

工程师的DOE零基础指南： 实验设计赋能研发创新与工艺优化



目录

前言	3
实验设计简介.....	3
实验设计类型.....	4
实验设计应用场景.....	4
实验设计实施阶段.....	5
实验设计 workflow.....	5
实验设计常用术语.....	6
实验设计三大原则.....	6
案例实战	7
案例 1: 应用响应曲面设计优化 PCB 设计仿真实验参数.....	7
案例背景.....	7
创建实验方案.....	8
采集实验数据.....	8
建立回归模型.....	8
应用回归模型.....	10
小结.....	11
案例 2: 基于定制设计实现化工材料配方开发与工艺优化.....	12
案例背景.....	12
创建实验方案.....	12
采集实验数据.....	12
建立回归模型.....	13
应用回归模型.....	14
小结.....	15
案例 3: 结合空间填充设计与机器学习优化食品配方与工艺.....	16
案例背景.....	16
创建实验方案.....	16
采集实验数据.....	16
标准最小二乘建模.....	17
SVEM 机器学习建模.....	18
模型比较.....	19
小结.....	20
总结	21
实验设计方法选择.....	21
经典 vs 最优 vs 现代.....	21
基于模型 vs 模型未知.....	22
常用实验设计方法.....	24
设计诊断.....	24
JMP 实验设计的优势.....	25



前言

实验设计简介

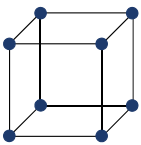
DOE, 即实验设计(Design of Experiment), 是研究和处理多因子与响应变量关系的一种科学方法, 它通过合理地挑选实验条件, 安排实验, 并通过对实验数据的分析, 从而找出最优的改进方案。从上个世纪20年代费雪(Ronald Fisher)在农业实验中首次提出DOE的概念, 到六西格玛管理在世界范围内的蓬勃发展, DOE已经历了近一个世纪的发展历程, 在学术界和企业界均获得了崇高的声誉。

其实, DOE对于中国人来说, 并不是一个完全崭新的内容。早在新中国成立初期, 华罗庚教授就在我国农业、工业领域大力倡导与普及DOE, 只是当时他运用的是另一个名词——优选法。七十年代末, 方开泰教授和王元院士又提出了著名的“均匀设计”法, 这一方法在我国航空航天事业的导弹设计中取得了巨大成效。与此同时, “均匀设计”法也在全球研究DOE理论的学术界得到了高度赞誉。但是, 在将DOE的先进理念和科学方法向各行各业和一般技术人员普及推广, 并转换为高效生产力的道路上, 我们的进展还十分有限。

- **实验规划:** 主动、预先地制定方案和计划, 在设计空间中合理布点进行实验, 进行科学、系统、高效的数据采样
- **分析方法:** 分析采集的实验数据, 对响应和因子之间的关系建模, 辅助决策

一般的实际问题都是纷繁复杂、千变万化的, 但是透过现象看本质, 所有实际问题的共同点也可以通过统一的模型来抽象概括。图2就是一个高度简化的过程模型, 其中Y1, Y2等变量是我们关心的输出变量, 例如质量指标、生产能力和成本等, 通常被称为“响应变量”(Response); X1, X2等变量是我们在工作中可以加以控制的输入变量, 例如人员、设备、原材料、操作方法和环境等, 通常被称为“可控因子”(Factor), 它们可以是连续型变量, 也可以是离散型变量; 中间的“暗箱”是“过程”(Process), 在前两者之间起着衔接转换的作用, 它与不同行业、不同产品、不同技术密切相关, 但整体都可以用 $y=f(x)$ 的数学模型来表示。这个数学模型的具体表达式越精准, 说明我们对这个过程的理解越深刻, 而DOE就是协助我们揭示或验证该数学模型表达式的利器。

什么是实验设计 (DOE) ?



如何最大限度获取洞察, 同时减少实验?

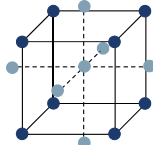


图 1 实验设计简介

从本质上讲, DOE是这样一门科学: 研究如何以最有效的方式安排实验, 通过对实验结果的分析以获取最大信息量。所以, DOE有两大技术支柱: 实验规划和分析方法。

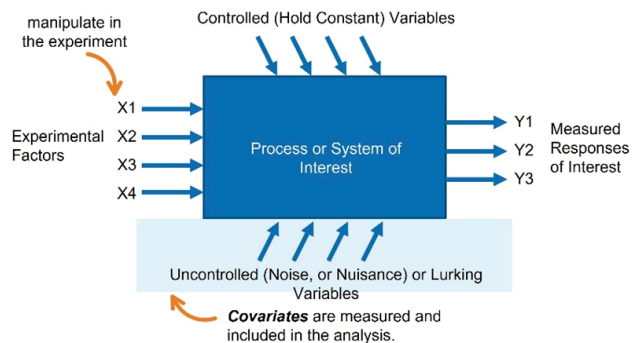


图 2 过程模型

在某些要求不高的工作环境中, 往往不需要用一个复杂的数学表达式来描述过程的全貌, 但至少要了解哪个或哪几个因子对响应的影响显著, 哪些因子之间存在着相互影响的关系等。这

时，“主效应”(Main Effect)和“交互作用”(Interaction)可以帮助我们回答这些问题。主效应是指一个因子在不同水平下的变化导致响应的平均变化量。正如图3所示，X在-1和+1两个水平下Y值的落差反映的就是主效应。交互作用是指当其他因子的水平改变时，一个因子的主效应的平均变化量。正如图4所示，图4a中因子A对Y的影响没有受因子B的变化而变化，两组A与Y的回归直线完全平行，表明因子A与B之间没有任何交互作用；反之，图4b中因子A对Y的影响受因子B的变化而变化，两组A与Y的回归直线明显相交，表明因子A与B之间存在显著的交互作用。

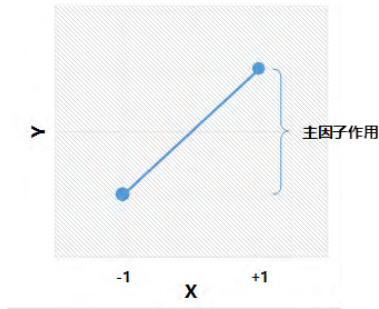


图3 主效应示意图

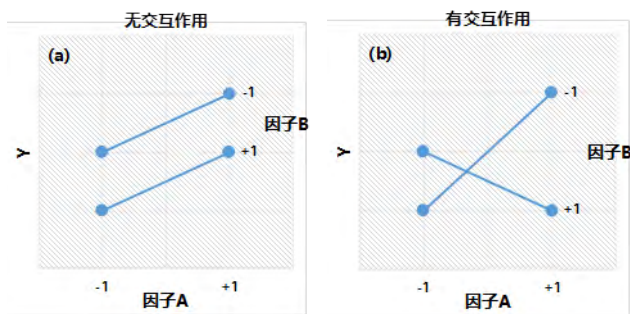


图4 因子交互作用示意图

在DOE方法引入以前，传统实验方法往往是采用试错法 (trial and error) 或单因子实验法 (OFAT, one-factor-at-a-time)^①。OFAT易于理解和实施，但缺点也很明显。使用OFAT方法时，因子之间的交互作用是未知的，非线性效应无法衡量，没有数学方程或模型能够预测响应值，并且由于实验在设计空间中的分布不均匀，效率很差。更重要的是，由于其迭代和几乎随机的模式，OFAT方法可能需要大量的实验才能运行^②。

相比之下，DOE是一种强大的数据采集和分析工具，更加有效和高效，它允许同时设置多个输入因子，确定它们对所研究响应的影响，并识别在采用OFAT方法时可能遗漏的重要交互作用。DOE经过统计学方法设计，可以采用较少的实验更好地找到用于优化响应的最佳设置，让您理解因子之间的交互作用，估计

统计模型，以因子及其组合效应的函数形式来预测响应，并且允许实验者根据研究目标确定适当的实验次数。

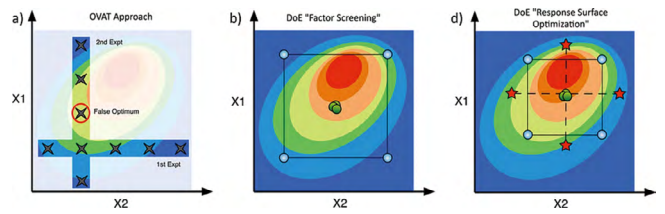


图5 OFAT/OVAT vs DOE^③

实验设计类型

传统DOE包括完全析因设计、筛选设计、响应曲面设计、混料设计等；与此对应，高级DOE则主要包括定制设计、扩充设计、确定性筛选设计、空间填充设计、非线性设计等。

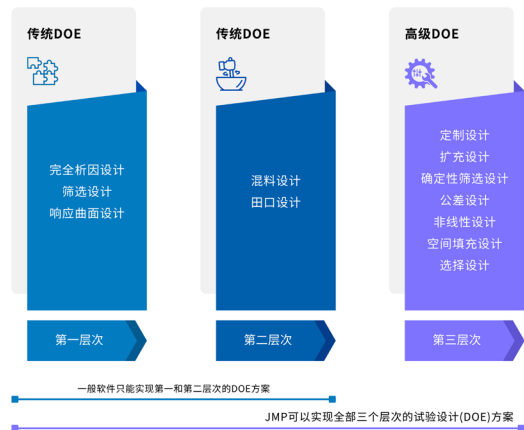


图6 实验设计类型

实验设计应用场景

无论是在工程技术、质量管理、产品研发等方面，还是在六西格玛领域，DOE都是我们解决问题的好帮手，其应用可以说涵盖了包括机械、半导体、电子、化工、汽车、烟草、医药、食品等众多行业。众所周知，各类高科技公司的产品本身及其制造工艺千差万别，小到英特尔公司生产的CPU芯片，大到乔治亚宇航中心研制的火箭系统，都离不开DOE的应用。

DOE方法能够帮助您快速地、可预测地优化产品和工艺，作出更好、更明智的决策，从而降低业务风险。您还将能够在充分了

① What Is Design of Experiments (DOE)? | ASQ

② Design of Experiments Introduction. Victor Guillier. Medium

③ “A Design of Experiments (DoE) Approach Accelerates the Optimization of Copper-Mediated 18F-Fluorination Reactions of Arylstannanes”, Gregory D. Bowden, Bernd J. Pichler and Andreas Maurer, Sci Rep 9, 11370 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-47846-6>

解产品和过程的运作方式之后,再对它们进行转移,减少投入生产后再改进或“补救”产品或过程的麻烦,让研发团队将更多的时间投入到新产品开发、研发创新和工艺开发中。





-  **新品配方开发**
确定混料配方成分比例,减少试错成本,加速新品研发与上市
-  **优化响应指标**
建立预测模型,统筹优化多个响应指标
-  **高效筛选因子**
最小化实验规模,识别关键因子,指导研发设计与质量问题解决
-  **确定工艺窗口**
探索设计空间和最佳工艺窗口,满足产品规格限要求

图 7 实验设计应用场景

实验设计实施阶段

在产品研发与工艺优化过程中,DOE的实施通常包括4个阶段。可以根据各个阶段的分析目标选取适合的实验设计方法。

- 首先,筛选阶段(浪里淘沙)。从大量因子中高效筛选,识别可以显著影响响应的重要因子。
- 第二步,描述阶段。建立因子和响应之间关系的初步模型,对研究的系统或过程进行描述。
- 第三步,优化阶段。重点优化少数关键因子,缩小设计空间范围,考虑更复杂的模型效应,对过程模型进行更为精细的刻画,实现响应优化。
- 最后,稳健阶段。研究如何稳定、高效地生产出高质量的产品,降低噪声因子的影响,减小产品质量的变异性,提高实验的稳健性。

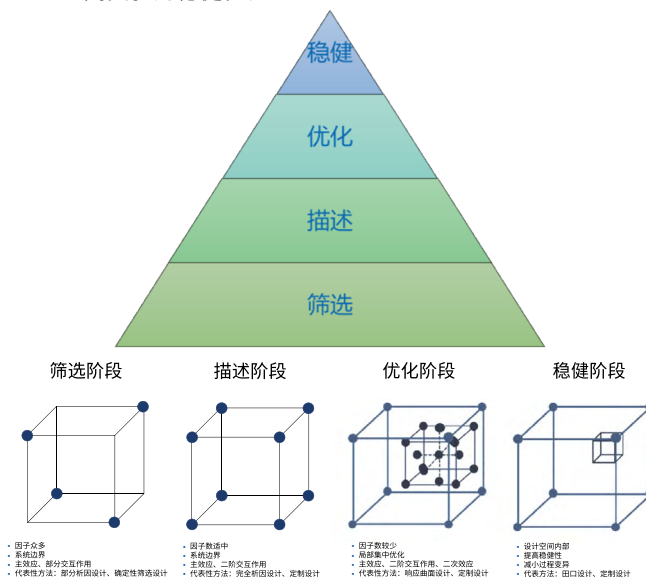


图 8 实验设计实施阶段

实验设计 workflow

尽管DOE的应用场景千变万化,但实验设计的执行步骤其实是类似的,基本上可以概括为五大步骤,即实验设计的五步曲。在每个阶段的DOE实施过程中,都可以依据DOE的工作流来生成实验方案并构建模型,可通过迭代改进,持续优化产品或工艺,并加深对过程的理解。在整个DOE流程中,工程知识和经验的重要性不言而喻,数学方法和计算机分析工具是赋能这一流程的关键。通过精确地描述、设计、采集、拟合和预测,DOE能够帮助工程师们更高效地达成实验目标,优化产品设计或生产工艺。

描述(Describe): 确定实验目标,全盘规划实验设计输入,具体包括以下方面:

- 定义问题和目标;
- 识别一个(或多个)响应变量;
- 确定测量系统是否有能力;
- 识别实验因子和因子水平;
- 识别对随机化的限制以及其他约束;
- 描述因子和响应之间关系,确定可能显著的效应项;
- 确定可以允许的试验资源和次数等。

设计(Design): 根据实验设计输入,生成实验设计方案。

采集(Collect): 根据实验方案设定因子状态,运行实验,采集响应的实验结果数据。

拟合(Fit): 拟合和诊断统计模型,定量刻画因子和响应的数学关系。

预测(Predict): 应用模型,根据因子预测响应,准确地估计实验结果。得出结论,并针对后续步骤提供建议。

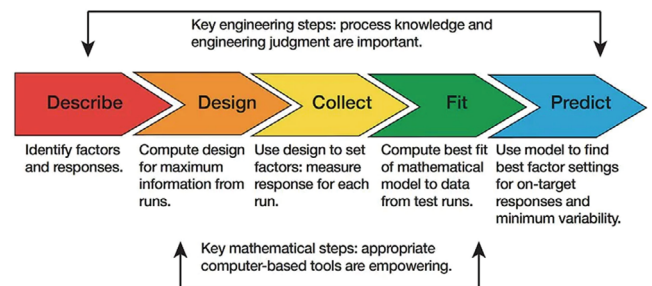


图 9 实验设计 workflow

实验设计常用术语

响应 (Response)	根据实验目的而选定的用来衡量实验效果的特征值或指标
因子 (Factor)	影响响应变量的变量
水平 (Level)	因子的两个或多个不同的取值
代码化 (Coding)	将因子所取的低、中、高水平分别编码为-1, 0+1来简化水平的标志
处理 (Treatment)	各因子选定了各自水平后的组合, 也代表一种安排
运行 (Run)	一次实验
主效应 (Main Effect)	某因子各水平间, 对应响应的平均差别
交互效应 (Interaction)	如果因子A的效应依赖于因子B所处的水平, 则称A与B之间有交互效应
随机误差 (Random Error)	偶然误差或系统固有误差, 大小和方向都不固定

图 10 实验设计常用术语

实验设计三大原则

完全重复 Replication (≠ 重复取样 Repetition)	产生随机误差, 从而推动统计推断, 而用同单元重复取样所得差异来估计随机误差易造成低估
随机化 Randomization	以完全随机的方式安排各次实验的顺序或所用的实验单元 虽然不能减少实验误差本身, 目的是防止一些实验者未知的但可能会对响应变量产生某种系统性影响的因素
区组化 Blocking	一组同质齐性的实验单元称为一个区组, 将全部实验单元划分为若干区组的方法称为区组化 通过在同一区组内比较处理间的差异, 从而使区组效应在各处理效应的比较中得以消除, 使整个实验的分析更加有效

图 11 实验设计三大原则

JMP精品DOE视频课程

欢迎您观看JMP精品DOE视频课程, 了解更多:

DOE入门课: 从方法到实践, 60分钟轻松掌握DOE

https://www.jmp.com/zh_cn/events/ondemand/local/jmp-doe-from-zero-on-demand.html

DOE经典案例实战: 产品研发与工艺优化的3种实验设计方法

https://www.jmp.com/zh_cn/events/ondemand/local/doe-industry-cases-study.html



DOE入门课



DOE经典案例实战



案例1:应用响应曲面设计优化PCB设计仿真实验参数

案例背景

高速数字PCB设计的元器件参数、元器件布局等因素,都会影响信号完整性(Signal Integrity)。通常通过仿真实验获取数字信号的眼图评估数字信号的质量。而仿真实验参数众多,仿真计算时间长,通过穷举仿真参数,来预测量产系统的信号完整性是十分低效的,也是不现实的。应用实验设计确定眼图仿真实验参数,可显著降低实验次数,并可通过建立代理模型加速高速数字PCB设计。

本案例基于10Gb/s差分PCB接口设计场景,目标为优化发送端端接阻抗、接收端端接阻抗、差分阻抗、线路长度和均衡系数以最大化眼图的眼高和眼宽。

Case 1: 10-Gb/s Differential PCB Interface Optimization with RSM

- Response Surface equation describes the relationship between the explanatory variables (the x's) to the response (the y's). With estimates for coefficients, β , we have an equation which approximates the characteristics of the response. This can be expressed as:

$$y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_1 x_2 + \hat{\beta}_4 x_1^2 + \hat{\beta}_5 x_2^2$$

Model is defined by the form of the equation and the equation's coefficients

Factor	Minimum	Typical	Maximum
Transmitter termination, $R_{TX}(\Omega)$	40	50	60
Receiver termination, $R_{RX}(\Omega)$	40	50	60
Differential impedance, $Z_{diff}(\Omega)$	84.0	100.3	117.9
Trace length, L(m)	0.254	0.381	0.508
Equalization coefficient, EQ	-0.1	-0.2	-0.3

Response	Target	LSL	USL
Eye Height (mV)	Max	60	
Eye Width (ps)	Max	70	

DOE/RSM Flow: Define Analysis Goals, Create DOE, Model Fit, Verify Predictions.

- Hall, S. & Heck H. (2009). Advanced Signal Integrity for High-Speed Digital Designs.
- Allred, Richard & Katz, B. & Hosagrahar, I. & Xu, C. & Gillmor, Wiley. (2014). How design of experiments saved my CEI VSR 28G design.

图 12 案例背景

④ 关于本章节的3个实战案例,可通过《DOE经典案例实战:产品研发与工艺优化的3种实验设计方法》公开视频课程了解详细实现过程。

创建实验方案

JMP菜单栏-实验设计-经典-响应曲面设计, 根据实验背景输入下图中的内容, 创建响应曲面设计, 采用中心复合表面设计(CCF), 添加2个中心点, 生成28次的实验设计方案。



图 13 响应曲面设计

通过散点图矩阵查看设计空间布点情况。

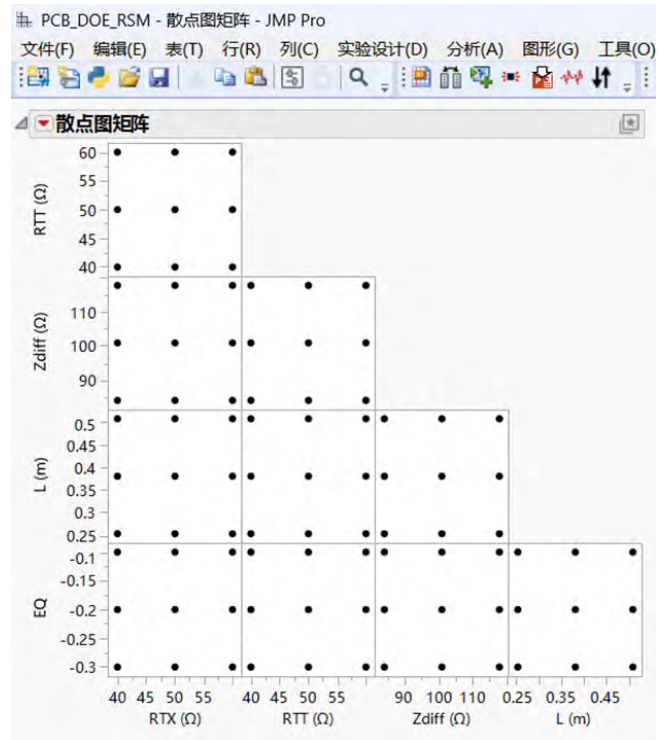


图 15 实验点分布

采集实验数据

根据实验方案设置实验参数, 采集28次眼图仿真实验的眼高和眼宽数据。

模式	RTX (Ω)	RTT (Ω)	Zdiff (Ω)	L (m)	EQ	Eye Height (mV)	Eye Width (ps)
00000	60	60	117.9	0.508	-0.3	21.64	45
1 +++++	60	60	117.9	0.254	-0.1	106.52	86
2 +----	40	60	84	0.254	-0.1	68.65	88
3 -+++	40	60	100.95	0.381	-0.1	82.02	85
4 000A0	50	50	100.95	0.508	-0.1	72.24	83
5 -++++	40	60	117.9	0.508	-0.1	72.24	83
6 -----	40	40	84	0.254	-0.3	107.62	91
7 -+---	40	60	117.9	0.254	-0.3	133.38	90
8 000A0	50	50	100.95	0.254	-0.2	127.6	92
9 -++++	40	40	84	0.508	-0.1	56.8	84
10 0A000	50	60	100.95	0.381	-0.2	95.09	90
11 0000A	50	50	100.95	0.381	-0.3	79.43	77
12 00000	50	50	100.95	0.381	-0.2	96.24	89
13 -++++	60	40	84	0.254	-0.1	76.89	88
14 -++++	60	60	84	0.508	-0.1	58.4	79
15 0A0A0	50	50	117.9	0.381	-0.2	105.96	89
16 -+---	40	40	117.9	0.254	-0.1	93.97	87
17 00000	50	50	100.95	0.381	-0.2	96.24	89
18 -+---	40	40	117.9	0.508	-0.3	30.93	52
19 -+---	40	60	84	0.508	-0.3	32.63	62
20 +----	60	40	117.9	0.254	-0.3	148.4	89
21 A0000	40	50	100.95	0.381	-0.2	90.41	89
22 0A0A0	50	50	84	0.381	-0.2	83.83	90
23 A0000	60	50	100.95	0.381	-0.2	100.64	89
24 +----	60	40	117.9	0.508	-0.1	79.85	84
25 000A0	50	50	100.95	0.508	-0.2	57.13	78
26 +----	60	40	84	0.508	-0.3	17.43	40
27 0A000	50	40	100.95	0.381	-0.2	93.19	89
28 +----	60	60	84	0.254	-0.3	118.7	91

图 14 采集实验数据

建立回归模型

JMP菜单栏-分析-拟合模型, 将眼高和眼宽作为Y, 采用默认的响应曲面设计的模型效应。采用默认的标准最小二乘法建立回归模型, 因为具有眼高和眼宽两个响应变量, 建议勾选分别拟合。

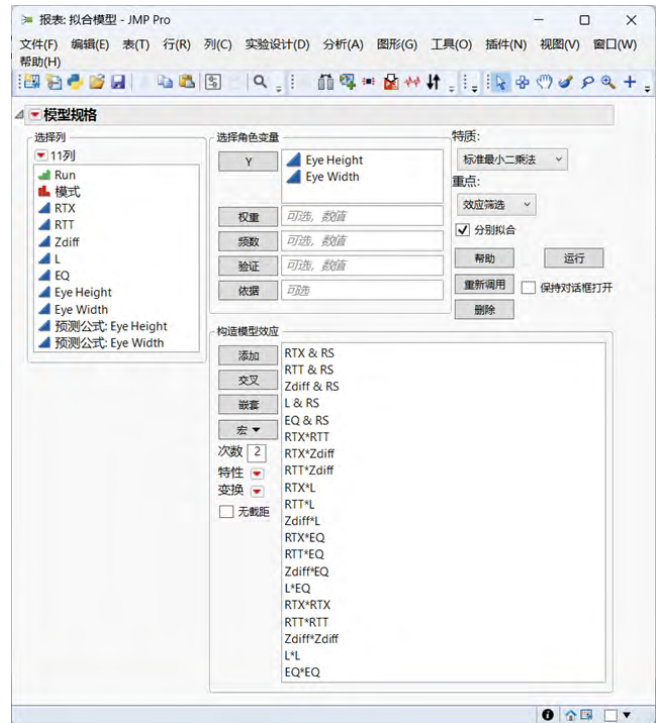


图 16 拟合模型

对初始模型分别进行变量删减。大多数情况下,以 p 值= 0.05 为界,一般认为 p 值大于0.05的效应项是统计不显著的,因此依次删去 p 值大于0.05的效应项,注意层级原则 (Hierarchy Principle, 一般不建议在删除高阶交互项之前,删去所含的主效应)。

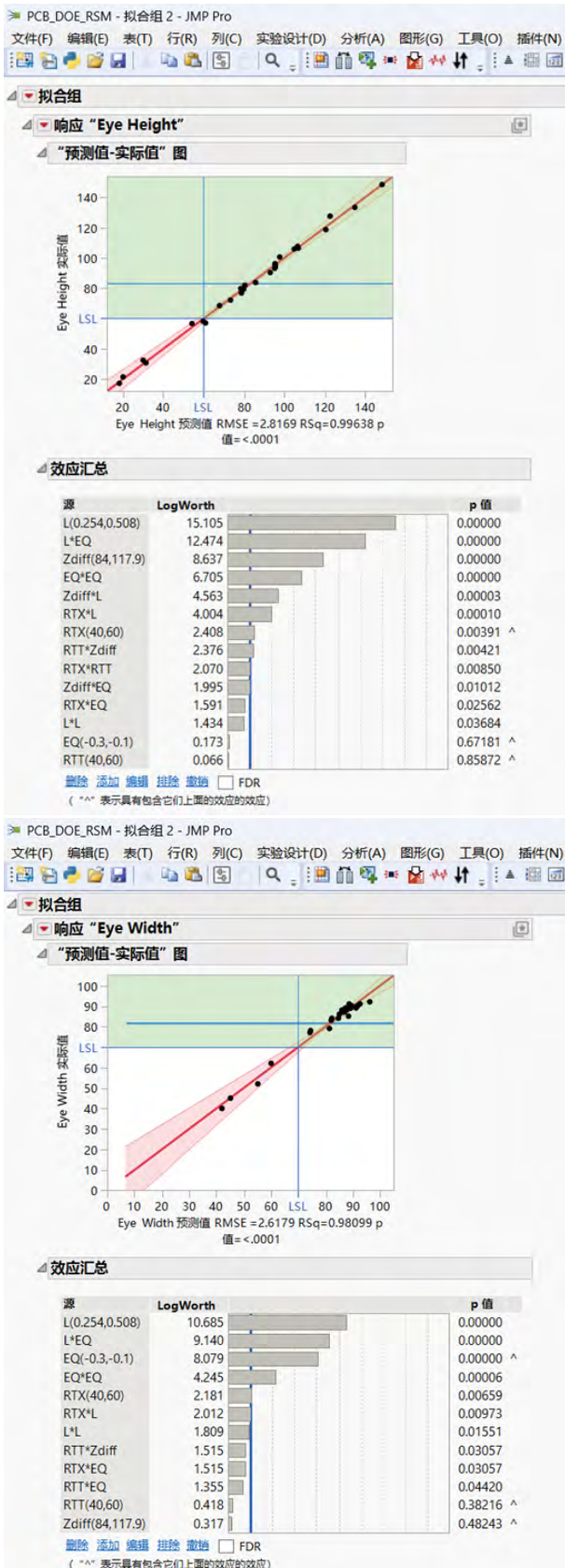


图 17 效应汇总

对简化后的模型,可以从R方、调整R方、均方根误差、方差分析报表F检验结果、失拟报表F检验结果、残差图等多个维度判断模型的好坏。如下图所示,对于眼高和眼宽,R方和调整R方都比较高(>0.9),方差分析显著(p 值<0.05),残差随机分布满足正态性,因此可进行下一步分析。

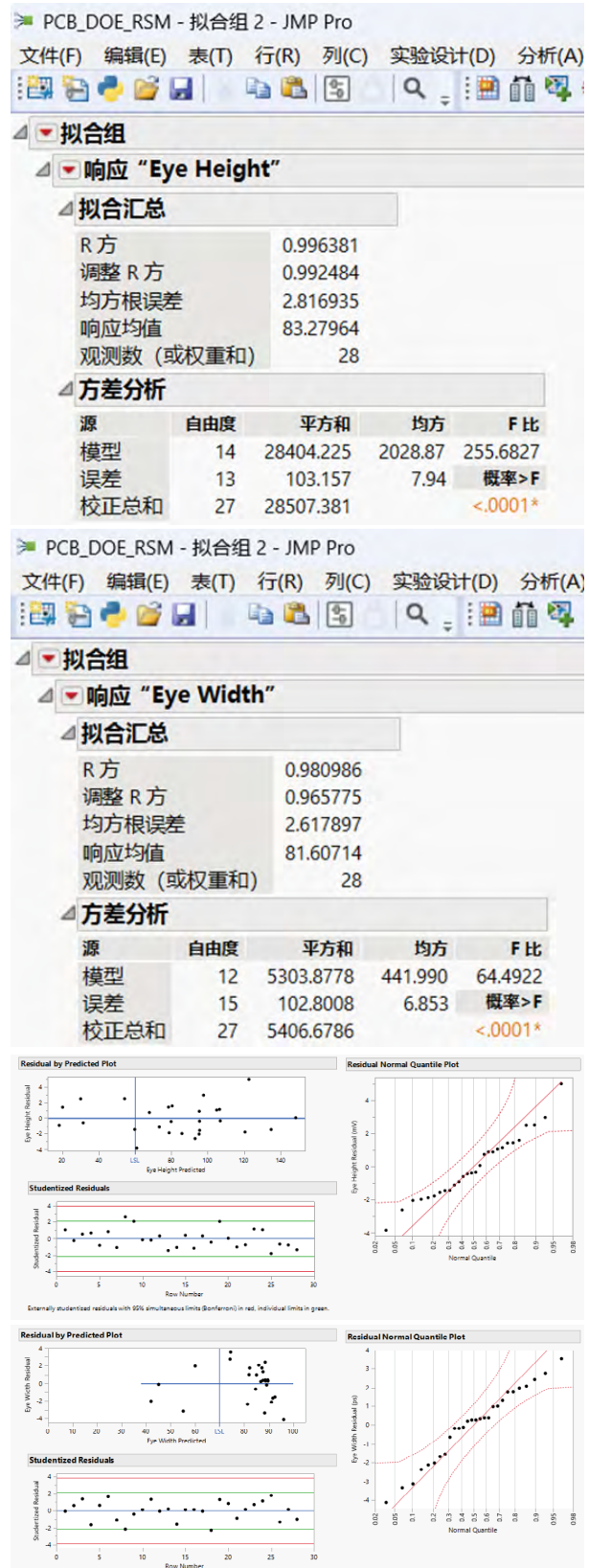


图 18 模型评估

应用回归模型

响应预测与多响应同步优化

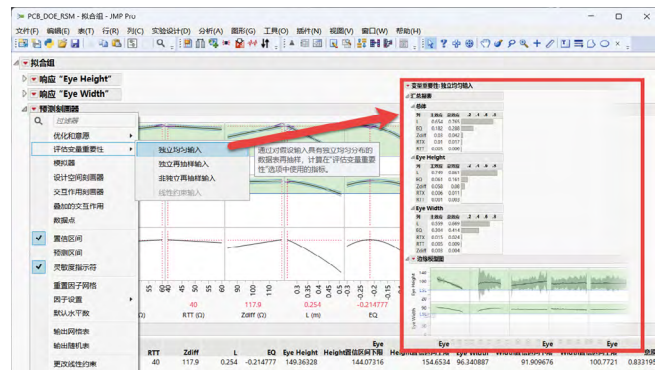
建立有效的回归模型后,即可通过模型公式对响应进行预测,同时通过预测刻画器确定最佳工艺参数组合。

当研究中有多个响应存在时,一般很难找到一个参数组合的取值,让多个响应的结果均达到最优。如本例,眼高和眼宽分别取最大值时,参数组合的取值会有一些的差异。这时我们可以利用JMP软件的最大化意愿功能,自动找到一个参数组合,使得多个响应尽可能同时接近要求的目标值,此外还可以通过为多个响应变量设定不同权重,实现定向的优化策略。

调出JMP刻画器(拟合组红三角-刻画器),寻找平衡最优解(预测刻画器红三角-优化和意愿-意愿函数、设置意愿、最大化意愿),自动得到如下图所示的最优参数组合(RTX=60, RTT=40, Zdiff=117.9, L=0.254, EQ=-0.215)下,各个响应都可以尽可能地满足或超出预先设定目标。

识别重要因子

如下图所示,可以通过预测刻画器评估变量重要性,识别出重要因子,以对其进行重点调控。



定义设计空间

在产品实际生产过程中,某些工艺参数往往存在小范围的波动,为了满足规格限要求,需要定义可行的设计空间。

JMP一般有三种方式定义设计空间,第一种是通过等高线图,第二种是利用蒙特卡洛模拟,第三种是通过设计空间刻画器。等高线图由于是二维图表,因此对于研究2个参数的场景比较有效,目前用的越来越少。而蒙特卡洛模拟的应用范围更为广泛,可以针对2个和多个参数的场景。设计空间刻画器是JMP 17版本推出的新功能,可以结合蒙特卡洛模拟自动缩小设计空间范围,通过不断点击内移按钮,软件自动寻找能使缺陷比例最大程度减少的参数及收缩范围,从而快速的确定符合要求的参数空间,同时评估当前参数组合的预测响应满足规格限要求的情况。需要注意的是参数比较多的模型,往往最优的参数空间不止一个,所以可尝试多执行几次选择最优。

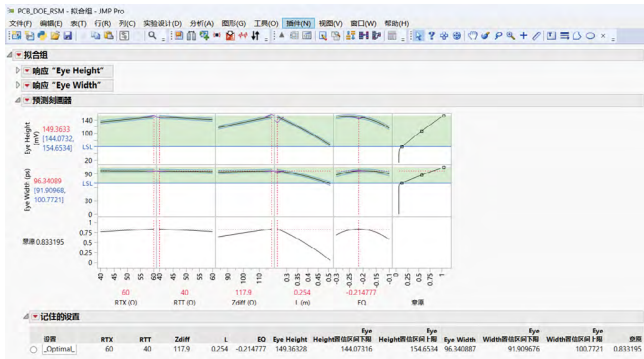


图 19 多个响应的最优参数组合确认

通过分别保存眼高和眼宽回归模型的预测公式,并通过预测刻画器将最优参数组合设置追加至表(预测刻画器红三角-因子设置-将设置追加至表),可以得到最优参数组合情况下的眼高和眼宽预测值,并可通过散点图可视化实现与实验数据点的比较,对当前参数组合设置的可行性进行判断。

方法一:选用蒙特卡洛模拟的方法,先将参数设定在最大化意愿组合点(红三角-优化和意愿-最大化意愿),然后调出模拟器(预测刻画器红三角-模拟器),将每个参数的输入都设为随机,分布类型选择正态分布或均匀分布。以分布类型设置为均匀分布为例,在输入规格限之后(模拟器红三角-规格限),单击模拟,通过缺陷率报表判断当前参数组合的可行性,并可手动调节模拟器参数上下限,确定可行的工艺窗口。

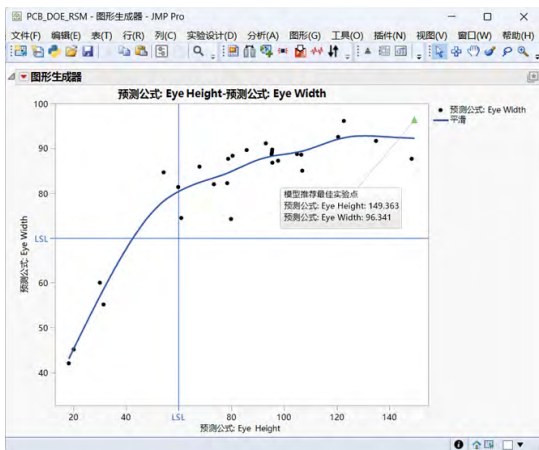


图 20 最优参数组合响应预测

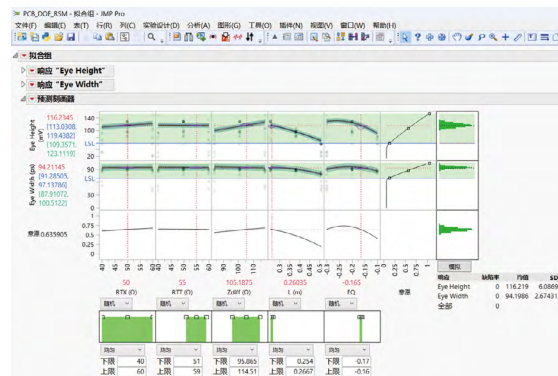


图 21 定义设计空间

方法二：调出设计空间刻画器(预测刻画器红三角-设计空间刻画器)，生成并连接随机表，嵌入因子和响应空间散点图。通过在设计空间刻画器不断内移，可以实现设计空间范围的缩小，并可同步观察到规格中对应部分比例的提升。缩小到合适的因子范围后，可以结合预测刻画器和模拟器再次确认当前参数的可行性。

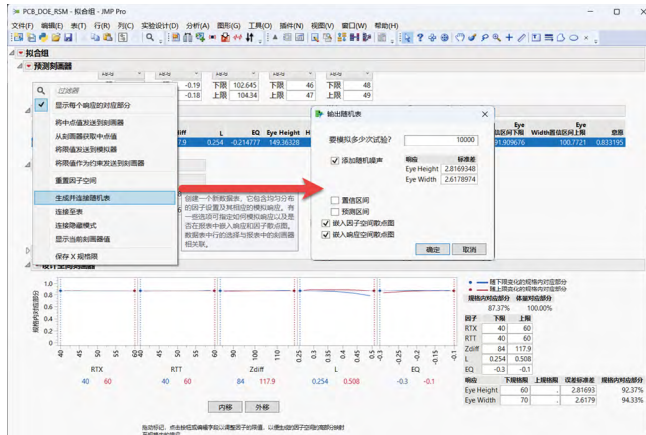


图 22 生成并连接随机表

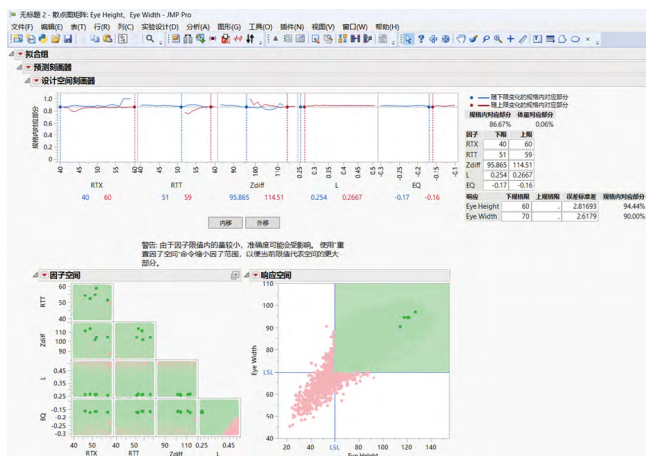


图 23 设计空间刻画

在确定设计空间时，上述提到的手动和自动方式都可使用，最终的参数范围也可能不同。但手动的方式的一个优势是可以通过人为评估参数调节的难易程度，来引导设计空间的确定，所以建议比较后择优选用。

小结

本例通过应用响应曲面设计生成了28次的实验方案，基于仿真结果建立了代理模型，识别出了关键影响因子，确定了最优的实验参数范围，同时优化了眼高和眼宽。借助JMP软件实验设计平台可以轻松生成实验设计方案，高效建立回归模型，并通过预测刻画器、模拟器、设计空间刻画器进行模型应用，实现响应预测和多响应同步优化、识别重要因子和定义设计空间。



通过散点图矩阵可以直观观察到设计空间的布点情况。对于混料设计，可以通过三元图观察混料因子的成分比例。

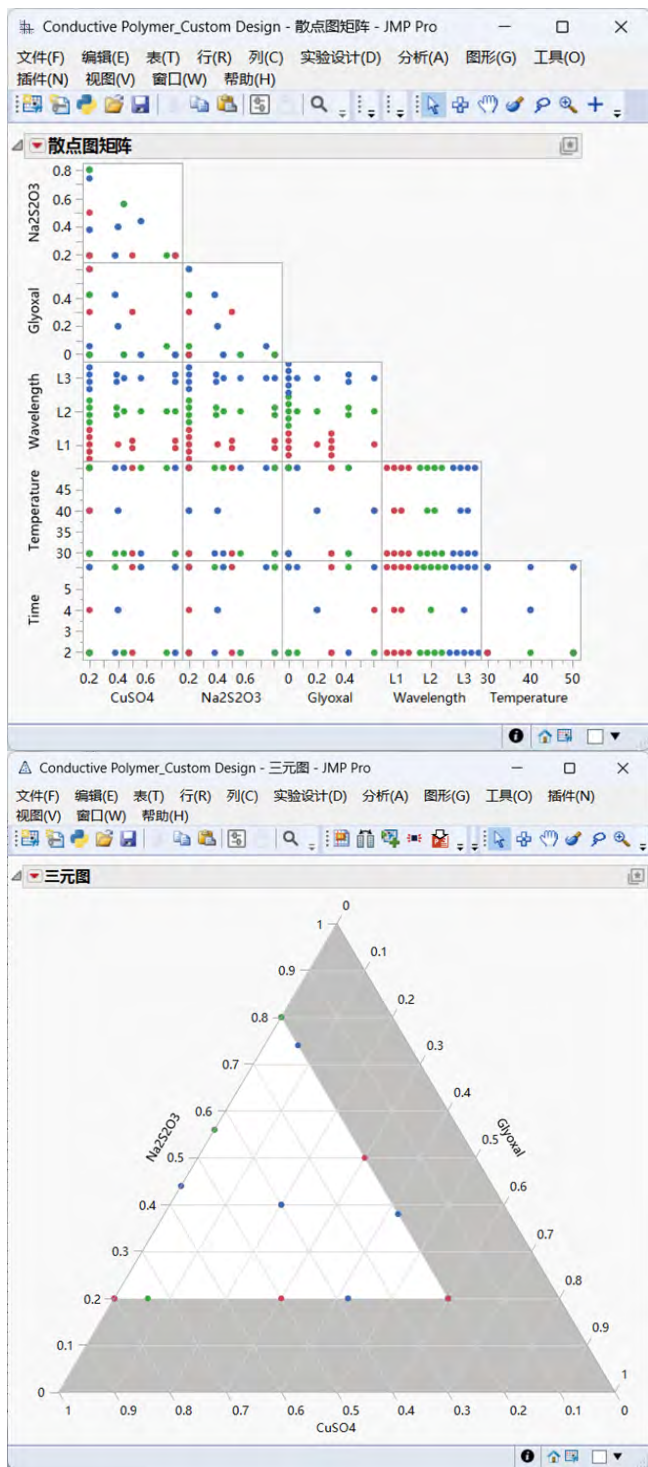


图 27 实验点分布

建立回归模型

通过标准最小二乘法建立阻尼的回归模型，并根据p值是否大于0.05对模型效应项进行删减，得到简化后的模型。

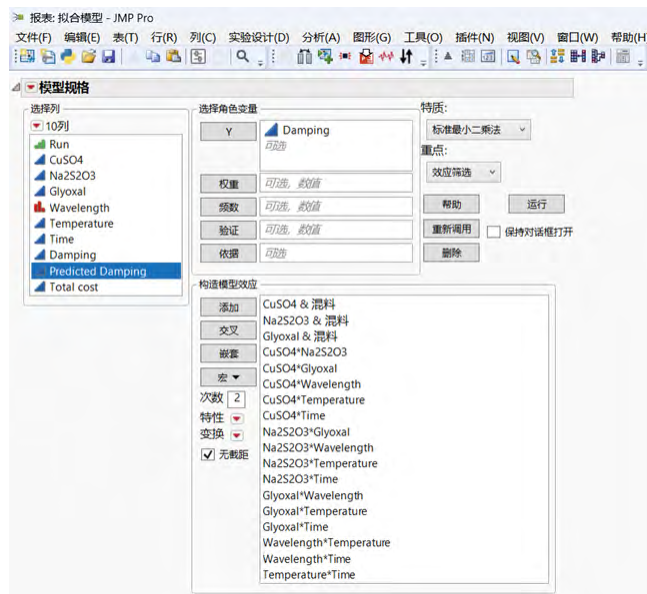


图 28 拟合模型

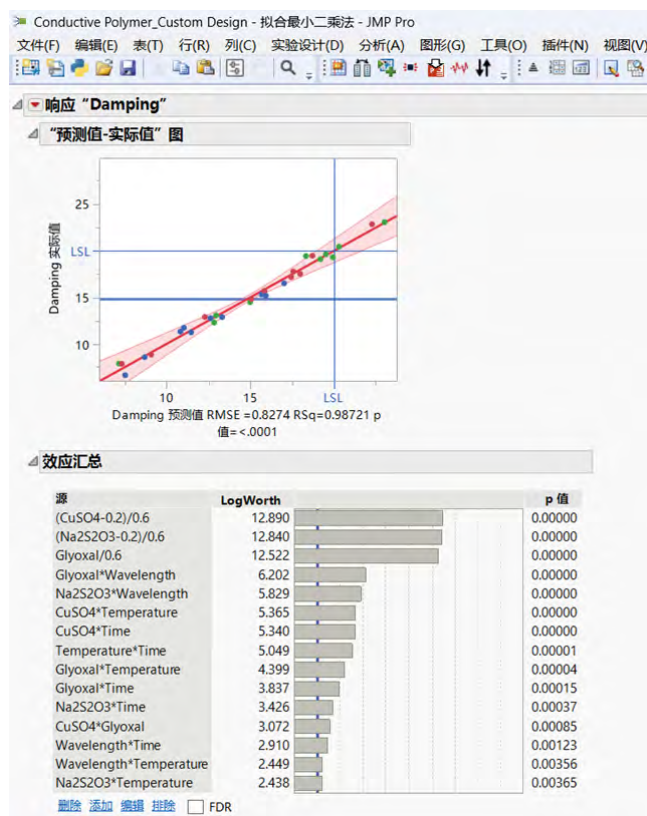


图 29 效应汇总

通过R方、调整R方、均方根误差、方差分析报表F检验结果、失拟报表F检验结果、残差图等多个维度判断模型的好坏。如下图所示,对于阻尼, R方和调整R方都比较高 (>0.9), 方差分析显著 ($p < 0.05$), 残差随机分布满足正态性, 因此可进行下一步分析。

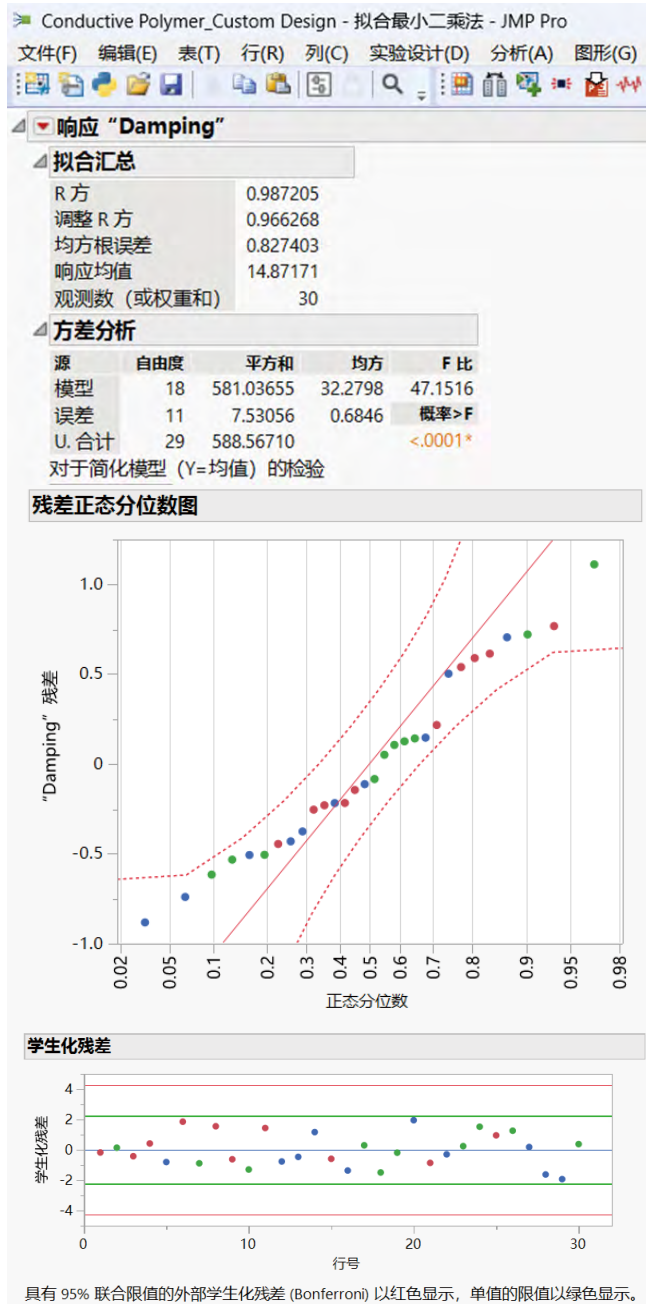


图 30 模型评估

应用回归模型

响应预测与多响应同步优化

通过保存阻尼预测公式, 并结合总成本的计算公式, 可以形成组合刻画器 (图形-刻画器-添加公式列), 以此寻找阻尼和总成本的平衡最优解 (预测刻画器红三角-优化和意愿-意愿函数、设置意愿、最大化意愿)。自动得到如下图所示的最优参数组合, 各个响应都可以尽可能地满足或超出预先设定目标。

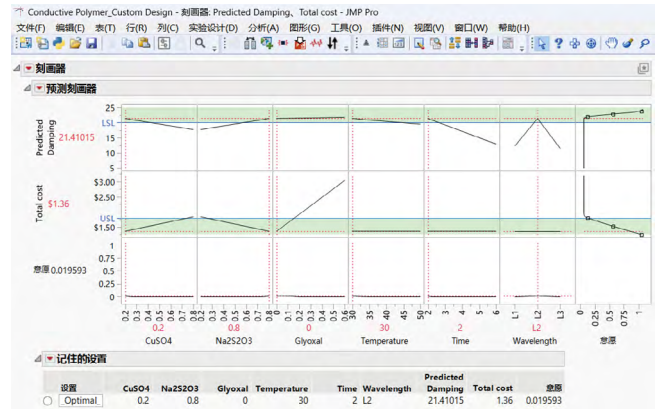


图 31 多个响应的最优参数组合确认

通过预测刻画器将最优参数组合设置追加至表 (预测刻画器红三角-因子设置-将设置追加至表), 可以得到最优参数组合情况下的阻尼预测值和总成本计算值, 并可通过散点图可视化实现与实验数据点的比较, 对当前参数组合设置的可行性进行判断。当前推荐参数组合的响应预测值可以同时满足两者的规格限要求, 优于之前的实验数据点。

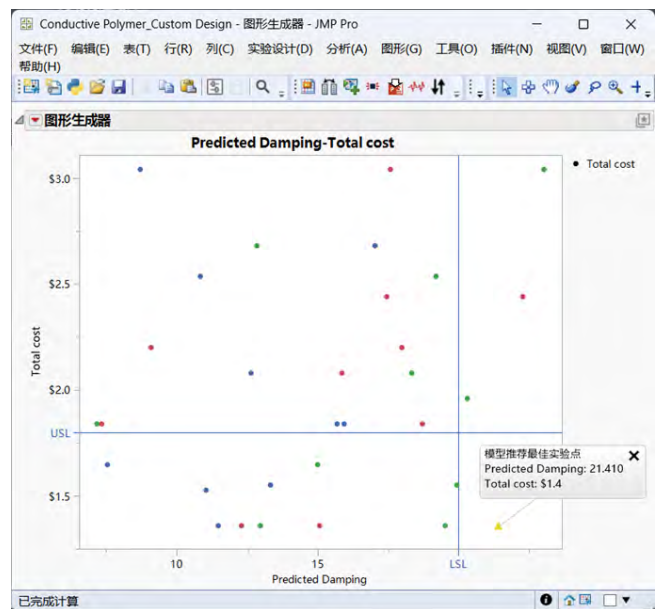


图 32 最优参数组合响应预测

定义设计空间

结合预测刻画器、模拟器和混料刻画器，可以直观地探索最佳参数范围，通过关联刻画器和传播因子设置，可以保持预测刻画器和混料刻画器的因子设置联动，从而更高效地确定混料因子最佳成分比例。混料刻画器的白色区域可以清晰直观地辅助确定设计空间。

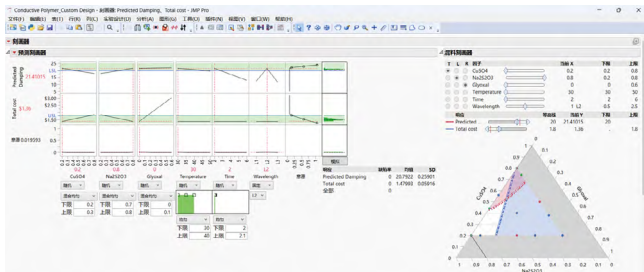


图 33 定义设计空间

小结

目前化工行业研究的场景越来越复杂，基于传统的实验设计方式来进行工艺开发和优化，往往是非常低效的，并且传统的混料设计也无法应对存在过程因子的情况。借助JMP独有的定制设计方法，可以应对更为复杂和有挑战性的实验设计场景，并有效地利用少量实验达成研究目标，从而大大缩短研发时间。本案例应用定制设计生成了30次的实验方案，通过拟合模型确定了最佳配方成分比例和过程变量参数设置，同时优化了阻尼和成本，显著加速了导电薄膜材料研发与量产。



案例3:结合空间填充设计与机器学习优化食品配方与工艺

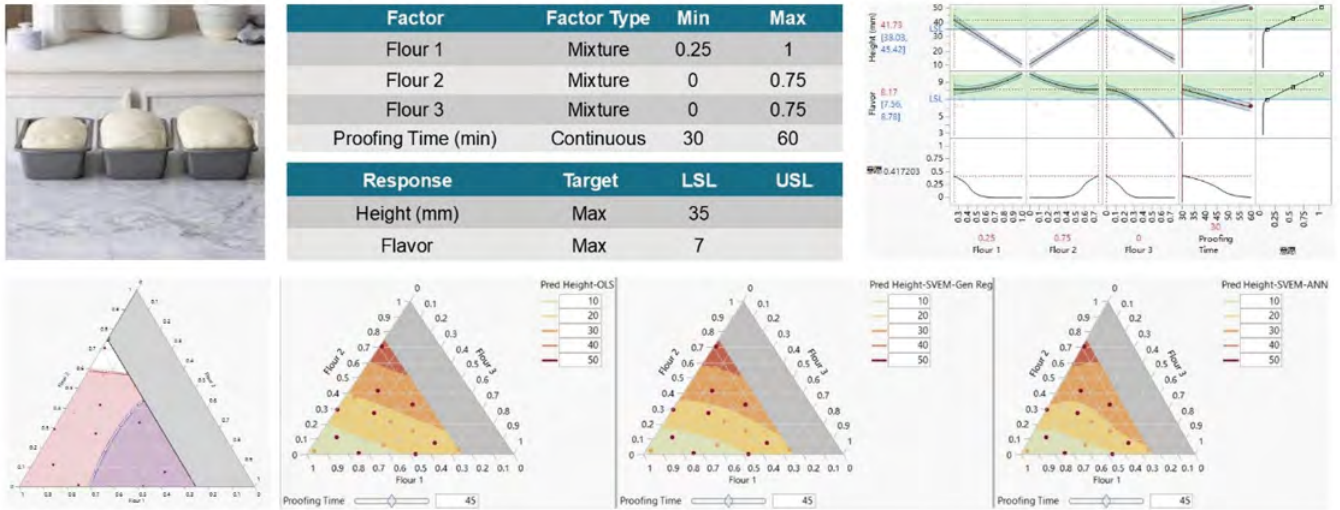
案例背景

在食品研究领域，食品的风味、口感、外观是非常重要的评价指标，同时也要考虑加工难易程度、成本等一系列的因素，以满足消费者口味需求，并实现高效品控。

本案例基于食品行业面包配方研发和工艺优化场景，目标为优化3种面粉混料成分的比例和面团醒发时间，实现面包高度最大化和口感评分最大化。

Case 3: Combining Space Filling Design with Machine Learning to Optimize Food Formulation

Bread Experiment: Identify mixture proportions and process settings that will make bread that is "tall" and tasty



- [Designing Mixture Experiments - Part 2 - JMP User Community](#)
- [Accelerating Innovation with Space Filling Mixture Designs, Neural Networks and SVEM](#)
- [Snee, Ronald, and Roger Hoerl. 2016. Strategies for Formulations Development: A Step-by-Step Guide Using JMP. Cary, NC: SAS Institute Inc.](#)

图 34 案例背景

创建实验方案

在模型未知的情况下，本案例创新性地应用快速灵活填充设计这种现代实验设计方法，生成了18次的空间填充实验设计方案。在实验设计时，无需提前考虑模型效应项。



图 35 空间填充设计

采集实验数据

根据实验设计方案运行实验，采集面包高度和口感评分数据。

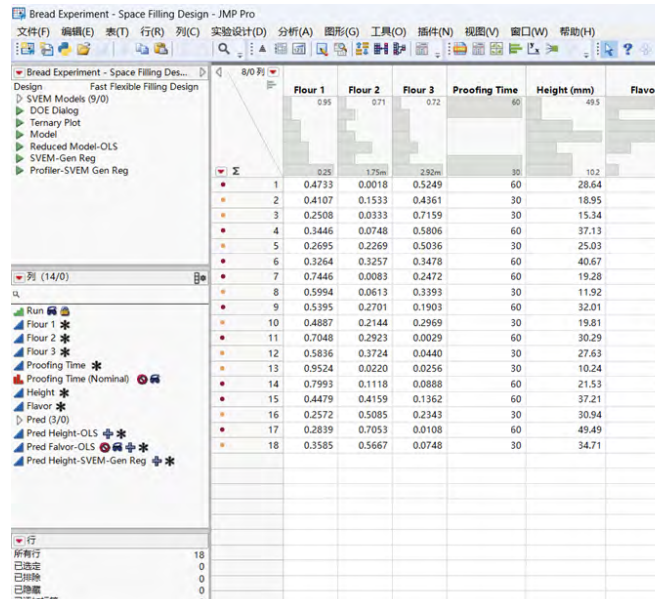


图 36 采集实验数据

通过三元图观察3种面粉的混料成分比例，可以看到空间填充设计的实验点更均匀地分布在设计空间内部。

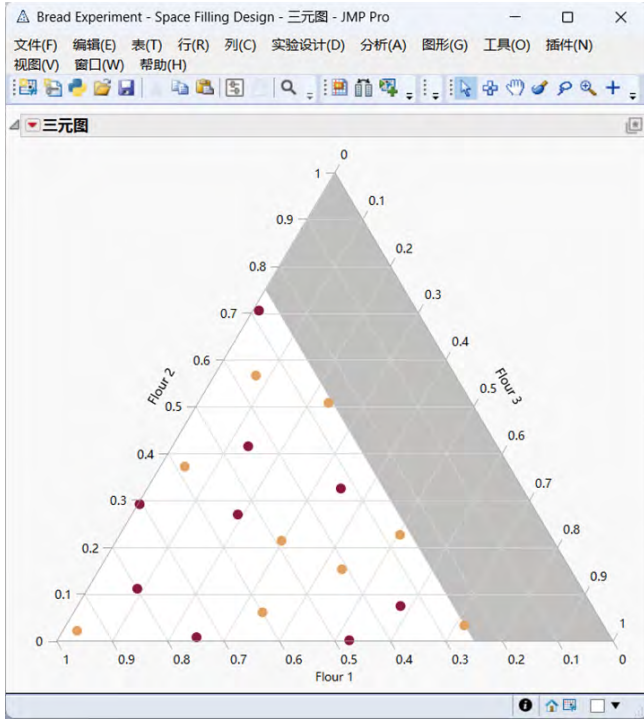


图 37 实验点分布

标准最小二乘建模

采用标准最小二乘法建立回归模型，建立了配方成分比例、醒发时间与面包高度、评分之间的预测公式，并通过了模型诊断，采用预测刻画器实现了响应预测与多响应同步优化，并通过混料刻画器确定了设计空间。

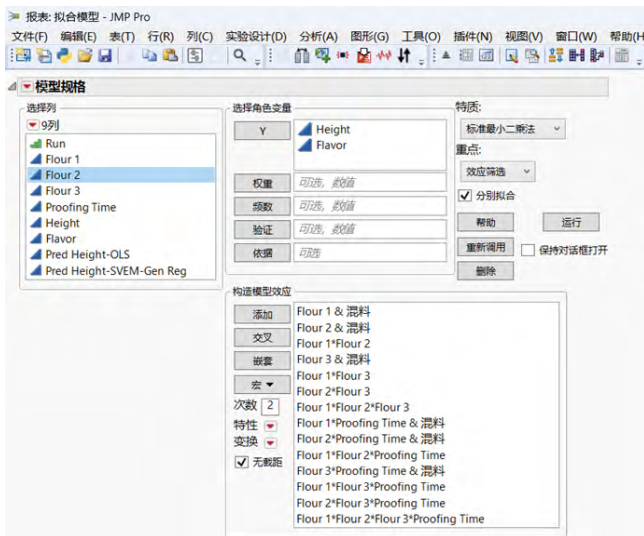


图 38 拟合模型

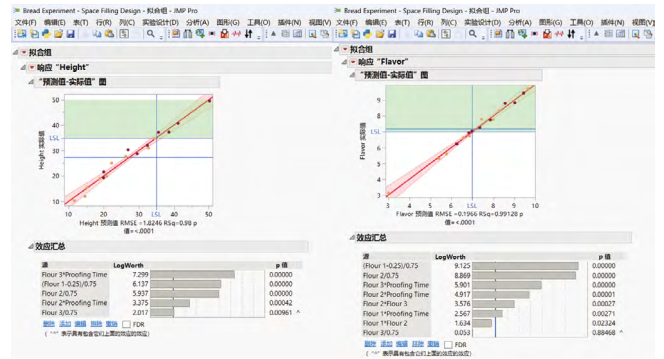


图 39 效应汇总

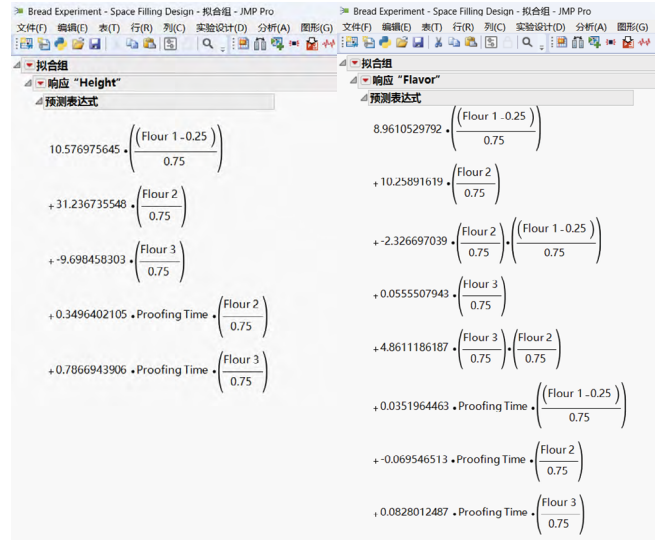


图 40 模型预测表达式



图 41 模型评估

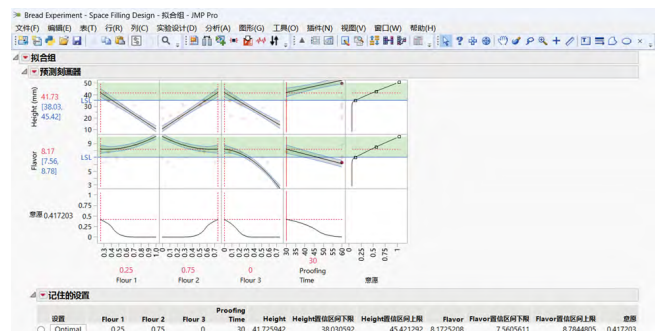


图 42 多个响应的最优参数组合确认

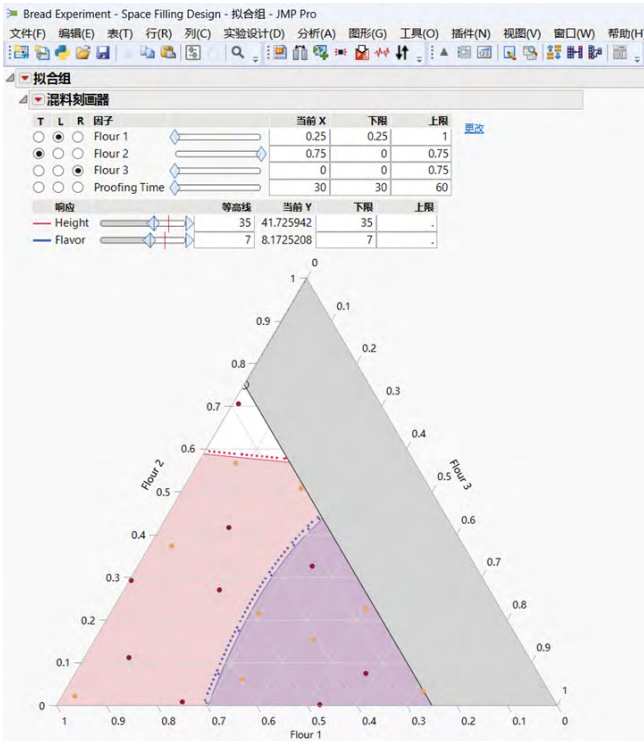


图 43 定义设计空间

SVEM机器学习建模

由于模型未知，本案例进一步采用机器学习方法建立模型，以对比标准最小二乘、SVEM广义回归和SVEM神经网络的建模结果。对于实验设计产生的小样本数据集，采用SVEM(自验证集合模型)无需划分数据集，而是对不同实验数据点赋予不同的训练和验证权重，从而充分利用实验设计数据。通过建立集成模型，可以提高模型预测精度和稳健性。

SVEM广义回归模型

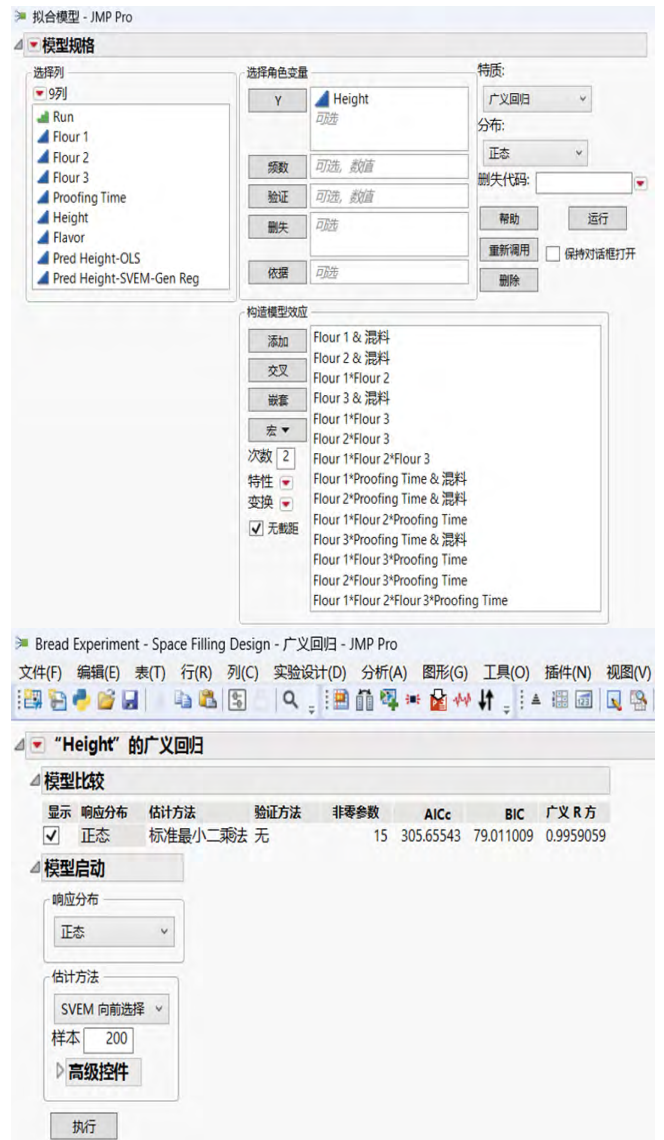


图 44 拟合SVEM广义回归模型

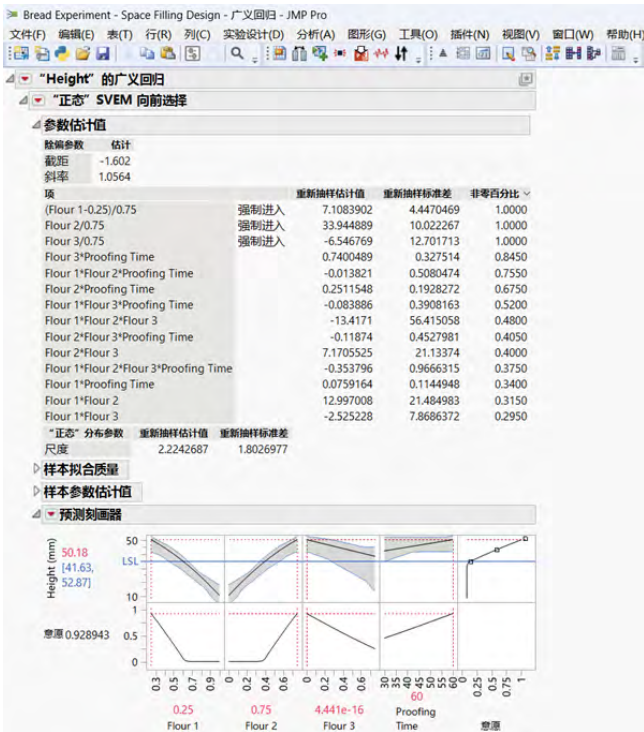


图 45 SVEM 广义回归模型

SVEM 神经网络模型

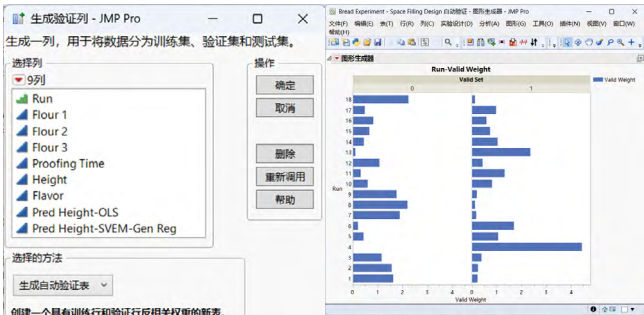


图 46 生成自动验证表

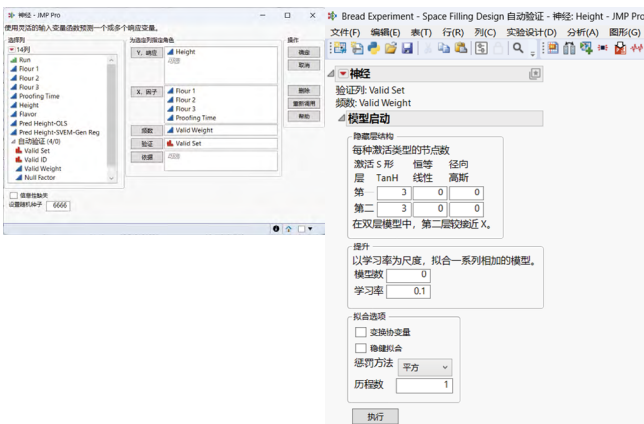


图 47 拟合 SVEM 神经网络模型

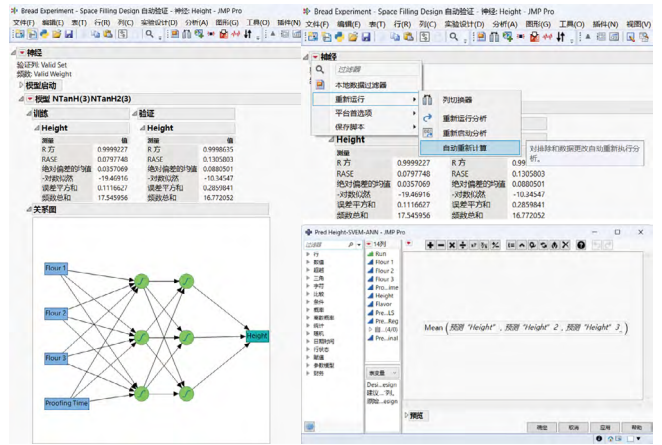


图 48 多个 SVEM 神经网络模型集成

模型比较

保存标准最小二乘、SVEM 广义回归、SVEM 神经网络模型的预测公式，并应用模型比较，可以发现本案例中，SVEM 神经网络模型的拟合效果更优。



图 49 模型比较

组合三种不同建模方法的预测公式形成刻画器，可以发现相比于标准最小二乘模型，SVEM 广义回归模型和 SVEM 神经网络模型可以捕捉到更多非线性关系，进一步反映了机器学习建模方法结合空间填充设计的实验数据，可以更精细地刻画因子和响应之间的复杂尤其是非线性的关系，从而实现更高精度的预测。

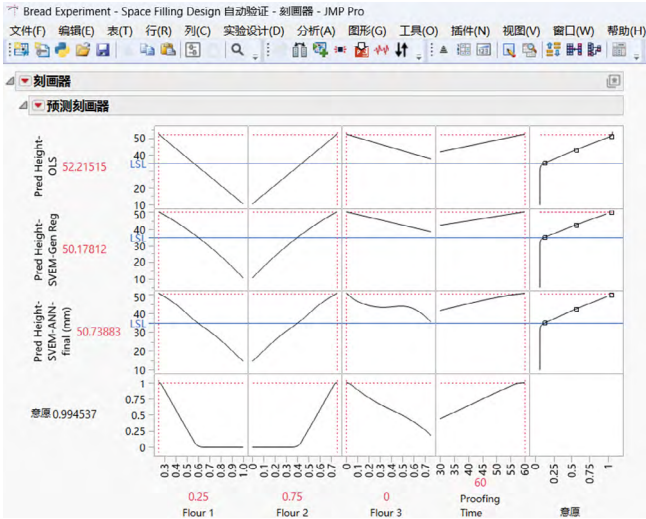


图 50 预测刻画器比较

通过三元图结合三种模型的预测公式,可以更直观地观察到,SVEM神经网络模型能够描述因子和响应之间的复杂非线性关系。

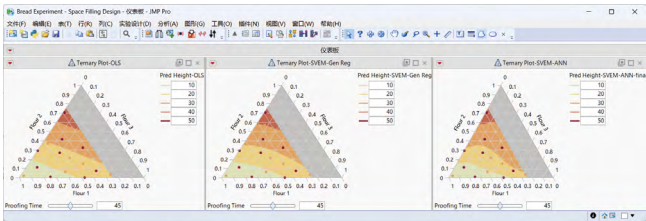


图 51 模型预测公式比较

小结

本案例应用空间填充设计生成了18次的实验方案,分别应用标准最小二乘模型、SVEM广义回归模型和SVEM神经网络模型,建立了配方成分比例、醒发时间与面包高度、评分之间的预测公式。在模型未知的情况下,创新性应用快速灵活填充设计这种现代实验设计方法,并基于小样本数据集进行训练并验证了模型的准确性,为实验设计应用打开了新思路。综合对比,对于本案例中采用空间填充设计获得的实验数据,结合SVEM神经网络建模方法更优,同时其模型的复杂性提高,可解释性降低。但在模型未知的情况下,空间填充设计结合机器学习方法不失为一种创新性的实用解决方案。

JMP的空间填充设计平台可以支持更为复杂的实验设计,无需模型效应项的先验知识即可生成实验方案,尤其适合计算机仿真实验、早期实验探索和复杂非线性关系建模研究,结合JMP预测建模平台的众多机器学习方法,可以建立高精度的预测模型,实现响应预测和优化。





实验设计方法选择

实验设计方法是科学研究、产品开发、工艺优化等领域中不可或缺的一部分，其核心在于通过系统地安排实验条件，以最小的成本、最短的时间获取最准确、最有价值的数据和信息。在选择实验设计方法时，需要考虑多个因素，如实验目的、实验规模、约束限制等。选择适当的实验设计方法对于确保实验的成功、提高数据准确性、优化资源利用、提升决策质量、促进知识创新以及降低风险等方面都具有重要意义。因此，在进行实验设计时，应综合考虑各种因素，选择最适合的实验设计方法。

实验设计方法选择的考量点
实验目的：准确预测、因子筛选、设计空间优化
实验类型：传统实验或计算机模拟实验，是否存在随机误差
先验知识：基于模型或模型未知，模型复杂度
实验设计阶段：筛选、描述、优化、稳健
因子和响应：因子数量、设计空间维度、数据类型
实验规模：实验资源、实验次数、成本、时间
约束限制：设计空间约束
采样方式：一次采样方法或自适应采样方法
设计诊断：评估设计、比较设计

图 52 实验设计方法选择

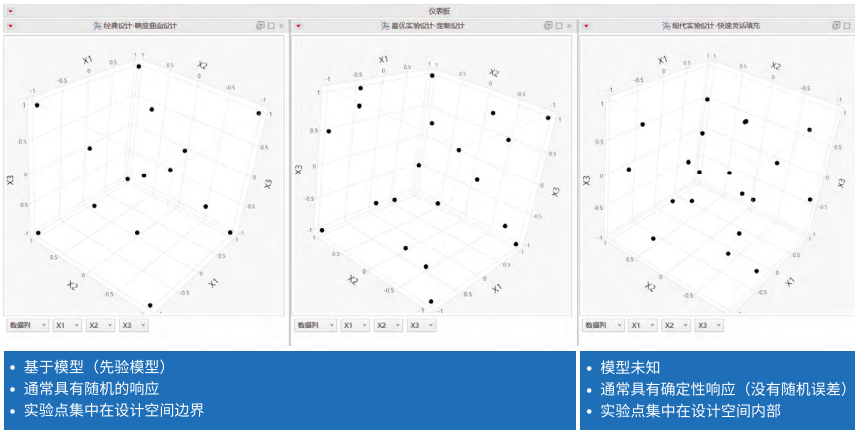
经典 vs 最优 vs 现代

根据实验设计的发展历程和设计思路，实验设计可以分为经典实验设计、最优实验设计和现代实验设计三类方法。对于案例实战章节的三个案例，响应曲面设计属于经典实验设计，定制设计属于最优实验设计，空间填充设计属于现代实验设计。三类实验设计方法的对比总结如下。

经典实验设计

最优实验设计

现代实验设计



- 基于模型 (先验模型)
- 通常具有随机的响应
- 实验点集中在设计空间边界

- 模型未知
- 通常具有确定性响应 (没有随机误差)
- 实验点集中在设计空间内部



经典实验设计	最优实验设计 (定制设计)	现代实验设计
广泛应用于传统真实实验领域	相比于经典实验设计, 定制设计更适合于现实中较为复杂和具有挑战性实验设计方案的制定	广泛应用于计算机仿真模拟实验, 响应通常没有随机性
完全析因设计/部分析因设计/响应曲面设计/混料设计/田口设计	支持多种因子类型 (如连续、离散、分类、混料、协变量、区组等)	涉及更多的系统误差, 而不是传统真实实验中遇到的随机误差
多应用于低阶多项式建模, 具有连续 (定量) 和分类 (定性) 因子, 响应通常是随机的	考虑工程经验和先验知识, 更灵活地评估指定的效应项, 探索有约束的设计空间	在设计空间内部进行采样, 可以减少近似模型中的偏差
旨在最大限度地减少传统实验中未知和 (或) 不受控变量引起的随机误差的影响, 实验点多倾向于分布在设计空间边界及其附近	支持多种最优性准则 <ul style="list-style-type: none"> • I最优: 平均相对预测方差最小 • D最优: 因子效应估计方差最小 • A最优: 回归系数方差和最小 • G最优: 最大预测方差最小 • 别名最优: 将假设模型中的效应与该模型中不存在但可能活跃的效应之间的别名关系最小化 	拉丁超立方体设计 (LHD) / 均匀设计 (UD) / 空间填充设计 (SFD), 空间填充设计具有以下特点: <ul style="list-style-type: none"> • 普遍存在于计算机仿真模拟实验领域 (没有随机误差) • 实验点多分布在设计空间内部 • 适合模型未知的实验 • 适合构建高度复杂和非线性的机器学习模型 • 更适用于低维
可以进行序贯实验, 通过扩充设计支持更复杂模型的构建	根据实验资源指定实验次数	可以支持构建线性和复杂的高度非线性模型
一些经典的DOE方法, 如中心复合设计 (CCD), 并不总是有效或足以支持确定性计算机仿真模拟实验	可以进行序贯实验, 通过扩充设计支持更复杂模型的构建	支持一次采样方法和自适应采样方法

图 53 实验设计方法对比总结

基于模型 vs 模型未知

根据实验设计是否具有先验知识, 实验设计方法可以分为两种思维方式: 基于模型的与模型未知^⑤。

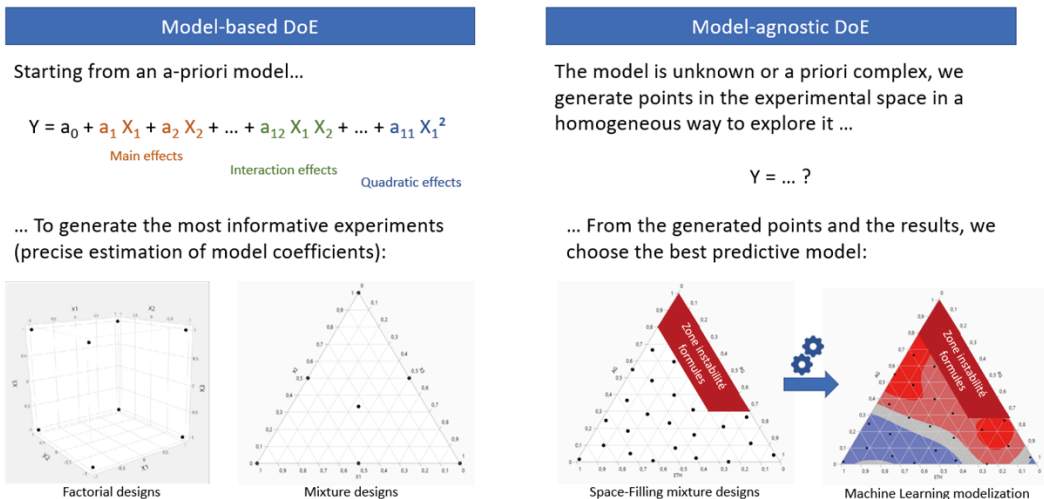


图 54 基于模型 vs 模型未知^⑥

⑤ 听说你们在玩一种很新的 DOE?

⑥ Solved: Space filling versus optimal DOE - JMP User Community

基于模型:这种类型的实验设计先验地假设一个特定的模型(具有主效应、交互作用项等),然后生成实验点以优化模型系数的估计或最小化模型预测方差。这种方法假设了一种特定的模型形式(通常是多项式模型),当底层模型是众所周知的,或者对所研究的系统有先验知识时,这种方法很有用。它可能需要更少的实验点,如果想轻松获得可解释的结果,基于模型的实验设计是理想的选择。(示例:响应Y受到因子A和B的统计显著主效应以及A和B之间统计显著的双因子交互作用的严重影响)

模型未知:这种类型的实验设计在实验空间中均匀和随机分布实验点,然后将不同的模型拟合到这些实验点上,以获得最佳的预测模型。这种方法可能需要大量的实验点,具体取决于所构建模型的复杂性(线性回归、支持向量机、随机森林、神经网络等),不假设任何特定的模型,在底层模型未知或复杂时非常有用。但是这种方法可能对噪声很敏感,使用机器学习模型可能产生过拟合的情况。(示例:实验初期探索阶段,对模型知之甚少;底层模型存在复杂非线性关系,简单多项式模型难以精准描述)

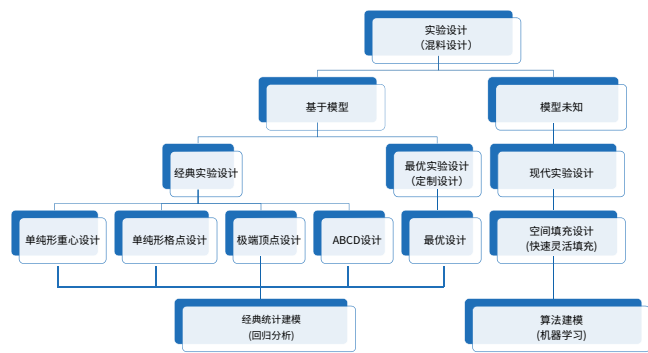


图 55 多种实验设计方法在混料设计中的体现

经典实验设计和最优实验设计会假定某种先验模型,是基于模型的实验设计。而空间填充设计没有先验模型,在设计空间内部合理均匀布点采样,是模型未知的实验设计。

基于模型与模型未知,两种实验设计方法各有所长。基于模型的实验设计可能更高效,需要更少的数据,但它们更容易受到模型设定错误(Model Misspecification)的影响,在面对复杂或未知的底层模型时可能不那么稳健。模型未知的实验设计可以更灵活、更稳健地应对模型设定错误,但它们可能需要更多的数据来实现与基于模型的实验设计相当的精度。这两种实验设计思维方式之间的评估也可能不同,基于模型的实验设计更强调统计显著性(响应曲面设计和混料设计除外),模型未知的实验设计试图在设计空间中获得最佳预测,而不是在模型中找到一个重要因子或效应项,更强调预测准确性(RMSE和其他预测性能指标)。

基于模型的实验设计强调在设计空间的边缘采样(降低随机误差的影响),通常具有较少的因子水平,更适合构建比较简单的多项式模型;模型未知的实验设计(空间填充设计)则更强调在设计空间内部合理均匀布点(通常没有随机误差,降低偏差),具有更多的因子水平,适合构建复杂的精细模型^⑦。

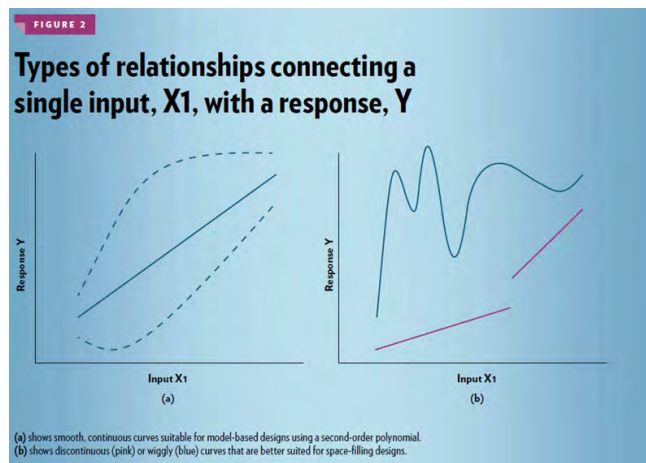
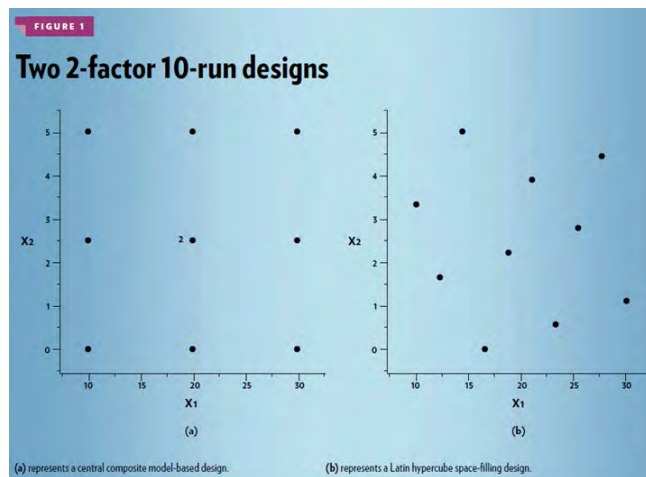


图 56 基于模型 vs 模型未知

两种实验设计方法的选择,没有固定的范式,需要根据分析目标具体情况具体分析。了解每种方法的优点和局限性,灵活运用,方能应对纷繁复杂的分析难题。选择基于模型还是模型未知,只是实验设计旅程中的第一个关键岔路口,实验设计方法的选择需要综合权衡众多因素,才能最大限度确保实验设计的成功。

⑦ The First Fork in The Road. The choice between model-based or space-filling designed experiments. by Christine M. Anderson-Cook and Lu Lu

常用实验设计方法

常见的实验设计方法包括完全析因设计、响应曲面设计、混料设计、确定性筛选设计、定制设计等。每种方法都有其特点和适用范围，应根据具体情况进行选择。

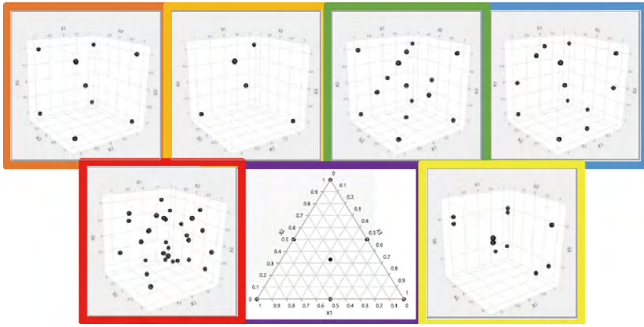


图 57 常用实验设计方法^⑧

轻松实验设计:以实验设计 workflow 形式，通过引导式界面完成定义、模型、设计、数据输入、分析、预测、报表各步骤的操作，用户友好

完全析因设计:经典的实验设计方法，描述阶段使用，通常在因子数量较少 (2~6个) 时用于描述和理解系统特性，可以估计主效应和交互效应，实验次数相对适中 ($n=2^k$)，但随着因子个数的增加，实验次数成几何级增长

部分析因设计:经典的实验设计方法，筛选阶段使用，通常在因子数量较多 (3~15个) 时用于识别关键因子，基于效应稀疏假设，存在效应混杂问题，需要权衡实验次数 ($n=2^{(k-p)}$) 和实验设计的分辨率

响应曲面设计:经典的实验设计方法，优化阶段使用，通常在需要重点优化少量关键因子 (2~3个) 时使用，实现对响应的高精度预测，可以估计主效应、交互效应和非线性效应，要求所有因子均为连续型变量，且实验区域已接近最优区域

确定性筛选设计:JMP 原创的实验设计方法，筛选阶段使用，适用于早期实验工作，用于从大量潜在因子 (>4个) 中高效识别关键因子，仅需要少量试验 ($n \approx 2k$)，使用连续因子和两水平分类因子，允许估计主效应、某些交互作用和二次项，可避免效应混杂，并且可以标识对响应造成非线性效应的因子

定制设计:JMP 原创的实验设计方法，构造为您特定的实验场景量身定制的最优设计，可以定义多种因子类型、添加参数空间约束、结合经验知识研究特定效应、根据实验资源指定实验次数等，灵活适应不同特定场景，适合在实验任务稍复杂时使用，通常定制设计比使用其他方法获得的设计更为经济高效

混料设计:常用于配方研发，研究混合物中各组分相对比例对响应变量的影响，满足混料约束，各组分的相对比例之和为 1

空间填充设计:常用于计算机仿真实验或非线性复杂系统建模，实验次数通常较多，适合与机器学习方法结合使用构建复杂模型

扩充设计:通过序贯实验扩充已设计的实验，向现有实验设计添加实验点，解决现有设计的不明确性

设计诊断^⑨

生成多个实验设计方案后，可以采用评估设计和比较设计平台，对实验设计方案进行诊断，结合多个评价指标和报表综合比较，选取最适合当前研究目标的实验设计方案。

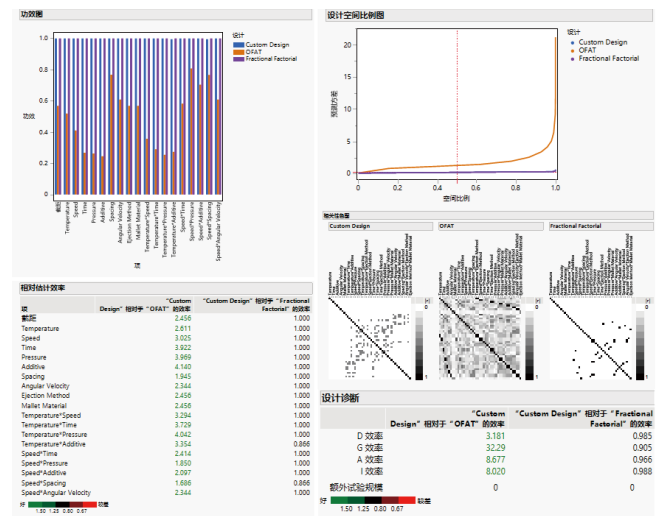


图 58 评估与比较设计

^⑧ Experimental Design Choices. Phil Kay. #DoEbyPhilKay.

^⑨ 可参考《DOE入门课:从方法到实践,60分钟轻松掌握DOE》公开视频课程了解详细内容。

JMP实验设计的优势

同时支持经典、最优和现代实验设计方法,适用常见或复杂场景的产品研发与工艺优化。

具备全面的统计建模和机器学习平台,支持实验设计数据高效建模分析。

具备一系列交互、动态的刻画器、模拟器和可视化平台,轻松实现模型应用,加速产品研发与工艺参数优化。

JMP的实验设计平台秉承JMP“以解决问题为中心”的理念,力求根据实际问题构建实验计划,一举颠覆传统软件需要修正实际问题以适应理论模型的“削足适履”的做法,并将实验设计平台与专业的模拟功能(Simulation)完美结合,帮助用户直击问题的实质并控制新方案实施的失败风险。JMP以完整的实验设计方法集完全满足客户需要,同时以灵活多样的定制设计功能帮助用户高效地利用实验资源,大幅节省实验成本。

全面的实验设计方法集

使用JMP,用户不仅能实现析因设计、响应曲面设计、混料设计等传统实验设计方案,还能轻松实现目前业界其他同类软件难以实现的定制设计、扩充设计、确定性筛选设计、非线性设计、空间填充设计等高级实验设计方案,用户对实验设计方法的各种需求基本都能得到满足。

独有的高级实验设计(Advanced DOE)

JMP强大的实验设计平台独具空间填充设计、非线性设计以及定制设计等高级实验设计方案,让用户获得解决实际问题更加高效的方法。

如果所研究的过程相对稳定,在一定的实验预算内,空间填充设计能实现最佳的实验覆盖面,从而获得信息量最丰富的实验结果数据。

优化的传统实验设计

即使对于一般软件都能实现的传统实验设计,JMP的实验设计平台也不乏过人之处。JMP不仅让用户在既有的理论模型和分析结果的基础上获得更为强大的扩展功能,而且用更完整的实验计划制定方案帮助用户提高效率,降低风险。

高度集成的专业模拟(Simulation)功能

JMP的实验设计平台与专业模拟功能高度集成,帮助用户预测最优方案的实施效果,减小失败风险;同时用户也不必另行购买任何模拟软件,既节省了成本,又降低了因为切换于不同软件之间而产生错误的几率。

灵活易用的实现方式

JMP的实验设计平台充分考虑用户的要求,完全按照分析和解决问题的思路引导用户完成实验方案,便于用户学习以大幅降低使用门槛;运用JMP实验设计平台丰富的定制功能,用户可以完全按需定制个性化的实验设计方案,甚至可以突破传统软件对实验次数的限定,根据用户实际的可用资源指定最佳实验次数。

关于 JMP

自1989年第一版JMP软件问世以来，JMP一直致力于通过交互式可视化的统计分析，发现数据背后的价值，被广泛应用于探索性数据分析 (EDA)、数据挖掘、建模预测、实验设计、产品研发、生物统计、医学统计、可靠性分析、业务可视化、市场调研、质量管理及改善等领域，裨益半导体和电子、高科技制造、医药、临床、公共卫生、基因研究、新能源、钢铁、化工、食品、快速消费品、金融和服务、政府和教育等各行各业。作为全球领先的数据分析方法及咨询供应商，JMP致力于帮助客户从数据中获取价值，优化决策，驱动创新，成就未来。



联系我们

JMP大中华区

上海市徐汇区虹桥路1号港汇中心一座1503-1506室
电话: (86) 21 61633069 / 61633080 / 17891905668
邮箱: jmpmarketing@jmp.com

关注“JMP数据分析”



JMP和所有其他JMP Statistical Discovery LLC的产品或服务名称均为JMP Statistical Discovery LLC在美国和其他国家/地区的注册商标或商标。®表示在美国注册。其他品牌和产品名称是其各自所有者的商标。

版权所有© JMP Statistical Discovery LLC.保留所有权利。JMP Statistical Discovery LLC, SAS Campus Drive, Cary, NC 27513, USA.