 有的想使结果最大, 例如某种物质的提取率, 有使结果最小, 例如检查几种因素对产品稳定性的影响, 此时结果越小越好, 有时候我们需要把结果稳定在某个范围或者需要一个固定的, 无限趋近的目标值。那么在这四种模式中我们可以选择其相对应的情况



点击Solutions选项卡

Notes for Phenol degradation

- Design (Actual)
- Summary
- Graph Columns
- Evaluation
- Analysis
- Yield (Analyzed)
- Optimization
- Numerical
- Graphical
- Point Prediction

Solutions 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25

| Name | Goal | Lower Limit | Upper Limit | Lower Weight | Upper Weight | Importance |
|------------------|-------------|-------------|-------------|--------------|--------------|------------|
| Glucose | is in range | 0.25 | 0.75 | 1 | 1 | 3 |
| Yeast Extract | is in range | 0.05 | 0.25 | 1 | 1 | 3 |
| Ammonium Sulfate | is in range | 1 | 5 | 1 | 1 | 3 |
| Sodium Chloride | is in range | 0.25 | 0.75 | 1 | 1 | 3 |
| Yield | maximize | 76.91 | 200 | 1 | | |

此处为最优条

| Number | Glucose | Yeast Extract | Ammonium Sulfate | Sodium Chloride | Yield | Desirability |
|--------|---------|---------------|------------------|-----------------|---------|--------------|
| 1 | 0.25 | 0.14 | 1.00 | 0.25 | 101.355 | 0.199 |
| 2 | 0.25 | 0.13 | 1.00 | 0.25 | 101.353 | 0.199 |
| 3 | 0.25 | 0.14 | 1.00 | 0.25 | 101.345 | 0.199 |
| 4 | 0.25 | 0.14 | 1.02 | 0.25 | 101.342 | 0.198 |
| 5 | 0.25 | 0.13 | 1.06 | 0.25 | 101.314 | 0.198 |
| 6 | 0.25 | 0.13 | 1.06 | 0.25 | 101.311 | 0.198 |
| 7 | 0.25 | 0.14 | 1.00 | 0.25 | 101.31 | 0.198 |
| 8 | 0.25 | 0.13 | 1.08 | 0.25 | 101.302 | 0.198 |
| 9 | 0.25 | 0.13 | 1.00 | 0.25 | 101.278 | 0.198 |
| 10 | 0.25 | 0.12 | 1.00 | 0.25 | 101.275 | 0.198 |
| 11 | 0.25 | 0.13 | 1.00 | 0.26 | 101.256 | 0.198 |
| 12 | 0.25 | 0.14 | 1.16 | 0.25 | 101.241 | 0.198 |
| 13 | 0.26 | 0.14 | 1.00 | 0.25 | 101.232 | 0.198 |

第一个方案即为各因素取最优值后的响应所能取到的最大值。

上一步完成后在此处点击solutions选项卡，即可看到经过分析得到的最优值，其中第一个方案就是各因素取最优值后的结果可取得最大化的解决方案，为预测值

For Help, press F1

开始 运行 文档 1 - Mic

操千曲而后晓声
观千剑而后识器

你的进步，我的快乐！

