國 立 清 華 大 學

碩士論文

題目: 隨機域模型下2^{n-k}因子設計之

預測變異數

Prediction Variance of 2^{n-k} Factorial Designs

Under Random Field Model

所　　別 : 統計學研究所　組別:工業統計組

指導教授 : 鄭 少 爲(Shao-Wei Cheng) 博士

姓　　名 : 張 語 軒(Yu-Hsuan Chang)

學　　號 : 9724501

中華民國九十九年七月

摘要

本文討論在電腦實驗中, 二水準正規部份因子設計的挑選準則。在傳統實驗設計所使用的固定效應模型下, 最小偏差準則是一個發展完整且經常被使用的設計挑選準則。但在電腦實驗中常被使用的克利金模型下, 卻較少有關於類似最小偏差準則這樣, 能考慮效應混淆嚴重程度的設計挑選準則。本文將由預測變異數的觀點出發, 試圖在高斯克利金的模型下, 融入最小偏差準則的精神, 來發展設計挑選準則。並透過理論推導及數值方法, 來觀察此準則的表現。

致謝辭

首先最要感謝的是我的指導老師鄭少爲教授, 老師總是很有耐心地引導我們研究方向, 讓我在寫論文的過程中, 學會作研究的精神以及獨立思考的能力, 而這些, 是我在求學路上得到最珍貴的收穫。同時也很感謝清大統研所裡每一位親切的老師給予我在課業上的指導。

接著我要感謝班上的所有同學, 很高興能遇到一群非常好相處的同學, 因爲你們, 讓這兩年再怎麼辛苦都能開心地渡過。尤其感謝陪伴我奮鬥長達六年的同學加室友宋治立, 非常關心我且常當我訴苦對象的楊哲瑋, 還有跟我同天生且總是把歡樂帶給大家的陳鈴宛。另外也特別感謝我的兩個室友陸志瑋跟洪偉, 謝謝你們讓我在新竹的生活多了很多歡樂的回憶。

再來感謝的是我的學妹張慈芳, 很高興能遇到這麼了解我又包容我的人, 謝謝你總是在我遇到挫折的時候, 在身旁鼓勵我逗我開心, 有你的陪伴眞的非常幸運。

最後, 感謝我的爸爸媽媽在背後默默支持我, 讓我可以無後顧之憂地專心完成學業。

目錄

圖目錄

表目錄

第 1 章

緒論及文獻回顧

對於在固定效應模型 (fixed effect model) 下挑選二水準正規部份因子設計 (regular fractional factorial design) 的準則, 過去的文獻中已有諸多討論, 例如最高解析度 (maximum resolution) 準則、最小偏差 (minimum aberration) 準則, 都是傳統的因子實驗中, 常使用來挑選較佳之設計的準則。然而, 在電腦實驗 (computer experiment) 中常用的克利金模型 (Kriging model) 下有關挑選二水準正規部份因子設計的準則之研究, 卻發展得沒那麼完善。因此, 研究如何在克利金模型下挑選二水準正規部份因子設計, 是本文的主要內容。本文將由預測變異數 (prediction variance) 的觀點出發, 討論設計的挑選準則。

關於內文的部份, 第一章以下的內容爲文獻回顧, 介紹克利金模型以及部份因子設計。第二章則是依據部份因子設計的代數及編碼理論, 發展出一套探討預測變異數的工具。而第三章藉由此工具來證明一些關於預測變異數的定理。在第四章中, 依照這些定理加上一些推測, 發展出挑選設計的準則, 並且利用數值方法來觀察說明此挑選設計的方法是可信的。第五章爲結論。

1.1 電腦實驗

1.1.1 高斯克利金模型

在電腦實驗中最廣泛被使用的模型, 爲建構在隨機域 (random field) 模型下的高斯克利金模型 (Gaussian Kriging model), 此模型經常被使用在地理統計上。其模型公式爲

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{L} \beta_j f_j(\mathbf{x}) + Z(\mathbf{x}),$$

其中, $\mathbf{x}$爲落在實驗域中的某n維向量 (n爲因子個數) 用來代表因子的某個設定點, $f_j(\cdot)$爲已知的函數用來代表各種固定效應, β_j爲f_j所相對應的未知參數, $Z(\mathbf{x})$爲隨機函數。在此$Z(\mathbf{x})$常假設爲穩定高斯過程(stationary Gaussian process), 其期望值爲0, 變異數爲σ_z^2, 相關函數爲

$$Corr(Z(\mathbf{x}_1), Z(\mathbf{x}_2)) = r(\boldsymbol{\lambda}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2),$$

其中$r(\boldsymbol{\lambda}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$爲預先設定的正半定(positive semidefinite) 函數, $\boldsymbol{\lambda}$爲影響相關函數的未知參數。本文中使用的克利金模型爲一般克利金模型 (ordinary Kriging model):

$$Y(\mathbf{x}) = \mu + Z(\mathbf{x}),$$

其爲實際分析上最廣泛被使用的模型。另外, 文獻中最常探討的相關函數爲指數相關函數(exponential correlation function), 其函數形式爲

$$r(\boldsymbol{\lambda}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp(-\sum_{i}^{n} \lambda_i |x_{1i} - x_{2i}|^q),$$

其中$0 < q \leq 2$且$\lambda_i > 0$。在Wang (2009)的文章中推導出$\boldsymbol{\lambda}$可用來判斷因子效應的重要性。由於λ_i越高會使相關函數降低, 故在此將λ_i稱爲第i個因子所對應到的複雜度參數。當$q = 2$時的指數相關函數又稱爲高斯相關函數(Gaussian correlation function), 其函數具有無限可微的特性, 爲本文中將探討的相關函數。以下爲簡化符號, 我們會使用$r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$來代替$r(\boldsymbol{\lambda}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$。關於高斯過程與克利金模型更多的細節與介紹可參考Santner et al. (2003)及Fang et al. (2006)。

1.1.2 預測值的機率分佈

令$\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_m$爲實驗域中不同的設定點, 其中我們在$\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_m$上執行了電腦實驗, 並且有興趣利用電腦實驗的結果來預測在$\mathbf{x}_0$上的反應值。在一般克利金模型下, $Y_0 = Y(\mathbf{x}_0)$與$\mathbf{Y}^m = (Y(\mathbf{x}_1), Y(\mathbf{x}_2), \cdots, Y(\mathbf{x}_m))'$的聯合密度函數爲多變數常態分配

$$\begin{pmatrix} Y_0 \\ \mathbf{Y}^m \end{pmatrix} \sim N_{1+m} \left[\mathbf{1}_{1+m}\mu,\ \sigma_z^2 \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)' \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}_0) & \mathbf{R} \end{pmatrix} \right], \tag{1.1}$$

其中$\mathbf{1}_{1+m}$爲$(1+m) \times 1$的向量$(1, 1, \cdots, 1)'$, $\mathbf{r}(\mathbf{x}_0) = (r(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1), r(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2), \cdots, r(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_m))'$, $\mathbf{R}$爲$m \times m$的矩陣其第(i, j)個元素爲$r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$。由(1.1) 我們可推導

出Y_0的條件分配為

$$Y_0|_{\mathbf{Y}^m=\mathbf{y}^m} \sim N_1(\mu_{0|m},\ \sigma^2_{0|m}),$$

其中

$$\begin{aligned}\mu_{0|m} &= \mu + \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}^m - \mathbf{1}_m\mu),\\ \sigma^2_{0|m} &= \sigma^2_z(1 - \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}(\mathbf{x}_0))。\end{aligned} \tag{1.2}$$

若採用$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_m$作為實驗點得到反應值為$y(\mathbf{x}_1), y(\mathbf{x}_2), \cdots, y(\mathbf{x}_m)$, 則對於$\mathbf{x}_0$上的未知反應值$y_0$, 其預測期望值與預測變異數分別為(1.2) 式中的 $\mu_{0|m}$與$\sigma^2_{0|m}$。此外, 為了方便分析與討論, 在不失一般性下, 本文中皆假設$\mu = 0$且$\sigma^2_z = 1$。

1.2 二水準因子設計

1.2.1 全因子設計與部份因子設計

若一實驗有n個因子, 而每個因子皆為二水準 (level), 則我們會以$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)'$來表示一個試驗 (run) 的水準組合 (level combination), 其中$x_i \in \{+1, -1\}, 1 \le i \le n$, $+1$及-1分別表示高水準及低水準。若將每一個水準組合都考慮進實驗中, 則需2^n個試驗次數, 對於這樣的設計我們稱為2^n全因子設計 (full factorial design)。但如果因為成本考量而無法執行所有2^n個試驗時, 我們可從2^n個水準組合中挑選2^{n-k}個水準組合執行試驗, 此設計稱為2^{n-k}部份因子設計 (fractional factorial design)。

關於建構2^{n-k}部份因子設計, 首先要挑選出k個獨立生成元 (independent generator) $G_1, G_2, \cdots, G_k$, 每一個生成元都是某幾個因子相乘所形成的字串(word)。挑選完生成元之後, 利用定義關係 (defining relation)

$$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k,\ \delta_i \in \{+1, -1\},$$

則可將2^n全因子設計分割成2^k個集合, 每一個集合都是同構(isomorphic) 的2^{n-k}部份因子設計, 而這2^k個部份因子設計稱為一個族(family)。在設計族中, 滿足定義關係

$$I = G_1 = G_2 = \ldots = G_k$$

的部份因子設計稱為主部份(principal fraction)。

另外部份因子設計的定義關係可生成一個定義對比子群 (defining contrast subgroup), 由其可推出2^{n-k}個混淆集合 (alias set)。定義對比子群爲所有等於I的字串形成的集合, 而混淆集合爲彼此之間混淆在一起的效應所形成的集合, 以下用例子說明。

例 1. 若一實驗有5個二水準因子F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, 若以$F_1F_2F_4$及$F_1F_3F_5$作爲生成元, 則定義關係$I = F_1F_2F_4 = F_1F_3F_5$可定義出一個$2^{5-2}$部份因子設計。此設計的定義對比子群爲

$$I = F_1F_2F_4 = F_1F_3F_5 = F_2F_3F_4F_5,$$

而此設計的2^{5-2}個混淆集合爲

$$\begin{array}{llll}
I & =F_1F_2F_4 & =F_1F_3F_5 & =F_2F_3F_4F_5 \\
F_1 & =F_2F_4 & =F_3F_5 & =F_1F_2F_3F_4F_5 \\
F_2 & =F_1F_4 & =F_1F_2F_3F_5 & =F_3F_4F_5 \\
F_3 & =F_1F_2F_3F_4 & =F_1F_5 & =F_2F_4F_5 \\
F_4 & =F_1F_2 & =F_1F_3F_4F_5 & =F_2F_3F_5 \\
F_5 & =F_1F_2F_4F_5 & =F_1F_3 & =F_2F_3F_4 \\
F_2F_3 & =F_1F_3F_4 & =F_1F_2F_5 & =F_4F_5 \\
F_2F_5 & =F_1F_4F_5 & =F_1F_2F_3 & =F_3F_4 \text{ 。}
\end{array}$$

定義對比子群中的每一個字串, 稱爲定義字串 (defining word)。若令A_i爲該設計的定義字串中, 字串長度 (wordlength) 爲i的個數, 則

$$(A_3, A_4, \cdots, A_k)$$

稱爲字長型態 (wordlength pattern), 比如例**1**中的設計其字長型態爲$(2, 1, 0)$。對於任意兩個2^{n-k}部份因子設計D_1以及D_2, 觀察其字長型態, 令r爲最小的整數使得$A_r(D_1) \neq A_r(D_2)$, 若$A_r(D_1) \leq A_r(D_2)$, 則D_1稱爲有較小的偏差 (less aberration)。若對於所有2^{n-k}部份因子設計, D_1皆有較小的偏差, 則D_1稱爲最小偏差 (minimum aberration) 設計。最小偏差準則爲固定效應模型下, 經常被使用來挑選設計的準則。

在固定效應模型底下, 我們會對反應變數$\mathbf{Y}$以及因子效應$\mathbf{X}$建立迴歸式

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

其中$\mathbf{X}$稱爲模型矩陣(model matrix)。若採用2^{n-k}部份因子設計, 則$\mathbf{X}$爲$2^{n-k} \times 2^{n-k}$的矩陣, 且$\mathbf{X}$的第i行$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到該設計中第i個混淆集合之字串在每一個試驗中相對應的水準設定之乘積。例如在例**1**中, 該設計的模型矩陣爲

$$\mathbf{X} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccc} \mathbf{X}_{\cdot 1} & \mathbf{X}_{\cdot 2} & \mathbf{X}_{\cdot 3} & \mathbf{X}_{\cdot 4} & \mathbf{X}_{\cdot 5} & \mathbf{X}_{\cdot 6} & \mathbf{X}_{\cdot 7} & \mathbf{X}_{\cdot 8} \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \end{array},$$

其中$\mathbf{X}_{\cdot 7}$便是對應到字串F_2F_3在每一個試驗中的F_2及F_3之水準設定的乘積。關於部份因子設計更詳細的細節可參考Wu and Hamada (2009)。

1.2.2 部份因子設計的有限幾何表示法

在二水準的水準組合中, 若用1來取代原本的-1, 用0來取代$+1$, 將$\{0, 1\}$視爲$GF(2)$(Galois field of order 2), 使用2模(modulo 2) 加法運算取代原本$\{+1, -1\}$使用的乘法運算, 則所有的水準組合之$\{0, 1\}$表示式所形成的集合爲一個群(group)。在此將此$\{0, 1\}$表示法稱爲水準組合的二元表示式。對於一個2^{n-k}部份因子設計族, 其主部份爲包含在全因子設計中的一個子群 (subgroup), 其他設計皆爲主部份的旁集 (coset), 由於一個設計族中的元素爲一個主部份子群及該子群的所有旁集, 因此一個設計族可視爲一個商群 (quotient group)。

由於部份因子設計有很好的代數性質, 因此在二元表示式下, 我們可將一個設計族中2^k個部份因子設計, 視爲n維$GF(2)$空間中2^k個平行平面(parallel flat), 一個平行平面對應到一個設計, 若將同一個平行平面中的所有點收集起來則成爲該

設計的所有二元水準組合。接下來用有限幾何方式來表示平行平面中的任一平面, 此方法稱爲單一平面設計 (single-flat designs)。

任一個平行平面可用$\mathbf{At} = \mathbf{c}$來表示, 其中$\mathbf{t}$爲水準組合的二元表示式, $\mathbf{A}$爲生成元矩陣(generator matrix), $\mathbf{c}$爲旁集指示向量(coset indicator vector)。以下使用一個例子來說明。

例 2. 若某實驗有7個因子$F_1, F_2, \ldots, F_7$, 若使用2^{7-4}部份因子設計, 且四個獨立生成元分別爲$F_1F_5F_6$, $F_2F_5F_7$, $F_3F_6F_7$和$F_4F_5F_6F_7$, 則

$$\mathbf{A} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} F_1 & F_2 & F_3 & F_4 & F_5 & F_6 & F_7 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{array},$$

$\mathbf{A}$裡面的每一列分別代表一個獨立生成元。若該設計之定義關係爲

$$I = F_1F_5F_6 = -F_2F_5F_7 = -F_3F_6F_7 = F_4F_5F_6F_7,$$

則此2^{7-4}部份因子設計之實驗點, 在二元表示式下可表示爲

$$\{\ \mathbf{t} \in \{0,1\}^7 \mid \mathbf{At} = \mathbf{c}\},$$

其中 $\mathbf{c} = (0,1,1,0)'$。

關於平行平面更詳細的內容可參考Mukerjee and Wu (2006)。

第 2 章

差異向量與差集合

2.1 差異向量

這一節中, 將介紹兩個水準組合之間的差異向量, 作爲探討兩個水準組合之間相關函數的工具。

2.1.1 定義差異向量

定義 1. 當一實驗有n個二水準因子, 若$\mathbf{x}_1$和$\mathbf{x}_2$爲任意的兩個水準組合, 令$\mathbf{x}_1 = (x_{11}, x_{12}, \cdots, x_{1n})'$, $\mathbf{x}_2 = (x_{21}, x_{22}, \cdots, x_{2n})'$, 其中$x_{ij} \in \{+1, -1\}$, $1 \leq i \leq 2$, $1 \leq j \leq n$。定義

$$d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (e_1, e_2, \cdots, e_n)',$$

其中

$$e_j = \begin{cases} 1, & \text{若} x_{1j} \neq x_{2j}, \\ 0, & \text{若} x_{1j} = x_{2j}\text{。} \end{cases}$$

以上的e_j爲$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$之間第j個因子的水準差異, 若水準設定相同則差異爲0, 不同則爲1。而$d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$定義爲$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$這兩個水準組合之間的差異向量。

舉例子說明, 在因子個數爲$n = 4$時, 若兩個水準組合分別爲$\mathbf{x}_1 = (+1, +1, -1, -1)'$以及$\mathbf{x}_2 = (+1, -1, -1, +1)'$, 則這兩個水準組合之間的差異向量$d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$爲$(0, 1, 0, 1)'$。

另外, 設$\mathbf{t}_1$和$\mathbf{t}_2$分別爲$\mathbf{x}_1$和$\mathbf{x}_2$的二元表示式, $\mathbf{t}_1 = (t_{11}, t_{12}, \cdots, t_{1n})'$, $\mathbf{t}_2 = (t_{21}, t_{22}, \cdots, t_{2n})'$, 其中$t_{ij} \in \{0, 1\}$, $1 \leq i \leq 2$, $1 \leq j \leq n$。由於t_{ij}定義

在$GF(2)$下, 其運算方式爲:

$$\begin{aligned}&0+0\equiv 0\ (mod\ 2),\ 1+1\equiv 0\ (mod\ 2),\\&0+1\equiv 1\ (mod\ 2),\ 1+0\equiv 1\ (mod\ 2)。\end{aligned}\tag{2.1}$$

藉由上式我們可觀察出, 當x_{1j}與x_{2j}之間的差異e_j爲0時, t_{1j}與t_{2j}同爲0或同爲1, 則

$$t_{1j}+t_{2j}=0=e_j。$$

當x_{1j}與x_{2j}之間的差異e_j爲1時, t_{1j}與t_{2j}其中一個爲0另一個爲1, 則

$$t_{1j}+t_{2j}=1=e_j。$$

故可發現, 不論x_{1j}與x_{2j}之間差異爲何, 以下式子皆滿足

$$e_j=t_{1j}+t_{2j},$$

因此可得到以下公式:

$$\begin{aligned}d(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)'=&(e_1,e_2,\cdots.e_n)\\=&(t_{11}+t_{21},t_{12}+t_{22},\cdots,t_{1n}+t_{2n})\\=&\mathbf{t}_1'+\mathbf{t}_2'。\end{aligned}\tag{2.2}$$

套用前面的例子, 若$\mathbf{x}_1=(+1,+1,-1,-1)'$, $\mathbf{x}_2=(+1,-1,-1,+1)'$, 則$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$對應到的二元表示式分別爲$\mathbf{t}_1=(0,0,1,1)'$, $\mathbf{t}_2=(0,1,1,0)'$, 因此$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$之間的差異向量爲

$$\begin{aligned}\mathbf{t}_1'+\mathbf{t}_2'=&(0,0,1,1)+(0,1,1,0)\\=&(0,1,0,1)\\=&d(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)。\end{aligned}$$

接下來, 我們將利用差異向量來表示兩個水準組合之間的相關函數。

2.1.2 差異向量與相關函數

在克利金模型下, 兩個水準組合$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$之間的相關函數爲

$$r(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=\exp(-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|x_{1i}-x_{2i}|^2),$$

若$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$皆爲二水準因子的水準組合, 則此相關函數可使用$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$之間的差異向量來表示:

$$\exp(-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|x_{1i}-x_{2i}|^2)=\exp\{-\sum_{i=1}^{n}4\lambda_i e_i(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\},$$

其中$e_i(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$爲$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$之間第$i$個因子的水準差異。例如, $\mathbf{x}_1=(+1,+1,-1)'$且$\mathbf{x}_2=(+1,-1,+1)'$時, $d(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)'=(e_1,e_2,e_3)=(0,1,1)$, 則$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$之間的相關函數$r(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$爲$\exp(-4\lambda_2-4\lambda_3)$。因此我們可以定義一個函數來表示差異向量與相關函數之間的關係。

定義 2. 在n個二水準因子的實驗中, 在克利金模型下, 令第i個因子在相關函數中的複雜度參數爲λ_i。對於任意的水準組合$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$, 當兩者的差異向量$d(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$爲$d=(e_1,e_2,\ldots,e_n)'$時, 若定義函數$\gamma$爲

$$\gamma(d)=e^{-4\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i e_i},$$

則γ是利用差異向量來表示$\mathbf{x}_1$與$\mathbf{x}_2$的相關函數, $\gamma(d)=\gamma(d(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2))=r(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$。

定義了γ函數之後, 我們就可以用此函數來表示(1.1) 式中的$\mathbf{r}(\mathbf{x_0})$。令$D=\{\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_m\}$爲一部份因子設計下的 m個水準組合, 而$\mathbf{x_0}$爲欲做預測之水準組合。則$\mathbf{x_0}$對應到的$\mathbf{r}(\mathbf{x_0})$爲

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(\mathbf{x_0})'&=(r(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_1),r(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_2),\cdots,r(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_m))\\&=(\gamma(d_{01}),\gamma(d_{02}),\cdots,\gamma(d_{0m})),\end{aligned}\tag{2.3}$$

其中$d_{0i}=d(\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_i)$, $1\le i\le m$。另外 (1.1) 式中$\mathbf{R}$中的每一個元素, 皆爲設計$D=\{\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_m\}$裡面某兩個水準組合之間的相關函數。因此, 也可以用差異向量與γ函數來表示, 如:

$$\mathbf{R}=\begin{bmatrix}\gamma(d_{11}) & \gamma(d_{12}) & \cdots & \gamma(d_{1m})\\ \gamma(d_{21}) & \gamma(d_{22}) & \cdots & \gamma(d_{2m})\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \gamma(d_{m1}) & \gamma(d_{m2}) & \cdots & \gamma(d_{mm})\end{bmatrix},\tag{2.4}$$

其中$d_{ij}=d(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$, $1\le i,j\le m$。以上說明如何利用差異向量來描述 (1.1) 式中的$\mathbf{r}(\mathbf{x_0})$與$\mathbf{R}$, 這將有助於之後化簡預測變異數的公式。

2.2 差集合

這一小節中, 我們將某些差異向量收集起來形成一個集合, 在此稱其爲差集合, 藉由觀察此集合的性質將可對後面推廣預測變異數的性質有所幫助。

2.2.1 定義差集合

定義 3. 當一實驗有n個二水準因子, 若用k個獨立生成元將所有水準組合區分成2^k個平行平面, 令$\mathbf{A}$爲k個獨立生成元構成的生成元矩陣, D_1及D_2爲任意的兩個平行平面(兩者可相同), 且$\mathbf{c}_1$和$\mathbf{c}_2$分別爲D_1和D_2的旁集指示向量, 則定義集合Δ爲

$$\Delta(D_1, D_2) = \{\ \mathbf{t} \in \{0,1\}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{t} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2\}, \tag{2.5}$$

我們稱$\Delta(D_1, D_2)$爲D_1與D_2之間的差集合。

因爲滿足$\mathbf{A}\mathbf{t} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$的所有點所形成的集合亦可視爲一個平行平面, 所以定義中$\Delta(D_1, D_2)$可視爲D_1及D_2所屬的設計族中某一個設計之二元表示式。

接下來說明$\Delta(D_1, D_2)$所代表的意義。在上述定義中, 令$D_i = \{\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \cdots, \mathbf{x}_{im}\}$, 其中$m = 2^{n-k}$, $i = 1$或2。若在D_1中任意選取某個水準組合$\mathbf{x}_{1p}$, 計算其與D_2中每一個水準組合的差異向量, 令這些差異向量收集起來形成的集合爲$\{d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{21}), \cdots, d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{2m})\}$, 且在$D_2$中任意選取某個水準組合$\mathbf{x}_{2q}$, 令其與$D_1$中每一個水準組合的差異向量形成的集合爲$\{d(\mathbf{x}_{2q}, \mathbf{x}_{11}), \cdots, d(\mathbf{x}_{2q}, \mathbf{x}_{1m})\}$, 則$\Delta(D_1, D_2)$滿足以下的性質。

定理 1.

$$\begin{aligned}\Delta(D_1, D_2) &= \{d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{21}), d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{22}), \cdots, d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{2m})\} \\ &= \{d(\mathbf{x}_{2q}, \mathbf{x}_{11}), d(\mathbf{x}_{2q}, \mathbf{x}_{12}), \cdots, d(\mathbf{x}_{2q}, \mathbf{x}_{1m})\}。\end{aligned}$$

證明. 令D_i的旁集指示向量爲$\mathbf{c}_i$, 且$\mathbf{x}_{ij}$的二元表示式爲$\mathbf{t}_{ij}$, $i = 1$或2, $1 \le j \le m$。從 (2.2) 式, 我們知道差異向量的集合$\{d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{21}), d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{22}), \cdots, d(\mathbf{x}_{1p}, \mathbf{x}_{2m})\}$可表示爲

$$\{\mathbf{t}_{1p} + \mathbf{t}_{21}, \mathbf{t}_{1p} + \mathbf{t}_{22}, \cdots, \mathbf{t}_{1p} + \mathbf{t}_{2m}\}。$$

因爲$\mathbf{t}_{1p}$爲$\mathbf{x}_{1p}$的二元表示式, $\mathbf{t}_{2j}$爲$\mathbf{x}_{2j}$的二元表示式, $1 \le j \le m$, 所以

$$\mathbf{A}(\mathbf{t}_{1p} + \mathbf{t}_{2j}) = \mathbf{A}\mathbf{t}_{1p} + \mathbf{A}\mathbf{t}_{2j} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2,$$

得到$\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{2j}$滿足$\mathbf{At}=\mathbf{c}_1+\mathbf{c}_2$, 也就是$\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{2j}\in\Delta(D_1,D_2)$。又因爲$\Delta(D_1,D_2)$與$\{\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{21},\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{22},\cdots,\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{2m}\}$兩個集合皆有相同的元素個數 (皆爲$m$個), 所以

$$\begin{aligned}\Delta(D_1,D_2)=&\{\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{21},\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{22},\cdots,\mathbf{t}_{1p}+\mathbf{t}_{2m}\}\\=&\{d(\mathbf{x}_{1p},\mathbf{x}_{21}),d(\mathbf{x}_{1p},\mathbf{x}_{22}),\cdots,d(\mathbf{x}_{1p},\mathbf{x}_{2m})\}。\end{aligned}$$

同樣的方法可得到

$$\begin{aligned}\Delta(D_1,D_2)=&\{\mathbf{t}_{2q}+\mathbf{t}_{11},\mathbf{t}_{2q}+\mathbf{t}_{12},\cdots,\mathbf{t}_{2q}+\mathbf{t}_{1m}\}\\=&\{d(\mathbf{x}_{2q},\mathbf{x}_{11}),d(\mathbf{x}_{2q},\mathbf{x}_{12}),\cdots,d(\mathbf{x}_{2q},\mathbf{x}_{1m})\}\end{aligned}$$

故得証。 □

由於$\Delta(D_1,D_2)$在此爲差異向量構成的集合, 因此稱$\Delta(D_1,D_2)$爲D_1與D_2之間的差集合。另外, 因爲差集合可視爲部份因子設計族中的一個平行平面, 所以在這裡我們也利用部份因子設計的定義關係來描述差集合。以下舉一個例子來介紹差集合。

例 3. 對於三個二水準因子的實驗, 考慮生成元爲$F_1F_2F_3$的2^{3-1}部份因子設計族$\mathcal{F}$, 其生成元矩陣爲$\mathbf{A}=(1,1,1)$。將$\mathcal{F}$表示爲$\{D_1,D_2\}$, 其中D_1與D_2分別爲定義關係爲:

$$D_1:I=F_1F_2F_3,\ \ D_2:I=-F_1F_2F_3,$$

的2^{3-1}部份因子設計。則D_1的旁集指示向量$\mathbf{c}_1=0$, D_2的旁集指示向量$\mathbf{c}_2=1$。因此D_1與D_2之間的差集合爲

$$\Delta(D_1,D_2)=\{\ \mathbf{t}\in\{0,1\}^3\mid(1,1,1)\mathbf{t}=\mathbf{c}_1+\mathbf{c}_2=1\}。$$

由於在單一平面設計中, $(1,1,1)\mathbf{t}=1$表示平面D_2, 因此$\Delta(D_1,D_2)$可視爲D_2的二元表示式, 故我們可利用定義關係$I=-F_1F_2F_3$來描述此差集合。另外觀察D_1與D_1之間或D_2與D_2之間的差集合, 因爲$\mathbf{c}_1+\mathbf{c}_1=\mathbf{c}_2+\mathbf{c}_2=0$, 所以

$$\Delta(D_1,D_1)=\Delta(D_2,D_2)=\{\mathbf{t}\in\{0,1\}^3\mid(1,1,1)\mathbf{t}=0\},$$

代表$\Delta(D_1,D_1)$與$\Delta(D_2,D_2)$皆爲D_1的二元表示式, 可用定義關係$I=F_1F_2F_3$來描述此差集合。

以下用更普遍的方式說明差集合的定義關係, 這部份可參考第一章中旁集指示向量與定義關係之間的關聯 (注意在本文中, 皆是以部份因子設計的定義關係來描述差集合, 而非以定義對比子群來描述)。考慮一個2^{n-k}部份因子設計族$\mathcal{F}=\{D_1, D_2, \cdots, D_{2^k}\}$, 令此族中的$k$個獨立生成元為$G_1, G_2, \cdots, G_k$, 其生成元矩陣為$\mathbf{A}$, 若從$\mathcal{F}$中任意挑選出兩組設計$D_p$及$D_q$, 若$D_p$的旁集指示向量為$\mathbf{c}_p=(a_1, a_2, \cdots, a_k)'$, D_q的旁集指示向量為$\mathbf{c}_q=(b_1, b_2, \cdots, b_k)'$, 則差集合$\Delta(D_p, D_q)$為滿足以下條件的所有二元水準組合 $\mathbf{t}$:

$$\mathbf{At}=\mathbf{c}_p+\mathbf{c}_q=\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_k \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_1+b_1 \\ a_2+b_2 \\ \vdots \\ a_k+b_k \end{bmatrix},$$

而$\Delta(D_p, D_q)$的定義關係為

$$I=\delta_1 G_1=\delta_2 G_2=\cdots=\delta_k G_k, \tag{2.6}$$

其中對$1 \leq i \leq k$,

$$\delta_i=\begin{cases} 1, & 若 a_i+b_i=0, \\ -1, & 若 a_i+b_i=1。\end{cases} \tag{2.7}$$

另外, 觀察D_p與D_p形成的差集合, 因為

$$\mathbf{c}_p+\mathbf{c}_p=(a_1, a_2, \cdots, a_k)'+(a_1, a_2, \cdots, a_k)'=(0, 0, \cdots, 0)',$$

所以 $\Delta(D_p, D_p)$的定義關係為

$$I=G_1=G_2=\cdots=G_k, \tag{2.8}$$

其對應到設計族中的主部份。

2.2.2 差集合的性質

令$\mathcal{F}=\{D_1, D_2, \cdots, D_{2^k}\}$為一個$2^{n-k}$部份因子設計族。若在$\mathcal{F}$的$k$個生成元中加入新的獨立生成元$G^*$, 則我們可利用$G^*$將每個$D_j, 1 \leq j \leq 2^k$, 拆成兩個集合, 從而生成一個$2^{n-(k+1)}$部份因子設計族

$$\mathcal{F}^*=\{D_1^+, D_1^-, D_2^+, D_2^-, \cdots, D_{2^k}^+, D_{2^k}^-\},$$

其中$\{D_1^+, D_2^+, \cdots, D_{2^k}^+\}$滿足$I = G^*$, $\{D_1^-, D_2^-, \cdots, D_{2^k}^-\}$滿足$I = -G^*$, 並且對於任意的$j = 1, \cdots, 2^k$, $D_j^+ \cup D_j^- = D_j$且$D_j^+ \cap D_j^- = \varnothing$。以下引理是關於新的設計族$\mathcal{F}^*$中差集合的性質, 此引理將用在第三章的定理證明中。

引理 1. *若從$\mathcal{F}$中任意挑選出兩組設計D_p及D_q(D_p可等於D_q), 則對於新加入獨立生成元G^*後產生新的設計族$\mathcal{F}^*$中的設計, 其差集合滿足:*

$$\Delta(D_p^+, D_q^+) = \Delta(D_p^-, D_q^-),\ \Delta(D_p^+, D_q^-) = \Delta(D_p^-, D_q^+)$$

證明. 設$\mathbf{A}$為$\mathcal{F}$之生成元矩陣且D_p的旁集指示向量為$(a_1, a_2, \cdots, a_k)'$, D_q的旁集指示向量為$(b_1, b_2, \cdots, b_k)'$。在加入新的獨立生成元G^*後, $\mathcal{F}^*$之生成元矩陣$\mathbf{A}^*$可表示為

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ a^* \end{bmatrix}$$

其中a^*對應到的是新加入的生成元G^*。D_p^+的旁集指示向量則為$(a_1, a_2, \cdots, a_k, 0)'$, D_p^-的旁集指示向量為$(a_1, a_2, \cdots, a_k, 1)'$。同樣地, D_q^+的旁集指示向量為$(b_1, b_2, \cdots, b_k, 0)'$, D_q^-的旁集指示向量為$(b_1, b_2, \cdots, b_k, 1)'$。根據定義**3**, 差集合$\Delta(D_p^+, D_q^+)$為滿足以下條件的所有二元水準組合 $\mathbf{t}$:

$$\mathbf{A}^*\mathbf{t} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_k \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_k + b_k \\ 0 \end{bmatrix},$$

而$\Delta(D_p^-, D_q^-)$為滿足以下條件的所有二元水準組合 $\mathbf{t}$:

$$\mathbf{A}^*\mathbf{t} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_k \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_k + b_k \\ 0 \end{bmatrix},$$

因此$\Delta(D_p^+, D_q^+)$以及$\Delta(D_p^-, D_q^-)$爲相同的差集合。使用同樣地方法可導出, $\Delta(D_p^+, D_q^-)$以及$\Delta(D_p^-, D_q^+)$都爲滿足

$$\mathbf{A}^*\mathbf{t} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_k + b_k \\ 1 \end{bmatrix}$$

的所有所有二元水準組合 $\mathbf{t}$, 所以這兩個差集合也是相同的。 □

在引理**1**中, 若$\mathcal{F}$的k個獨立生成元爲$G_1, G_2, \cdots, G_k$, 則從以上證明中可看出$\Delta(D_p^+, D_q^+)$以及$\Delta(D_p^-, D_q^-)$的定義關係爲

$$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = G^*, \tag{2.9}$$

且$\Delta(D_p^+, D_q^-)$以及$\Delta(D_p^-, D_q^+)$的定義關係爲

$$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = -G^*, \tag{2.10}$$

其中δ_i的值由$a_i + b_i$依 (2.7) 式所決定。利用相同的方法也可得到$\Delta(D_p^+, D_p^+)$以及$\Delta(D_p^-, D_p^-)$的定義關係爲

$$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = G^*, \tag{2.11}$$

且$\Delta(D_p^+, D_p^-)$以及$\Delta(D_p^-, D_p^+)$的定義關係爲

$$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = -G^*。 \tag{2.12}$$

接下來舉例子說明以上的結果。

例 4. 對於例**3**提到的部份因子設計族$\mathcal{F} = \{D_1, D_2\}$, 若加入新的獨立生成元$G^* = F_1$, 則$D_1$會被分割成$D_1^+$與$D_1^-$, D_2被分割成D_2^+與D_2^-, 新構成的2^{3-2}部份因子設計族$\mathcal{F}^*$爲$\{D_1^+, D_1^-, D_2^+, D_2^-\}$, 其中$\mathcal{F}^*$的每一個平行平面的定義關係爲:

$$\begin{aligned} D_1^+ &: I = F_1F_2F_3 = F_1, & D_1^- &: I = F_1F_2F_3 = -F_1, \\ D_2^+ &: I = -F_1F_2F_3 = F_1, & D_2^- &: I = -F_1F_2F_3 = -F_1。 \end{aligned}$$

由引理**1**可得知

$$\Delta(D_1^+, D_2^+) = \Delta(D_1^-, D_2^-)\text{且 }\Delta(D_1^+, D_2^-) = \Delta(D_1^-, D_2^+)\text{。}$$

另外, 由於$\mathcal{F}^*$的生成元矩陣為

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

而$\mathcal{F}^*$中每一個平行平面的旁集指示向量為

$$D_1^+ : (0,0)',\ D_1^- : (0,1)',\ D_2^+ : (1,0)',\ D_2^- : (1,1)'\text{。}$$

因此,

$$\begin{aligned} &\Delta(D_1^+, D_2^+) = \Delta(D_1^-, D_2^-) \\ =&\{\ \mathbf{t} \in \{1,0\}^3 \mid \mathbf{A}^*\mathbf{t} = (0,0)' + (1,0)' = (0,1)' + (1,1)' = (1,0)'\}, \end{aligned}$$

故差集合$\Delta(D_1^+, D_2^+)$與$\Delta(D_1^-, D_2^-)$皆為D_2^+的二元表示式, 可用定義關係$I = -F_1F_2F_3 = F_1$來表示這兩個差集合。而

$$\begin{aligned} &\Delta(D_1^+, D_2^-) = \Delta(D_1^-, D_2^+) \\ =&\{\ \mathbf{t} \in \{0,1\}^3 \mid \mathbf{A}^*\mathbf{t} = (0,0)' + (1,1)' = (0,1)' + (1,0)' = (1,1)'\}, \end{aligned}$$

故差集合$\Delta(D_1^+, D_2^-)$與$\Delta(D_1^-, D_2^+)$皆為D_2^-的二元表示式, 可用定義關係$I = -F_1F_2F_3 = -F_1$來表示這兩個差集合。若只考慮D_1分割後彼此之間的差集合, 則

$$\begin{aligned} \Delta(D_1^+, D_1^+) = \Delta(D_1^-, D_1^-) = \{\ \mathbf{t} \in \{1,0\}^3 \mid \mathbf{A}^*\mathbf{t} = (0,0)'\}, \\ \Delta(D_1^+, D_1^-) = \Delta(D_1^-, D_1^+) = \{\ \mathbf{t} \in \{0,1\}^3 \mid \mathbf{A}^*\mathbf{t} = (0,1)'\}, \end{aligned}$$

故差集合$\Delta(D_1^+, D_1^+)$與$\Delta(D_1^-, D_1^-)$皆為D_1^+的二元表示式, 可用定義關係$I = F_1F_2F_3 = F_1$來表示這兩個差集合, 而差集合$\Delta(D_1^+, D_1^-)$與$\Delta(D_1^-, D_1^+)$皆為D_1^-的二元表示式, 可用定義關係$I = F_1F_2F_3 = -F_1$來表示這兩個差集合。

以上介紹完關於差集合的性質。在下一章節中, 我們將把這些性質使用於水準組合$\mathbf{x}_0$的預測變異數之公式上。

第 3 章

預測變異數

3.1 水準組合的預測變異數

3.1.1 預測變異數的公式化簡

在Wang (2009)的文章提到, 對於克利金模型下(1.1) 式中的矩陣$\mathbf{R}$, 若使用2^{n-k}部份因子設計, 則固定效應模型下的模型矩陣$\mathbf{X}$中的每一行都是$\mathbf{R}$的特徵向量, 因此可得到以下式子

$$\mathbf{R}\mathbf{X} = \mathbf{X}\Lambda, \tag{3.1}$$

其中Λ爲$\mathbf{R}$的特徵值矩陣。接著可再推導至

$$\mathbf{R}_{i\cdot}\mathbf{X}_{\cdot i} = x_{ii}\kappa_i, \tag{3.2}$$

其中$\mathbf{R}_{i\cdot}$爲$\mathbf{R}$的第i列, $\mathbf{X}_{\cdot i}$爲$\mathbf{X}$的第i行, x_{ii}爲$\mathbf{X}$的第(i,i)個元素, κ_i是$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到的特徵值。由於$\mathbf{X}$矩陣爲直交的, 因此$\mathbf{X}\mathbf{X}' = m\mathbf{I}$, 其中$m$爲$\mathbf{X}$的行個數(也就是試驗次數$2^{n-k}$)。在 (3.1) 式中若等號左右同乘$\mathbf{X}'$, 則可得到:

$$\mathbf{R}\mathbf{X}\mathbf{X}' = m\mathbf{R} = \mathbf{X}\Lambda\mathbf{X}'。$$

接著, 因爲$\mathbf{X}$與$\mathbf{X}'$互爲對方的反矩陣, 因此$\mathbf{R}$的反矩陣爲:

$$\mathbf{R}^{-1} = m^{-1}\mathbf{X}'^{-1}\Lambda^{-1}\mathbf{X}^{-1} = m^{-1}\mathbf{X}\Lambda^{-1}\mathbf{X}'。$$

將以上結果, 代入至克利金模型下預測變異數的公式(1.2), 得到

$$\begin{aligned}\sigma^2_{0|m}(\mathbf{x}_0) &= 1 - \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)\\ &= 1 - m^{-1}(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X})\Lambda^{-1}(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X})'。\end{aligned} \tag{3.3}$$

由於Λ爲一對角線矩陣, 其對角線上第i個元素爲κ_i, 因此Λ^{-1}亦爲一對角線矩陣, 其對角線上第i個元素爲κ_i^{-1}。$\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}$展開後爲一個$1\times m$的向量, 此向量上的第$i$個元素爲$\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i}$。接著對 (3.3) 式中$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X})\Lambda^{-1}(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X})'$這部份作進一步化簡可得:

$$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X})\Lambda^{-1}(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X})' =$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 1} & \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 2} & \cdots & \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \kappa_1^{-1} & & & 0 \\ & \kappa_2^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \kappa_m^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 1} \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 2} \\ \cdots \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot m} \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \frac{(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2}{\kappa_i},$$

將化簡結果代回 (3.3), 得到

$$\sigma^2_{0|m}(\mathbf{x}_0) = 1 - m^{-1}\sum_{i=1}^{m} \frac{(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2}{\kappa_i}, \tag{3.4}$$

其中$\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'$與$\kappa_i$爲公式中包含因子複雜度參數$\boldsymbol{\lambda}$的部份。在這裡稱$\frac{(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2}{\kappa_i}$這部份爲$\sigma^2_{0|m}(\mathbf{x}_0)$的第$i$個組成項, 後面的理論推導皆是由觀察組成項來了解預測變異數。在下一小節中, 將對組成項的分子及分母部份用差集合來表示, 目的是希望能幫助我們觀察預測變異數的性質。

3.1.2 差集合表示法

令$D = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_m\}$爲$2^{n-k}$部份因子設計中的$m(= 2^{n-k})$ 個水準組合, 而$\mathbf{x_0}$爲欲做預測之水準組合, 以下將利用差集合來表示$\mathbf{x_0}$的預測變異數。爲了能夠簡化預測變異數的表示式, 先作以下的定義:

定義 4. 令$\Delta = \{d_1, d_2, \ldots, d_N\}$爲一組差集合, d_i爲差異向量, $1 \le i \le N$, 定義Γ函數爲:

$$\Gamma(\Delta) = \gamma(d_1) + \gamma(d_2) + \ldots + \gamma(d_N)。$$

式子(3.4)中變異數組成項之分子部份

由 (2.3) 式可知$\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)' = (\gamma(d_{01}), \gamma(d_{02}), \cdots, \gamma(d_{0m}))$。當 (3.4) 中的$i = 1$時, $\mathbf{X}_{\cdot 1} = (1, 1, \cdots, 1)'$, 故$\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 1}$爲

$$\gamma(d_{01}) + \gamma(d_{02}) + \cdots + \gamma(d_{0m}),$$

利用定義**4**中所定義的Γ函數得到

$$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 1})^2 = \Gamma(\Delta_0)^2, \tag{3.5}$$

其中$\Delta_0 = \{d_{01}, d_{02}, \cdots, d_{0m}\}$。

當 (3.4) 式中的$i = 2, 3, \cdots, m$時, 對$\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i}$這部份展開可表示為:

$$\gamma(d_{01}^{i+}) + \gamma(d_{02}^{i+}) + \cdots + \gamma(d_{0\frac{m}{2}}^{i+}) - \gamma(d_{01}^{i-}) - \gamma(d_{02}^{i-}) - \cdots - \gamma(d_{0\frac{m}{2}}^{i-}), \tag{3.6}$$

其中$\{\gamma(d_{01}^{i+}), \cdots, \gamma(d_{0\frac{m}{2}}^{i+})\}$為 $\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)$中對應到$\mathbf{X}_{\cdot i}$為$+1$的部份 (在此不考慮排列順序), $\{\gamma(d_{01}^{i-}), \cdots, \gamma(d_{0\frac{m}{2}}^{i-})\}$為 $\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)$中對應到$\mathbf{X}_{\cdot i}$為-1的部份。若以$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到的混淆集合中, 任取一個字串作為新的獨立生成元, 令其生成元為G^{i*}。以G^{i*}將部份因子設計D切割成兩個集合, 設滿足$I = G^{i*}$的部份為D^{i+}, 滿足$I = -G^{i*}$的部份為D^{i-}, 其中$D^{i+} \cup D^{i-} = D$且$D^{i+} \cap D^{i-} = \phi$。令$\Delta_0^{i+}$為$\mathbf{x}_0$與$D^{i+}$中每一個水準組合之間的差集合, 且$\Delta_0^{i-}$為$\mathbf{x}_0$與$D^{i-}$中每一個水準組合之間的差集合。若$G^{i*}$相對應的水準設定之乘積為1 (也就是$\mathbf{X}_{\cdot i}$中對應到$I = G^{i*}$的部份為1), 則

$$\Delta_0^{i+} = \{d_{01}^{i+}, d_{02}^{i+}, \cdots, d_{0\frac{m}{2}}^{i+}\},\ \Delta_0^{i-} = \{d_{01}^{i-}, d_{2}^{i-}, \cdots, d_{0\frac{m}{2}}^{i-}\},$$

由(3.6) 式可得到

$$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2 = (\Gamma(\Delta_0^{i+}) - \Gamma(\Delta_0^{i-}))^2。 \tag{3.7}$$

若G^{i*}相對應的水準設定之乘積為-1 (也就是$\mathbf{X}_{\cdot i}$中對應到$I = G^{i*}$的部份為-1), 則 $\Delta_0^{i+} = \{d_{01}^{i-}, d_{2}^{i-}, \cdots, d_{0\frac{m}{2}}^{i-}\}$且$\Delta_0^{i-} = \{d_{01}^{i+}, d_{02}^{i+}, \cdots, d_{0\frac{m}{2}}^{i+}\}$, 得到的分子公式仍與(3.7) 相同 (僅右式平方內正負號對調)。以上即為 (3.4) 式中變異數組成項, 用差集合表示其分子部份的結果。

式子(3.4)中變異數組成項之分母部份

依 (2.4) 式, 令$\mathbf{R}_{i\cdot} = (\gamma(d_{i1}), \gamma(d_{i2}), \cdots, \gamma(d_{im}))$。當 (3.4) 式中的$i = 1$時, $\mathbf{X}_{\cdot 1} = (1, 1, \cdots, 1)'$, 故

$$\mathbf{R}_{1\cdot}\mathbf{X}_{\cdot 1} = \gamma(d_{11}) + \gamma(d_{12}) + \cdots + \gamma(d_{1m}),$$

由於$x_{11}=1$, 從 (3.2) 式中可得到$\kappa_1=\mathbf{R}_{1\cdot}\mathbf{X}_{\cdot 1}$。因此$\kappa_1$可表示爲

$$\kappa_1=\Gamma(\Delta), \tag{3.8}$$

其中$\Delta=\{d_{11},d_{12},\cdots,d_{1m}\}$。

當 (3.4) 式中的$i=2,3,\cdots,m$時, $\mathbf{R}_{i\cdot}\mathbf{X}_{\cdot i}$這部份展開可表示爲:

$$\gamma(d_{i1}^{i+})+\gamma(d_{i2}^{i+})+\cdots+\gamma(d_{i\frac{m}{2}}^{i+})-\gamma(d_{i1}^{i-})-\gamma(d_{i2}^{i-})-\cdots-\gamma(d_{i\frac{m}{2}}^{i-}),$$

其中$\{\gamma(d_{i1}^{i+}),\gamma(d_{i2}^{i+}),\cdots,\gamma(d_{i\frac{m}{2}}^{i+})\}$爲 $\mathbf{R}_{i\cdot}$中對應到$\mathbf{X}_{\cdot i}$爲+1的部份, $\{\gamma(d_{i1}^{i-}),\gamma(d_{i2}^{i-}),\cdots,\gamma(d_{i\frac{m}{2}}^{i-})\}$爲 $\mathbf{R}_{i\cdot}$中對應到$\mathbf{X}_{\cdot i}$爲-1的部份。同前一段分子部份相同的作法, 可利用$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到的獨立生成元G^{i*}將D分割成D^{i+}以及D^{i-}, 令Δ^{i+}爲D中第i個水準組合$\mathbf{x}_i$與D^{i+}中每一個水準組合之間的差集合, 且Δ^{i-}爲$\mathbf{x}_i$與D^{i-}中每一個水準組合之間的差集合。若G^{i*}相對應的水準設定之乘積爲1, 則

$$\Delta^{i+}=\{d_{i1}^{i+},d_{i2}^{i+},\cdots,d_{i\frac{m}{2}}^{i+}\},\ \Delta^{i-}=\{d_{i1}^{i-},d_{i2}^{i-},\cdots,d_{i\frac{m}{2}}^{i-}\},$$

接著就可得到

$$\mathbf{R}_{i\cdot}\mathbf{X}_{\cdot i}=\Gamma(\Delta^{i+})-\Gamma(\Delta^{i-}),$$

將上式代入 (3.2) 得到

$$\Gamma(\Delta^{i+})-\Gamma(\Delta^{i-})=x_{ii}\kappa_i,$$

其中x_{ii}代表的是$\mathbf{R}_{i\cdot}\mathbf{X}_{\cdot i}$展開後$\gamma(d_{ii})$所對應到的係數, $x_{ii}=+1$或-1。若$d_{ii}\in\Delta^{i+}$則$x_{ii}=+1$且$\kappa_i=\Gamma(\Delta^{i+})-\Gamma(\Delta^{i-})$, 若$d_{ii}\in\Delta^{i-}$則$x_{ii}=-1$且$\kappa_i=-\Gamma(\Delta^{i+})+\Gamma(\Delta^{i-})$。因爲

$$d_{ii}=d(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_i)=(0,0,\ldots,0)',$$

所以κ_i可表示爲:

$$\kappa_i=\begin{cases}\Gamma(\Delta^{i+})-\Gamma(\Delta^{i-}), & 若(0,0,\ldots,0)'\in\Delta^{i+},\\ \Gamma(\Delta^{i-})-\Gamma(\Delta^{i+}), & 若(0,0,\ldots,0)'\in\Delta^{i-}。\end{cases} \tag{3.9}$$

若G^{i*}相對應的水準設定之乘積爲-1, 則$\Delta^{i+}=\{d_{i1}^{i-},d_{i2}^{i-},\cdots,d_{i\frac{m}{2}}^{i-}\}$且$\Delta^{i-}=\{d_{i1}^{i+},d_{i2}^{i+},\cdots,d_{i\frac{m}{2}}^{i+}\}$,推導出的分母公式仍與(3.9) 相同。以上即爲 (3.4) 式中變異數組成項, 用差集合表示其分母部份的結果。

到此爲止, 我們已推導出如何利用差集合來表示預測變異數中的每一個組成項。而在下一小節中, 將會把此結果更進一步推廣至利用差集合的定義關係來表示這些組成項, 由此我們將可更清楚的表達不同水準組合$\mathbf{x}_0$計算出的預測變異數。

3.2 平行平面的預測變異數

3.2.1 同一平行平面中預測變異數的性質

在第一章中曾提到, 一個2^{n-k}部份因子設計族中的每個設計, 皆可視為由$GF(2)$所構成的n維有限幾何空間中, 利用k個獨立生成元生成的2^k個平行平面之一。若任意選取一個平行平面中所有的水準組合作為實驗點, 以下定理將說明對於其他任何一個平行平面, 其所包含之水準組合皆會有相同的預測變異數。

定理 2. 令$D_1, D_2, \cdots, D_{2^k}$為一個$2^{n-k}$部份因子設計族中的所有設計, 若在此族中任意挑選一個設計D_p中所有的水準組合作為實驗點, 則對任意$q \in \{1, \cdots, 2^k\} \setminus \{p\}$, D_q中的水準組合之預測變異數皆相同, 也就是對於每一個$\mathbf{x}_0 \in D_q$, $\sigma^2_{0|m}(\mathbf{x}_0)$為常數。

證明. 從變異數公式 (3.4) 中可以看出, 除了分子$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2$之外, 其他部份皆不受$\mathbf{x}_0$影響。若要證明$\sigma^2_{0|m}(\mathbf{x}_0)$為常數, 只需證明對任意的$i = 1, \cdots, m(= 2^{n-k})$, 第$i$個組成項分子部份不隨$\mathbf{x}_0$改變而改變。當$i = 1$時,(3.5) 式中的$\Delta_0$等於$\Delta(D_p, D_q)$, 其不受$\mathbf{x}_0$改變影響, 因此$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 1})^2$不隨$\mathbf{x}_0$而改變。

接下來觀察$i = 2, 3, \cdots, m$的時候。若以$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到的混淆集合中, 任取一個字串作為新的獨立生成元G^{i*}, 將D_p分割成D_p^{i+}及D_p^{i-}兩集合, 且將D_q分割成D_q^{i+}及D_q^{i-}兩個集合。若$\mathbf{x}_0 \in D_q^{i+}$, 則$\mathbf{x}_0$與$D_p^{i+}$中每一個水準組合之間的差集合$\Delta_0^{i+}$為$\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i+})$, 且$\mathbf{x}_0$與$D_p^{i-}$中每一個水準組合之間的差集合$\Delta_0^{i-}$為$\Delta(D_p^{i-}, D_q^{i+})$, 將以上結果代入(3.7) 式, 得到

$$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2 = \{\Gamma(\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i+})) - \Gamma(\Delta(D_p^{i-}, D_q^{i+}))\}^2。\tag{3.10}$$

若$\mathbf{x}_0 \in D_q^{i-}$, 則$\mathbf{x}_0$與$D_p^{i+}$中每一個水準組合之間的差集合$\Delta_0^{i+}$為$\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i-})$, 且$\mathbf{x}_0$與$D_p^{i-}$中每一個水準組合之間的差集合$\Delta_0^{i-}$為$\Delta(D_p^{i-}, D_q^{i-})$, 將以上結果代入(3.7) 式, 得到

$$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2 = \{\Gamma(\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i-})) - \Gamma(\Delta(D_p^{i-}, D_q^{i-}))\}^2。\tag{3.11}$$

在引理**1**中推導出$\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i+}) = \Delta(D_p^{i-}, D_q^{i-})$且$\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i-}) = \Delta(D_p^{i-}, D_q^{i+})$, 因此我們可以發現(3.10) 式與 (3.11) 式是相等的。以上證明出對所有$\mathbf{x}_0 \in D_q$, $\sigma^2_{0|m}(\mathbf{x}_0)$皆為常數。 □

由於同一個平行平面中任意水準組合$\mathbf{x}_0$皆有相同的預測變異數, 以下我們將推導出利用差集合的定義關係來表示此預測變異數。

3.2.2 定義關係表示法

這一小節裡, 我們將延續3.1.2節中的推導, 利用差集合的定義關係來表示D_q中每一個水準組合的預測變異數。在定義**4**中, 若差集合Δ的定義關係爲$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k$, 以下我們都會使用

$$\Gamma(I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k)$$

來取代原本的表示法$\Gamma(\Delta)$。

式子(3.4)中變異數組成項之分子部份

當 (3.4) 式中的$i = 1$時, 我們若觀察 (3.5) 式中的$\Delta_0 = \Delta(D_p, D_q)$, 因爲其定義關係由 (2.6) 式可知爲$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k$, 將其代入 (3.5) 式得到:

$$(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot 1})^2 = \Gamma(I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k)^2。 \quad (3.12)$$

當 (3.4) 式中的$i = 2, 3, \cdots, m$時, 藉由我們在 (2.9) 及 (2.10) 兩式中已推導出的結果, 差集合$\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i+})$及$\Delta(D_p^{i-}, D_q^{i-})$的定義關係表示爲:

$$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = G^{i*},$$

差集合$\Delta(D_p^{i+}, D_q^{i-})$及$\Delta(D_p^{i-}, D_q^{i+})$的定義關係表示爲:

$$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = -G^{i*},$$

其中G^{i*}可爲$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到的混淆集合中任一個字串。將以上的定義關係代入 (3.10) 式或 (3.11) 式皆得到

$$\begin{aligned}(\mathbf{r}(\mathbf{x}_0)'\mathbf{X}_{\cdot i})^2 =& (\Gamma(I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = G^{i*}) \\ & - \Gamma(I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = -G^{i*}))^2。 \end{aligned} \quad (3.13)$$

以上即爲(3.4)式中的變異數組成項用定義關係來表示分子部份的結果。

式子(3.4)中變異數組成項之分母部份

當(3.4)式中的$i = 1$時, 我們若觀察 (3.8) 式中的$\Delta = \Delta(D_p, D_p)$, 因爲其定義關係由 (2.8) 式可知爲$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k$, 將此定義關係代入 (3.8) 式得到

$$\kappa_1 = \Gamma(I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k)。 \tag{3.14}$$

當 (3.4) 式中的$i = 2, 3, \cdots, m$時, 若$\mathbf{x}_i \in D^{p+}$, 則 $\Delta^{i+} = \Delta(D_p^{i+}, D_p^{i+})$且$\Delta^{i-} = \Delta(D_p^{i+}, D_p^{i-})$。若$\mathbf{x}_i \in D^{p-}$, 則 $\Delta^{i+} = \Delta(D_p^{i-}, D_p^{i+})$且$\Delta^{i-} = \Delta(D_p^{i-}, D_p^{i-})$。而$\Delta(D_p^{i+}, D_p^{i+})$與$\Delta(D_p^{i-}, D_p^{i-})$的定義關係由(2.11) 式可知爲$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = G^{i*}$, $\Delta(D_p^{i+}, D_p^{i-})$與$\Delta(D_p^{i-}, D_p^{i+})$的定義關係由(2.12) 式可知爲$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = -G^{i*}$。將這些定義關係代入 (3.9) 式, 因差異向量$(0, 0, \cdots, 0)'$會包含在定義關係爲$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = G^{i*}$的差集合中, 故不論$(0, 0, \cdots, 0)' \in \Delta^{i+}$或$(0, 0, \cdots, 0)' \in \Delta^{i-}$皆可得到

$$\begin{aligned}\kappa_i =& \Gamma(I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = G^{i*}) \\ &- \Gamma(I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k = -G^{i*})。\end{aligned} \tag{3.15}$$

以上即爲 (3.4) 式中的變異數組成項, 用定義關係來表示其分母部份的結果。

將以上推導出的 (3.12)-(3.15) 四式一起代入 (3.4), 若以D_p中所有的水準組合作爲實驗點, 我們可以完全利用差集合的定義關係來描述D_q中水準組合的預測變異數如下:

$$\begin{aligned}\sigma_{0|m}^2(\mathbf{x}_0) = 1 - m^{-1} \Bigg\{ & \frac{\Gamma(I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k)^2}{\Gamma(I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k)} \\ + \sum_{i=2}^{m} & \frac{(\Gamma(I = \delta_1 G_1 = \cdots = \delta_k G_k = G^{i*}) - \Gamma(I = \delta_1 G_1 = \cdots = \delta_k G_k = -G^{i*}))^2}{\Gamma(I = G_1 = \cdots = G_k = G^{i*}) - \Gamma(I = G_1 = \cdots = G_k = -G^{i*})} \Bigg\}。\end{aligned} \tag{3.16}$$

其中$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k$爲$\Delta(D_p, D_q)$的定義關係, G^{i*}可爲$\mathbf{X}_{\cdot i}$對應到的混淆集合中任一個字串。以上推導出的結果, 第1個組成項與其他組成項的公式不太一樣, 但爲了表示上的方便, 當$i = 1$時, 令生成元G^{1*}爲I, 則定義關係爲$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = G^{1*}$的差集合, 與$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k$是相同的 (因爲$G^{1*}$並非獨立生成元)。且令定義關係爲

$$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k = -G^{1*}$$

的差集合爲空集合, 則

$$\Gamma(I=\delta_1 G_1=\delta_2 G_2=\cdots=\delta_k G_k=-G^{1*})=0。$$

如此便可把每一個組成項都表示爲

$$\frac{(\Gamma(I=\delta_1 G_1=\cdots=\delta_k G_k=G^{i*})-\Gamma(I=\delta_1 G_1=\cdots=\delta_k G_k=-G^{i*}))^2}{\Gamma(I=G_1=\cdots=G_k=G^{i*})-\Gamma(I=G_1=\cdots=G_k=-G^{i*})}, \tag{3.17}$$

其中$i=1,\cdots,m$。因此之下推導預測變異數時, 便不需再特別討論$i=1$的情況。

從 (3.16) 式可觀察出, 不論D_p爲設計族中的那一個部份因子設計, 得到的2^k-1個D_q, $q\neq p$, 上的預測變異數所形成的集合都相同。因此之後的討論, 皆以部份因子設計族中的主部份 (principal fraction) 當成D_p。

例 5. 對於例**4**中的部份因子設計族, 若以D_1中所有的水準組合作爲實驗點時, 我們可利用(3.16) 式來表示D_2中任一個水準組合的預測變異數。在例**3**中得到$\Delta(D_1, D_2)$的定義關係爲$I=-F_1F_2F_3$, 而該設計中的每一個混淆集合爲:

$$第1個: I=F_1F_2F_3,\quad 第2個: F_1=F_2F_3,$$
$$第3個: F_2=F_1F_3,\quad 第4個: F_3=F_1F_2。$$

當$i=1$時, 第1個組成項爲

$$\frac{\{\Gamma(I=-F_1F_2F_3)\}^2}{\Gamma(I=F_1F_2F_3)}。$$

當$i=2$時, 從第2個混淆集合中, 取$G^{2*}=F_1$, 則第2個組成項爲

$$\frac{\{\Gamma(I=-F_1F_2F_3=F_1)-\Gamma(I=-F_1F_2F_3=-F_1)\}^2}{\Gamma(I=F_1F_2F_3=F_1)-\Gamma(I=F_1F_2F_3=-F_1)}。$$

以同樣的方法計算第3跟第4個組成項, 即可得到D_2中任一個水準組合的預測變異數爲:

$$\begin{aligned}\sigma^2_{0|m}(x_0) \quad = \quad & 1-m^{-1}\{\frac{\{\Gamma(I=-F_1F_2F_3)\}^2}{\Gamma(I=F_1F_2F_3)}+\\ & \frac{\{\Gamma(I=-F_1F_2F_3=F_1)-\Gamma(I=-F_1F_2F_3=-F_1)\}^2}{\Gamma(I=F_1F_2F_3=F_1)-\Gamma(I=F_1F_2F_3=-F_1)}+\\ & \frac{\{\Gamma(I=-F_1F_2F_3=F_2)-\Gamma(I=-F_1F_2F_3=-F_2)\}^2}{\Gamma(I=F_1F_2F_3=F_2)-\Gamma(I=F_1F_2F_3=-F_2)}+\\ & \frac{\{\Gamma(I=-F_1F_2F_3=F_3)-\Gamma(I=-F_1F_2F_3=-F_3)\}^2}{\Gamma(I=F_1F_2F_3=F_3)-\Gamma(I=F_1F_2F_3=-F_3)}\},\end{aligned}$$

其中$m=2^{3-1}$。

3.3 2^{n-1}下的預測變異數

在2^{n-1}部份因子設計族中只會有兩個平行平面, 若以其中一個平行平面內所包涵的所有水準組合作爲實驗點, 則其他水準組合皆落在另一個平行平面上, 因此其他水準組合上的預測變異數皆相同。

3.3.1 變異數隨λ的改變

在克利金模型中, 每一個因子F_i都分別具有一個複雜度參數λ_i。若要找出挑選設計的最佳方式, 則需要先觀察$\boldsymbol{\lambda}$對預測變異數的影響。接下來, 我們將討論在不同的$\boldsymbol{\lambda}$下, 改變設計會對預測變異數造成的影響。

若一實驗中有n個二水準因子$F_1, F_2, \cdots, F_n$, 對於定義關係爲$I = F_1F_2\cdots F_n$的2^{n-1}部份因子設計, 令平行平面$I = -F_1F_2\cdots F_n$中水準組合的預測變異數爲σ^2。若任意挑選$l \in \{1, 2, \cdots, n\}$, 對於定義關係爲$I = F_1F_2\cdots F_{l-1}F_{l+1}\cdots F_n$的另一個$2^{n-1}$部份因子設計, 令平行平面$I = -F_1F_2\cdots F_{l-1}F_{l+1}\cdots F_n$中水準組合的預測變異數爲$\sigma^2_{(-l)}$。若把因子$F_l$從實驗中抽離, 只考慮$n-1$個因子之實驗, 爲了清楚地區別, 我們標示此$n-1$個因子爲$F'_1, F'_2, \cdots, F'_{l-1}, F'_{l+1}, \cdots, F'_n$, 對於定義關係爲$I = F'_1F'_2\cdots F'_{l-1}F'_{l+1}\cdots F'_n$的$2^{(n-1)-1}$部份因子設計, 令平行平面$I = -F'_1F'_2\cdots F'_{l-1}F'_{l+1}\cdots F'_n$中水準組合的預測變異數爲${\sigma'}^2_{(-l)}$。下面定理**3**將證明, 當因子$F_l$的複雜度參數$\lambda_l$趨近於無限大時, σ^2會趨近於$\sigma^2_{(-l)}$。而定理**4**將證明$\sigma^2_{(-l)}$恆等於${\sigma'}^2_{(-l)}$。因此, 當λ_l趨近於無限大時, σ^2亦會趨近於${\sigma'}^2_{(-l)}$。

定理 3. 當因子F_l的複雜度參數λ_l趨近於無限大時, σ^2會趨近於$\sigma^2_{(-l)}$。

證明. 令$W^l = F_1F_2\cdots F_{l-1}F_{l+1}\cdots F_n$, 則定義關係$I = F_1F_2\cdots F_n$可表示爲$I = W^lF_l$, $I = F_1F_2\cdots F_{l-1}F_{l+1}\cdots F_n$可表示爲$I = W^l$。首先計算$\sigma^2$中的每一個變異數組成項。設計$I = W^lF_l$與平行平面$I = -W^lF_l$之間的差集合其定義關係爲$I = -W^lF_l$, 而此設計的混淆集合可表示爲:

第1個 : $I = W_{12}F_l$,	第2個 : $F_l = W_{12}$,
第3個 : $W_{21} = W_{22}F_l$,	第4個 : $W_{21}F_l = W_{22}$,
$\vdots$	$\vdots$
第$2^{n-1}-1$個 : $W_{2^{n-2}1} = W_{2^{n-2}2}F_l$,	第2^{n-1}個 : $W_{2^{n-2}1}F_l = W_{2^{n-2}2}$,

注意其中每一個字串W_{ij}皆爲不包含因子F_l的字串。若任意挑選$i=1,2,\cdots,2^{n-2}$, 根據 (3.17) 式, σ^2中的第$2i-1$個變異數組成項爲

$$\frac{(\Gamma(I=-W^lF_l=W_{i1})-\Gamma(I=-W^lF_l=-W_{i1}))^2}{\Gamma(I=W^lF_l=W_{i1})-\Gamma(I=W^lF_l=-W_{i1})}。\tag{3.18}$$

由於定義關係$I=-W^lF_l=W_{i1}$中的所有二元水準組合可拆解成滿足

$$I=-W^l=W_{i1}=F_l \text{ 與 } I=W^l=W_{i1}=-F_l$$

這兩個集合, 也就是以F_l當生成元分成$I=F_l$的部份及$I=-F_l$的部份, 而$I=-W^lF_l=-W_{i1}$可拆解成滿足

$$I=-W^l=-W_{i1}=F_l \text{ 與 } I=W^l=-W_{i1}=-F_l$$

這兩個集合。因此 (3.18) 式分子部份可拆解爲

$$\begin{aligned}&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=W^l=W_{i1}=-F_l)\\&-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=-F_l)\}^2,\end{aligned}$$

當差集合的定義關係包含$I=-F_l$時, 差集合裡每一個差異向量的水準差異e_l皆爲1 , 代表Γ函數中每一個γ函數會包含$e^{-4\lambda_l}$這一個相乘項, 因此可以把上式中包含$I=-F_l$的Γ函數中的$e^{-4\lambda_l}$提出並將F_l的定義關係改爲$I=F_l$, 結果如下:

$$\begin{aligned}&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)\\&-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)\}^2,\end{aligned}\tag{3.19}$$

同樣地, 可將組成項分母部份拆解爲

$$\begin{aligned}&\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=-F_l)\\&-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=-F_l),\end{aligned}$$

把$e^{-4\lambda_l}$提出且將$-F_l$改爲F_l得到:

$$\begin{aligned}&\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)\\&-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)。\end{aligned}\tag{3.20}$$

接著將 (3.19) 式的分子部份與 (3.20) 式的分母部份合併, 當λ_l趨近於無窮大時, $e^{-4\lambda_l}$會趨近於0, 因此第$2i-1$個變異數組成項會趨近於

$$\frac{(\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l))^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)}。\tag{3.21}$$

同樣的方法可使用在σ^2中的第$2i$個變異數組成項, 其爲

$$\frac{(\Gamma(I=-W^lF_l=W_{il}F_l)-\Gamma(I=-W^lF_l=-W_{il}F_l))^2}{\Gamma(I=W^lF_l=W_{il}F_l)-\Gamma(I=W^lF_l=-W_{il}F_l)},$$

其分子部份拆解並提出$e^{-4\lambda_l}$可得

$$\begin{aligned}
&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=-F_l)\\
&-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=W_{i1}=-F_l)\}^2\\
=&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)\\
&-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)\}^2, \quad (3.22)
\end{aligned}$$

而分母部份拆解並提出$e^{-4\lambda_l}$可得

$$\begin{aligned}
&\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=-F_l)\\
&-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=-F_l)\\
=&\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)\\
&-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)。 \quad (3.23)
\end{aligned}$$

因此當λ_l趨近於無窮大時, 第$2i$個組成項會趨近於

$$\frac{(\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l))^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)}。 \quad (3.24)$$

將 (3.21) 與 (3.24) 相加, 得到當λ_l趨近於無窮大時, σ^2中第$2i-1$個及第$2i$個組成項的合會趨近於

$$\frac{2(\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l))^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)}。 \quad (3.25)$$

接下來計算$\sigma^2_{(-l)}$中的每一個變異數組成項。設計$I=W_l$與平行平面$I=-W_l$之間的差集合其定義關係爲$I=-W_l$, 而此設計中的每一個混淆集合可表示爲:

第1個 : $I=W_{12}$, 第2個 : $F_l=W_{12}F_l$,

第3個 : $W_{21}=W_{22}$, 第4個 : $W_{21}F_l=W_{22}F_l$

$\vdots$ $\vdots$

第$2^{n-1}-1$個 : $W_{2^{n-2}1}=W_{2^{n-2}2}$, 第$2^{n-1}$個 : $W_{2^{n-2}1}F_l=W_{2^{n-2}2}F_l$,

注意其中每一個W_{ij}與前面計算σ^2時的W_{ij}是相同的。$\sigma^2_{(-l)}$中的第$2i-1$個變異數組成項可表示爲

$$\frac{(\Gamma(I=-W^l=W_{i1})-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}))^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1})-\Gamma(I=W^l=-W_{i1})}。$$

將其分子部份以F_l當生成元拆解並提出$e^{-4\lambda_l}$之後可得:

$$
\begin{aligned}
&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=-F_l)\\
&\quad-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=-F_l)\}^2\\
=&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)\\
&\quad-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)\}^2\\
=&\{(1+e^{-4\lambda_l})[\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)]\}^2,
\end{aligned}
$$

將其分母部份以F_l拆解並提出$e^{-4\lambda_l}$後可得:

$$
\begin{aligned}
&\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=W^l=W_{i1}=-F_l)\\
&\quad-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=-F_l)\\
=&\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)\\
&\quad-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)\\
=&(1+e^{-4\lambda_l})(\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)),
\end{aligned}
$$

將分子分母合併得到:

$$
\frac{(1+e^{-4\lambda_l})\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)\}^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}=F_l)}, \tag{3.26}
$$

此爲$\sigma^2_{(-l)}$中的第$2i-1$個組成項。相同的方法可使用在$\sigma^2_{(-l)}$中的第$2i$個變異數組成項, 其爲

$$
\frac{(\Gamma(I=-W^l=W_{i1}F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}F_l))^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1}F_l)-\Gamma(I=W^l=-W_{i1}F_l)}。
$$

將其分子部份以F_l拆解並提出$e^{-4\lambda_l}$後可得:

$$
\begin{aligned}
&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=-F_l)\\
&\quad-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=-F_l)\}^2\\
=&\{\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)+e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)\\
&\quad-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)-e^{-4\lambda_l}\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)\}^2\\
=&\{(1-e^{-4\lambda_l})[\Gamma(I=-W^l=W_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}=F_l)]\}^2,
\end{aligned}
$$

將其分母部份以F_l分解並提出$e^{-4\lambda_l}$後可得:

$$\begin{aligned}
&\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) + \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = -F_l) \\
&- \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = W^l = W_{i1} = -F_l) \\
=&\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) + e^{-4\lambda_l}\Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l) \\
&- \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l) - e^{-4\lambda_l}\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) \\
=&(1 - e^{-4\lambda_l})(\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l)),
\end{aligned}$$

將分子分母合併得到:

$$\frac{(1 - e^{-4\lambda_l})\{\Gamma(I = -W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = -W^l = -W_{i1} = F_l)\}^2}{\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l)}, \tag{3.27}$$

此爲$\sigma^2_{(-l)}$中的第$2i$個組成項。將$\sigma^2_{(-l)}$中第$2i-1$個組成項 (3.26) 式和第$2i$個組成項 (3.27) 式相加化簡得到

$$\frac{2(\Gamma(I = -W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = -W^l = -W_{i1} = F_l))^2}{\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l)}。 \tag{3.28}$$

以上發現 (3.25) 式等於 (3.28) 式, 因此當λ_l趨近於無窮大時, 對於不同的i, σ^2中第$2i-1$和$2i$個組成項相加都會趨近於$\sigma^2_{(-l)}$中第$2i-1$和$2i$個組成項相加, 所以σ^2會趨近於$\sigma^2_{(-l)}$。 □

定理 4. $\sigma^2_{(-l)}$恆等於$\sigma'^2_{(-l)}$。

證明. 對於$\sigma^2_{(-l)}$的組成項, 定理**3**的證明中已推導出第$2i-1$個及第$2i$個組成項之合爲 (3.28) 式。而在 (3.28) 式中, 每一個集合的定義關係皆包含$I = F_l$, 其代表差集合中的每一個差異向量, 其第l個元素e_l皆爲0, 所以每一個差異向量計算出的γ皆不包含$e^{-4\lambda_l}$。因此, 當因子個數爲n時, 計算$\Gamma(I = \pm W^l = \pm W_{i1} = F_l)$的值, 與抽離$F_l$而只考慮$n-1$個因子時, 計算$\Gamma(I = \pm W^l = \pm W_{i1})$的值是相同的。所以得到 (3.28) 式的值與將$F_l$從實驗抽離後計算

$$\frac{2(\Gamma(I = -W^l = W_{i1}) - \Gamma(I = -W^l = -W_{i1}))^2}{\Gamma(I = W^l = W_{i1}) - \Gamma(I = W^l = -W_{i1})}$$

的值是相同的。

接下來計算$\sigma'^2_{(-l)}$的組成項。當因子個數爲$n-1$時 (不考慮F_l), 設計$I = W^l$與平行平面$I = -W^l$之間的差集合其定義關係爲$I = -W^l$。而設計$I = W^l$中的混

淆集合爲:

$$\begin{aligned}
&\text{第1個}: I = W_{12},\\
&\text{第2個}: W_{21} = W_{22},\\
&\ \vdots\\
&\text{第}2^{n-2}\text{個}: W_{2^{n-2}1} = W_{2^{n-2}2},
\end{aligned}$$

注意其中每一個字串W_{ij}與定理**3**證明中的字串W_{ij}是相同的。故可得到${\sigma'}^2_{(-l)}$的第i個組成項表示爲

$$\frac{(\Gamma(I=-W^l=W_{i1})-\Gamma(I=-W^l=-W_{i1}))^2}{\Gamma(I=W^l=W_{i1})-\Gamma(I=W^l=-W_{i1})}。$$

由上式可看出, $\sigma^2_{(-l)}$中第$2i-1$與$2i$個組成項的合, 爲${\sigma'}^2_{(-l)}$中第i個組成項的兩倍。在 (3.4) 式中得知計算預測變異數爲1減掉其所有組成項的平均, 由於$\sigma^2_{(-l)}$中第$2i-1$與第$2i$個組成項的平均等於${\sigma'}^2_{(-l)}$中第i個組成項, 且$\sigma^2_{(-l)}$有2^{n-1}個組成項而${\sigma'}^2_{(-l)}$有2^{n-2}個組成項, 因此$\sigma^2_{(-l)}$中所有組成項的平均等於${\sigma'}^2_{(-l)}$中所有組成項的平均, 所以得到$\sigma^2_{(-l)}={\sigma'}^2_{(-l)}$。 □

結合定理**3**與定理**4**可得知, 當λ_l趨近於無限大時, σ^2會趨近於${\sigma'}^2_{(-l)}$。這表示若使用定義關係爲$I=F_1F_2\cdots F_n$的2^{n-1}部份因子設計, 當λ_l很大時, 我們可視爲把F_l從生成元中移除並且忽略F_l去計算預測變異數, 簡單的說就是將因子F_l從整個實驗中移除。

例 6. 在因子爲F_1, F_2, F_3, F_4的實驗中, 使用定義關係爲

$$I = F_1F_2F_3F_4$$

的2^{4-1} 部份因子設計時, 若λ_4很大, 從定理**3**中得知預測變異數會很接近定義關係爲 $I=F_1F_2F_3$的2^{4-1}部份因子設計。另外定理**4**又說明, 定義關係爲$I=F_1F_2F_3$的2^{4-1}部份因子設計下得到的預測變異數, 會等於只有三個因子F_1', F_2', F_3'下使用定義關係爲$I=F_1'F_2'F_3'$的2^{3-1}部份因子設計。因此在原本的設計中, 當λ_4很大時, 得到的預測變異數可視爲將因子F_4從整個實驗中移除後得到的預測變異數。

3.3.2 變異數隨定義字串長度的改變

以下定理說明, 所有2^{n-1}部份因子設計中, 定義關係爲$I=F_1F_2\cdots F_n$的部份因子設計具有最小的預測變異數。若任意從定義字串中移除一些因子使得定義字

串的字長變短, 則得到的預測變異數會變大。此定理可以作爲挑選2^{n-1}部份因子設計的準則。

定理 5. 對於一個2^{n-1}部份因子設計, 若其定義字串長度越長, 則預測變異數會越小。

證明. 根據定理**3**, 當λ_l趨近於無限大時, 得到的預測變異數可視爲將F_l從定義字串中抽掉後得到的預測變異數。因此, 使用$I = F_1F_2\cdots F_n$的部份因子設計時, 對於任意的$l = 1, \ldots, n$, 以下證明只要λ_l變大, 則預測變異數也會隨著遞增。

在$I = F_1F_2\cdots F_n$的部份因子設計下, 預測變異數中第$2i-1$和第$2i$個組成項的分子及分母部份分別爲定理**3**證明中的 (3.19)(3.20)(3.22)(3.23) 四式, 故這兩個組成項相加可表示爲

$$\frac{(a+be^{-4\lambda_l})^2}{b+ae^{-4\lambda_l}} + \frac{(a-be^{-4\lambda_l})^2}{b-ae^{-4\lambda_l}}, \tag{3.29}$$

其中

$$\begin{aligned} a &= \Gamma(I = -W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = -W^l = -W_{i1} = F_l), \\ b &= \Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l)。 \end{aligned} \tag{3.30}$$

因爲這些組成項在變異數公式中是以負數的方式呈現, 所以對 (3.29) 式取負號後對λ_l微分, 得到

$$\frac{16b(a^2-b^2)^2e^{-8\lambda_l}}{(b^2+a^2e^{-8\lambda_l})^2}。 \tag{3.31}$$

由於 (3.30) 式中b計算在定義關係爲$I = W^l = F_l$的2^{n-2}部份因子設計中, 包含字串W_{i1}的混淆集合所對應到的$\mathbf{X}_{\cdot i}$之特徵值, 所以b大於0。而$(a^2-b^2)^2$的部份分解後得到$(a+b)^2(a-b)^2$, 其中

$$\begin{aligned} a+b =& \Gamma(I = -W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = -W^l = -W_{i1} = F_l) \\ & + \Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l) \\ =& [\Gamma(I = W^l = W_{i1} = F_l) + \Gamma(I = -W^l = W_{i1} = F_l)] \\ & - [\Gamma(I = W^l = -W_{i1} = F_l) + \Gamma(I = -W^l = -W_{i1} = F_l)] \\ =& \Gamma(I = W_{i1} = F_l) - \Gamma(I = -W_{i1} = F_l), \end{aligned}$$

由上式可發現, $a+b$事實上是在計算定義關係為$I=F_l$的2^{n-1}部份因子設計中, 包含字串W_{i1}的混淆集合所對應到之$\mathbf{X}_{\cdot i}$的特徵值, 所以$a+b$亦大於0。同樣的方法使用於$b-a$上可得到

$$b-a=\Gamma(I=W^lW_{i1}=F_l)-\Gamma(I=-W^lW_{i1}=F_l),$$

故$b-a$事實上是在計算定義關係為$I=F_l$的2^{n-1}部份因子設計中, 包含字串W^lW_{i1}的混淆集合所對應到之$\mathbf{X}_{\cdot i}$的特徵值, 所以$b-a$亦大於0, 因此$(a+b)^2(a-b)^2$的值恆大於0。故可得 (3.31) 式的值恆大於0, 所以預測變異數會隨著λ_l遞增而遞增。這表示若將F_l從定義字串中除去, 變異數會變大。

同理, 將任意幾個因子從定義字串中移除, 可視為這些因子對應到的複雜度參數λ_i升高至無窮大, 這會造成預測變異數變大, 故得證。 □

3.4 2^{n-k}下的預測變異數

上一小節中, 推導出幾個2^{n-1}部份因子設計下預測變異數的性質。在這裡, 將要把這些性質推廣到2^{n-k}部分因子設計下。2^{n-k}與2^{n-1}不同的地方, 除了定義字串個數不同之外, 2^{n-k}比2^{n-1}多了2^k-2個平行平面需計算預測變異數。所以一般來說在2^{n-k}部份因子設計下最多會有2^k-1種不同的預測變異數, 與2^{n-1}部份因子設計下只有一種預測變異數有很大的不同。以下為定理**3**以及定理**4**的推廣。

若一實驗中有n個二水準因子$F_1,F_2,\cdots,F_n$, 若將定義關係為$I=G_1=G_2=\cdots=G_k$的2^{n-k}部份因子設計中所有的水準組合視為實驗點, 此設計可得到2^k-1個預測變異數 (同一個平行平面下得到的預測變異數視為同一個), 令其變異數形成的集合為Σ。若任意挑選$l\in\{1,2,\cdots,n\}$, 對於定義關係為$I=G_1^l=G_2^l=\cdots=G_k^l$的$2^{n-k}$部份因子設計, 其中$G_i^l$為從$G_i$上扣除$F_l$後所得到的字串, 若將此設計中所有的水準組合視為實驗點, 也可得到2^k-1個預測變異數, 令其2^k-1個預測變異數形成的集合為$\Sigma_{(-l)}$。若把因子F_l從實驗中抽離, 只考慮$n-1$個因子之實驗, 為了清楚區分, 我們標示此$n-1$個因子為$F_1',F_2',\cdots,F_{l-1}',F_{l+1}',\cdots,F_n'$, 若將定義關係為$I=G_1^l=G_2^l=\cdots=G_k^l$的$2^{(n-1)-k}$部份因子設計中所有的水準組合視為實驗點, 也可得到2^k-1個預測變異數, 令其2^k-1個預測變異數形成的集合為$\Sigma_{(-l)}'$。以下定理**6**證明當因子F_l的複雜度參數λ_l趨近於無限大時, 則Σ會趨近於$\Sigma_{(-l)}$。而定理**7**證明$\Sigma_{(-l)}$恆等於$\Sigma_{(-l)}'$。因此, 當λ_l趨近於無限大時, Σ亦會趨近於$\Sigma_{(-l)}'$。

定理 6. 當因子F_l的複雜度參數λ_l趨近於無限大時, 則Σ會趨近於$\Sigma_{(-l)}$。

證明. 這裡使用的證明方式與定理**3**中相同。在定義關係爲$I = G_1 = G_2 = \cdots = G_k$的$2^{n-k}$部份因子設計中, 任意挑選一組$(\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_k)$, 考慮定義關係爲$I = \delta_1 G_1 = \delta_2 G_2 = \cdots = \delta_k G_k$的平行平面, 令此平面中任意水準組合計算出的預測變異數爲σ^2, 則$\sigma^2 \in \Sigma$, 對於$i = 1, 2, \cdots, 2^{n-k-1}$, σ^2中第$2i-1$個組成項可表示爲

$$\frac{(\Gamma(I = \delta_1 G_1 = \cdots = \delta_k G_k = W_{i1}) - \Gamma(I = \delta_1 G_1 = \cdots = \delta_k G_k = -W_{i1}))^2}{\Gamma(I = G_1 = \cdots = G_k = W_{i1}) - \Gamma(I = G_1 = \cdots = G_k = -W_{i1})}, \tag{3.32}$$

而σ^2中第$2i$個組成項可表示爲

$$\frac{(\Gamma(I = \delta_1 G_1 = \cdots = \delta_k G_k = W_{i1} F_l) - \Gamma(I = \delta_1 G_1 = \cdots = \delta_k G_k = -W_{i1} F_l))^2}{\Gamma(I = G_1 = \cdots = G_k = W_{i1} F_l) - \Gamma(I = G_1 = \cdots = G_k = -W_{i1} F_l)}。 \tag{3.33}$$

其中W_{i1}爲第$2i-1$個混淆集合中不包含F_l的任一個字串 (可參考定理**3**證明中的W_{i1})。另外, 在定義關係爲$I = G_1^l = G_2^l = \cdots = G_k^l$的$2^{n-k}$部份因子設計中, 考慮定義關係爲$I = \delta_1 G_1^l = \delta_2 G_2^l = \cdots = \delta_k G_k^l$的平行平面, 令此平面中任意水準組合計算出的預測變異數爲$\sigma^2_{(-l)}$, 則$\sigma^2_{(-l)} \in \Sigma_{(-l)}$, $\sigma^2_{(-l)}$中第$2i-1$個組成項可表示爲

$$\frac{(\Gamma(I = \delta_1 G_1^l = \cdots = \delta_k G_k^l = W_{i1}) - \Gamma(I = \delta_1 G_1^l = \cdots = \delta_k G_k^l = -W_{i1}))^2}{\Gamma(I = G_1^l = \cdots = G_k^l = W_{i1}) - \Gamma(I = G_1^l = \cdots = G_k^l = -W_{i1})}, \tag{3.34}$$

而$\sigma^2_{(-l)}$中第$2i$個組成項可表示爲

$$\frac{(\Gamma(I = \delta_1 G_1^l = \cdots = \delta_k G_k^l = W_{i1} F_l) - \Gamma(I = \delta_1 G_1^l = \cdots = \delta_k G_k^l = -W_{i1} F_l))^2}{\Gamma(I = G_1^l = \cdots = G_k^l = W_{i1} F_l) - \Gamma(I = G_1^l = \cdots = G_k^l = -W_{i1} F_l)}。 \tag{3.35}$$

接下來利用與定理**3**中相同的推導方式, 即可得到當λ_l趨近於無限大時, (3.32) 與 (3.33) 式的合會趨近於 (3.34) 與 (3.35) 式的合, 代表σ^2會趨近於$\sigma^2_{(-l)}$。由於任意的$(\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_k)$都滿足以上的結果, 故可得到當$\lambda_l$趨近於無限大時, 則$\Sigma$會趨近於$\Sigma_{(-l)}$。 □

定理 7. $\Sigma_{(-l)}$恆等於$\Sigma'_{(-l)}$

證明. 若把因子F_l從實驗中抽離, 只考慮$n-1$個因子$F'_1, F'_2, \cdots, F'_{l-1}, F'_{l+1}, \cdots,$ F'_n時, 對於定義關係爲$I = G^l_1 = G^l_2 = \cdots = G^l_k$的$2^{(n-1)-k}$部份因子設計, 考慮定義關係爲$I = \delta_1 G^l_1 = \delta_2 G^l_2 = \cdots = \delta_k G^l_k$的平行平面, 令此平面中任意水準組合計算出的預測變異數爲$\sigma'^2_{(-l)}$, 則$\sigma'^2_{(-l)} \in \Sigma'_{(-l)}$, 對於$i = 1, 2, \cdots, 2^{(n-1)-k}$, $\sigma'^2_{(-l)}$中第i個組成項可表示爲

$$\frac{(\Gamma(I = \delta_1 G^l_1 = \cdots = \delta_k G^l_k = W_{i1}) - \Gamma(I = \delta_1 G^l_1 = \cdots = \delta_k G^l_k = -W_{i1}))^2}{\Gamma(I = \delta_1 G^l_1 = \cdots = \delta_k G^l_k = W_{i1}) - \Gamma(I = \delta_1 G^l_1 = \cdots = \delta_k G^l_k = -W_{i1})}。 \tag{3.36}$$

其中W_{i1}與定理**6**證明中的W_{i1}爲相同的字串。接下來利用與定理**4**證明中相同的推導方式, 即可得到 (3.34) 與 (3.35) 式的平均等於 (3.36) 式, 代表$\sigma^2_{(-l)}$會等於$\sigma'^2_{(-l)}$。由於任意的$(\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_k)$都滿足以上的結果, 所以$\Sigma_{(-l)}$等於$\Sigma'_{(-l)}$。 □

結合定理**6**與定理**7**可得到, 當λ_l趨近於無限大時, Σ會趨近於$\Sigma'_{(-l)}$。這表示對於使用任意的部份因子設計, 當λ_l很大 (亦即F_l的重要性提高時), 我們可將得到的預測變異數視爲把F_l從整個實驗中移除後得到的預測變異數。

例 7. 考慮五個二水準因子$F_1, F_2, \cdots, F_5$的實驗, 在定義關係爲

$$I = F_1F_2F_3 = F_3F_4F_5$$

的2^{5-2}部份因子設計中, 令三個平行平面$I = F_1F_2F_3 = -F_3F_4F_5$、$I = -F_1F_2F_3 = F_3F_4F_5$以及$I = -F_1F_2F_3 = -F_3F_4F_5$計算出的預測變異數分別爲$\sigma^2_1$、$\sigma^2_2$以及$\sigma^2_3$。若將因子$F_5$從實驗中移除(從生成元中刪除並且忽略該因子), 則原本的設計變成定義關係爲

$$I = F'_1F'_2F'_3 = F'_3F'_4$$

的2^{4-2}部份因子設計, 其三個平行平面爲$I = F'_1F'_2F'_3 = -F'_3F'_4$、$I = -F'_1F'_2F'_3 = F'_3F'_4$以及$I = -F'_1F'_2F'_3 = -F'_3F'_4$。令這三個平行平面下計算出的預測變異數分別爲$\sigma'^2_{(-5)1}$、$\sigma'^2_{(-5)2}$以及$\sigma'^2_{(-5)3}$, 利用定理**6**與定理**7**的結果可知, 當λ_5很大時, σ^2_1、σ^2_2以及σ^2_3分別會很接近$\sigma'^2_{(-5)1}$、$\sigma'^2_{(-5)2}$以及$\sigma'^2_{(-5)3}$。

關於定理**5**的結果, 在這裡比較難作推廣, 因爲對於2^{n-k}部份因子設計, 有多個不同平行平面下的預測變異數, 不容易比較不同設計之間預測變異數的大小。若要以理論推導方式來發展挑選2^{n-k}部份因子設計的準則有些困難。不過根據下一章的數值觀察, 我們將會發現, 若2^{n-k}部份因子設計其每個定義字串越長的話, 較容易使每個預測變異數的值較小, 此現象與定理**5**的結果是有點類似的。

第 4 章

挑選設計

本章所要討論挑選設計的依據, 是使預測變異數儘可能地降低。在克利金模型下, 針對2^{n-1}部份因子設計, 定理**5**已經證明出定義字串越長則預測變異數越低, 所以$I = F_1F_2\cdots F_n$會是一個最理想的設計。接下來在本章中, 我們會把重點放在挑選2^{n-k}部份因子設計上。

在2^{n-k}部份因子設計下, 每一個設計都會有2^k-1種預測變異數, 因此在比較哪一個設計較好時, 並不像2^{n-1}的情形, 只需比較一個預測變異數的大小。以下我們考慮幾種準則, 例如: 哪一種設計擁有最小的最大預測變異數? 哪一種設計擁有最小的平均預測變異數? 何者爲最適合的準則, 則可視實驗的需求而決定。不論使用哪一個比較準則, 若要用理論推導方式求得這些挑選準則下的最優設計, 較爲困難。所以在本章中, 我們將觀察一些數值計算的結果配合前一章的結論, 來建議較好的設計。

4.1 因子複雜度相同

一開始, 先討論每個因子複雜程度皆相同的情況, 即每個因子的λ_i都是一樣的, 令$\lambda = \lambda_1 = \cdots = \lambda_n$。以下我們利用一個例子來觀察三個$2^{6-2}$部份因子設計之預測變異數隨著$\lambda$改變的變化過程。這三個設計的定義對比子群爲:

$$D_1 : I = F_1F_2F_3F_5 = F_1F_2F_4F_6 = F_3F_4F_5F_6$$

$$D_2 : I = F_1F_2F_5 = F_3F_4F_6 = F_1F_2F_3F_4F_5F_6$$

$$D_3 : I = F_1F_2F_3 = F_3F_4F_6 = F_1F_2F_4F_6$$

其預測變異數依 (1.2) 式計算出的值如圖4.1所示, 每個設計分別會有三條線 (因爲每個設計分別有三個平行平面, 所以有三種預測變異數)。由於這裡假設每個因

子的λ_i皆相同, 因此會產生某些平行平面的預測變異數相同的情形, 故圖中有些線會重疊在一起。圖4.1中D_1的三條線皆重疊在一起, D_2以及D_3較下方的線上, 都有兩條線重疊在一起。

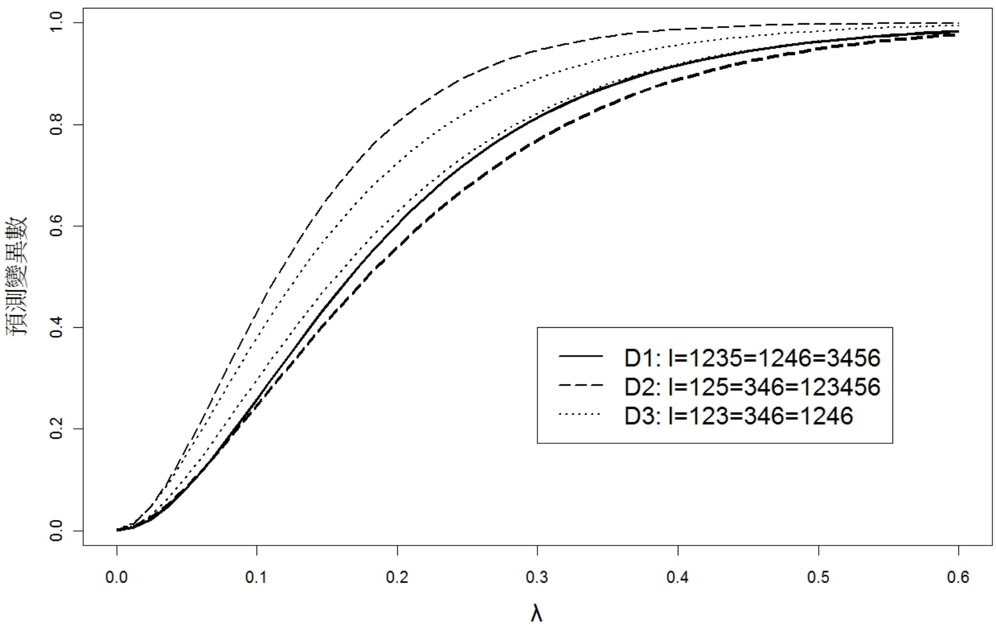

圖 **4.1:** 2^{6-2}部份因子設計下的預測變異數

從圖4.1中可以看出, D_3的每一條線都在D_1的三條線上方, 也就是D_1擁有較小的預測變異數, 所以可以很明顯地判斷出D_1比D_3好。再來觀察D_1的每一個定義字串都比D_3長或相等, 這也就是上一章中提到定義字串越長越容易有較小的預測變異數。

但D_1跟D_2就沒有這麼容易比較, 因爲D_2有兩條線在D_1的下方, 但有一條線比D_1高出很多。也就是D_2設計下, 會有兩個平行平面中水準組合估計出的預測值較準確, 但有另一個平行平面的預測變異數較大。在這種情況下, 可使用之前提到的大中取小(minimax) 或平均預測變異數準則, 來挑選較佳的設計。

4.1.1 最小偏差準則

在本小節中, 我們要由另一個觀點建議一個挑選設計的方法, 此方法利用固定效應模型下最常用到的最小偏差準則之概念, 以下將說明原因。

首先亦由實例出發, 我們觀察幾個2^{n-2}部份因子設計 (在這裡觀察的範圍n從6到10)。在給定λ都等於0.1的時候, 計算每一種設計下所有水準組合的預測變異數,

再把這些變異數之平均值、最大值、平方和算出來, 其中平方和定義爲所有預測變異數取平方後再做加總, 由其可知道關於預測變異數分散範圍大小的資訊。計算出的部份結果列於表4.1, 此表擷取了每一個n下偏差最小的三個設計。由表4.1會發現對於每一個因子個數n, 都是最小偏差設計具有最小的平均值、最大值、平方和。以同樣的方法觀察2^{n-3}部份因子設計, 我們也得到相同的結果, 如表4.2所示。

表4.1跟表4.2都是給定λ等於0.1下計算出來的結果, 我們亦觀察其他的λ值 (如$\lambda = 0.3$或0.5) 計算出來的結果也是一樣, 都是最小偏差的設計表現最好。

4.2 因子複雜度不同

若允許每個因子的λ_i可以不相同時, 以下我們先觀察兩個2^{5-2}部份因子設計:

$$D_1 : I = F_1F_2F_3 = F_1F_4F_5 = F_2F_3F_4F_5,$$
$$D_2 : I = F_1F_2F_5 = F_3F_4F_5 = F_1F_2F_3F_4\text{。}$$

這兩個設計都爲最小偏差設計, 在每一個λ_i都是相同的情況下, 很明顯的, 這兩種設計計算出來的預測變異數會相同, 故不論挑選哪一個設計, 由預測變異數的觀點, 都沒有差別。但若λ_5比其他因子的λ_i還大時, 這兩種設計則會有不同的預測變異數, 這時候就需要比較哪一個才會是較佳的設計。由這個例子可了解, 若λ_i不相同時光是使用最小偏差準則來挑選設計是不夠的, 因爲此準則沒有考慮到因子複雜程度不同的問題。

以下我們考慮

$$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5) = (t, t, t, t, 2t)$$

的情形來計算上述例子的預測變異數, 其中$t > 0$爲變數, 計算結果如圖4.2所示。由圖4.2我們發現隨著t的變大, D_1的三條線會很接近

$$D_3 : \ I = F_1F_2F_3 = F_1F_4 = F_2F_3F_4$$

的三條線, 注意這裡的D_3是把D_1的定義對比子群中F_5移除後所得到的設計。同樣地D_2的三條線也會很接近

$$D_4 : \ I = F_1F_2 = F_3F_4 = F_1F_2F_3F_4$$

的三條線, 這裡的D_4亦是將D_2的定義對比子群中F_5移除後得到的設計。請注意此性質在定理**6**中曾經提及。另外在定理**7**中也曾提到, 當λ_5很大時, 可視爲將因

表 **4.1:** 2^{n-2}部份因子設計下觀察預測變異數

2^{n-2}	生成元	字長型態	平均值	最大值	平方和
2^{6-2}	$5 = 234$ $6 = 134$	(0,3,0,0)	0.2586	0.2586	3.209
	$5 = 34$ $6 = 124$	(1,1,1,0)	0.2732	0.3378	3.729
	$5 = 34$ $6 = 12$	(2,0,0,1)	0.3069	0.4303	4.886
2^{7-2}	$6 = 345$ $7 = 1245$	(0,1,2,0)	0.2110	0.2301	4.344
	$6 = 345$ $7 = 125$	(0,2,0,1)	0.2255	0.2894	5.079
	$6 = 345$ $7 = 245$	(0,3,0,0)	0.2586	0.2586	6.417
2^{8-2}	$7 = 3456$ $8 = 1256$	(0,0,2,1,0)	0.1683	0.1923	5.492
	$7 = 456$ $8 = 12356$	(0,1,0,2,0)	0.1832	0.2138	6.801
	$7 = 456$ $8 = 1236$	(0,1,1,0,1)	0.1903	0.2519	7.419
2^{9-2}	$8 = 34567$ $9 = 12567$	(0,0,0,3,0,0)	0.1351	0.1351	7.009
	$8 = 34567$ $9 = 124567$	(0,0,1,1,1,0)	0.1413	0.1709	7.907
	$8 = 4567$ $9 = 1234567$	(0,0,2,0,0,1)	0.1541	0.2078	9.671
2^{10-2}	$9 = 45678$ $10 = 123678$	(0,0,0,1,2,0)	0.1101	0.1188	9.424
	$9 = 45678$ $10 = 12378$	(0,0,0,2,0,1)	0.1168	0.1463	10.82
	$9 = 45678$ $10 = 23678$	(0,0,0,3,0,0)	0.1351	0.1351	14.02

表 **4.2:** 2^{n-3}部份因子設計下觀察預測變異數

2^{n-3}	生成元	字長型態	平均值	最大值	平方和
2^{7-3}	$5=234$ $6=134$ $7=124$	(0,7,0,0)	0.3478	0.3478	13.55
	$5=34$ $6=24$ $7=123$	(2,3,2,0)	0.3758	0.4954	16.23
	$5=34$ $6=24$ $7=13$	(3,2,1,1)	0.3962	0.5105	18.20
2^{8-3}	$6=345$ $7=1245$ $8=1235$	(0,3,4,0)	0.3067	0.3188	21.27
	$6=345$ $7=245$ $8=135$	(0,5,0,2)	0.3267	0.4203	24.42
	$6=345$ $7=245$ $8=145$	(0,7,0,0)	0.3474	0.4017	27.52
2^{9-3}	$7=456$ $8=2356$ $9=1346$	(0,1,4,2,0,0)	0.2655	0.2896	32.06
	$7=456$ $8=236$ $9=1356$	(0,2,3,1,1,0)	0.2820	0.3763	36.71
	$7=456$ $8=2356$ $9=123$	(0,2,4,0,0,1)	0.2910	0.3712	39.09
2^{10-3}	$8=4567$ $9=2367$ $10=1357$	(0,0,3,3,1,0)	0.2263	0.2570	46.53
	$8=1234567$ $9=4567$ $10=2367$	(0,0,4,2,0,1)	0.23605	0.3145	51.00
	$8=567$ $9=23467$ $10=13457$	(0,1,0,6,0,0)	0.2314	0.2659	49.40

子F_5從實驗中移除。因此隨著t越來越大時, 上述例子中比較兩種2^{5-2}部份因子設計D_1及D_2的問題, 可簡化爲在4個因子下, 比較D_3以及D_4這兩種2^{4-2}部份因子設計, 這時候就可視爲4個因子有相同的因子複雜度而以上一節的方法來比較。

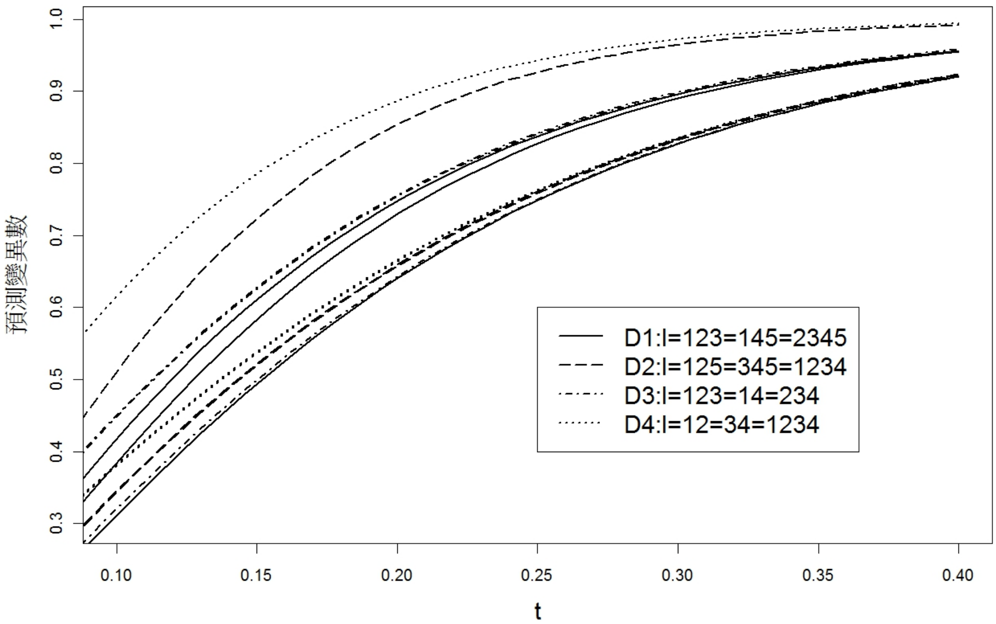

圖 **4.2:** 2^{5-2}部份因子設計下的預測變異數

藉由觀察圖4.2, 我們提出以下兩個挑選設計的概念,

1. 當所有因子的λ_i都很小時 (例如皆小於0.1), 透過數値觀察會發現, 預測變異數不會隨著因子複雜度不同而有太大改變。因此可視爲複雜度相同來挑選設計。

2. 當某些因子的λ_i很大時 (例如大於0.4), 可將這些因子從整個實驗中移除後再挑選設計。

利用以上兩點, 就可以推測出當因子複雜程度不同時, 預測變異數會如何改變 ,進而用來改善上一小節的最小偏差。藉由以上兩點, 以下我們提出階段式挑選設計方法。

4.2.1 階段式挑選設計

若現在實驗中只有一個因子F_{i^*}的λ_{i^*}較大, 其他因子的λ_i都較小。首先考慮兩種情況, 第一種是λ_{i^*}可視爲跟其他因子的複雜度差不多, 第二種是λ_{i^*}遠大於其他

的λ_i, 這時可以視爲需將F_{i^*}由定義對比子群中移除。接著, 若能找到一個設計, 不論在以上哪一種情況都有不錯的表現, 就可以推斷該設計在λ_{i^*}從小到大的變化中都能表現得不錯。故若以最小偏差的概念當成挑選設計的準則, 則不論將F_{i^*}從實驗中移除 (從定義對比子群中刪除並且忽略該因子) 與否, 都能滿足最小偏差的設計, 可視爲最佳的設計。以下舉個例子說明。

例 8. 一個2^{7-2}部份因子設計的最小偏差設計爲

$$D_1: \ I = F_1F_2F_3F_4 = F_1F_2F_5F_6F_7 = F_3F_4F_5F_6F_7,$$

把F_7從實驗中移除得到的2^{6-2}部份因子設計爲

$$I = F_1F_2F_3F_4 = F_1F_2F_5F_6 = F_3F_4F_5F_6,$$

其也是所有2^{6-2}部份因子設計中的最小偏差設計。在F_7之外的其他因子的$\lambda_i, 1 \leq i \leq 6$, 很小且固定的情況下, 當$\lambda_7$很小時, D_1跟所有2^{7-2}部份因子設計比較, 會有較小的預測變異數。而當λ_7無限大時, 此設計跟所有2^{7-2}部份因子設計比較, 亦會有較小的預測變異數 (因爲其他2^{7-2}部份因子設計移除F_7後不一定是2^{6-2}下的最小偏差設計)。因此就可推論在λ_7從小到大的變化過程中, 此設計的表現都會不錯。

爲了支持以上的推論, 我們在此以另一個2^{7-2}的最小偏差設計

$$D_2: \ I = F_1F_2F_3F_7 = F_1F_2F_4F_5F_6 = F_3F_4F_5F_6F_7$$

來與前者比較。假設

$$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7) = (t, t, t, t, t, t, 2t),$$

計算出這兩個設計下預測變異數的最大值、平均值、平均方, 接著再把D_2得到的數據與D_1相減, 結果如圖4.3所示。從圖4.3中可看出每一條線都大於0, 也就是D_2的表現都比D_1還差。與其他設計作比較時, 也都得到類似的結果, 因此在這個情況下, D_1確實爲最佳設計。

以上只考慮一個因子複雜度很大時挑選設計的方法, 當很多因子複雜度較高且有高低順序時也可利用相同的概念來推廣。若現在有n個因子欲挑選2^{n-k}部份因子設計, 假設$F_1, F_2, \cdots, F_m$皆爲複雜度很低的因子, 而複雜度較高的因子由小到大分別爲 $F_{m+1}, F_{m+2}, \cdots, F_n$, 則我們分階段來挑選設計, 步驟如下:

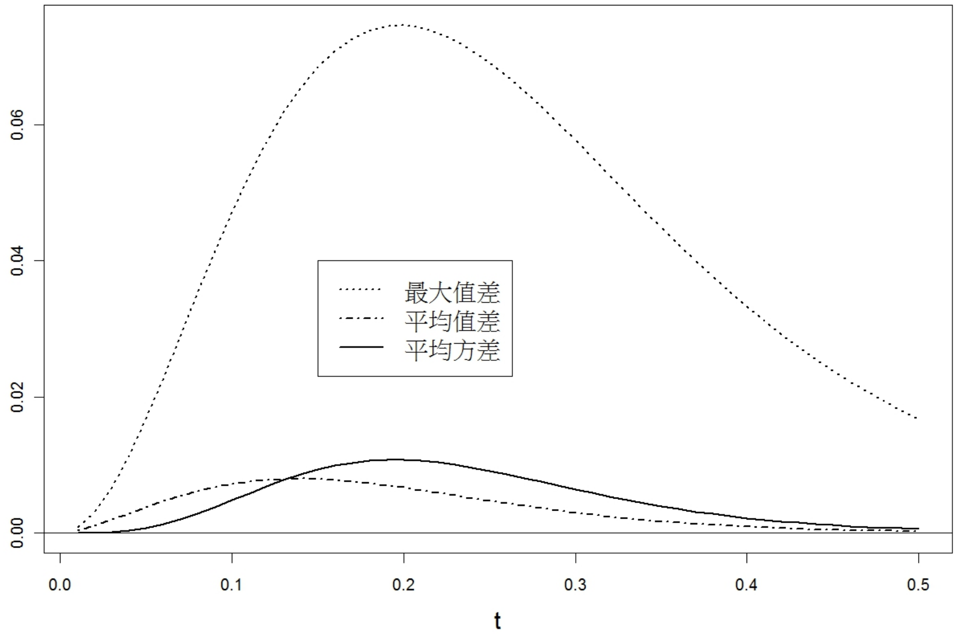

圖 **4.3:** 兩個2^{7-2}最小偏差設計比較結果

步驟1 挑選所有$F_1, F_2, \cdots, F_m$的最小偏差2^{m-k}設計。

步驟2 從步驟1得到的定義對比子群中適當地在某些字串中加入F_{m+1}, 並使之成爲具最小偏差性質的$2^{(m+1)-k}$部份因子設計。

步驟3 重覆步驟2的作法, 依序加入因子使之成爲最小偏差設計, 一直到完成2^{n-k}部份因子設計。

若因子複雜度大小爲一群一群的排序, 則以上的步驟可改爲一次加入一群因子使之滿足最小偏差性質。

以下解釋使用此方法的主要原因。針對每一個複雜度較高的因子, 考慮以下兩種情況: 第一種是其λ_i並不大且可跟$F_1, F_2, \cdots, F_m$視爲有類似的複雜度, 第二種是其λ_i很大故可視爲需將該因子從定義對比子群中移除。在以上的兩種情況下, 若使用此步驟挑選設計, 則不論有多少個因子的複雜度大到需從定義對比子群中移除, 都能保證剩下複雜度較低的因子之定義對比子群滿足最小偏差的性質。因此, 可推論在此複雜度順序下, 隨著λ_i從小到大的變化中, 此設計都能表現得不錯。

例 9. 假設一實驗中有8個二水準因子, 想要挑選2^{8-2}部份因子設計。已知8個因子

的複雜程度排列如下:

$$F_1, F_2, F_3, F_4 \ < \ F_5 \ < \ F_6, F_7 \ < \ F_8$$

接著套用階段式挑選設計的步驟, 過程如下:

步驟1 用$F_1, F_2, \cdots, F_4$這4個因子, 可建構出某個最小偏差的2^{4-2}設計

$$I = F_1F_2 = F_1F_3F_4 = F_2F_3F_4。$$

步驟2 接著在上面的定義對比子群中, 適當地加入F_5並使之成爲滿足最小偏差的2^{5-2}設計之定義對比子群

$$I = F_1F_2F_5 = F_1F_3F_4 = F_2F_3F_4F_5。$$

步驟3 接著同時適當地加入F_6跟F_7, 並得到最小偏差的2^{7-2}設計

$$I = F_1F_2F_5F_6 = F_1F_3F_4F_6F_7 = F_2F_3F_4F_5F_7。$$

步驟4 最後再適當地加入F_8得到

$$I = F_1F_2F_5F_6F_8 = F_1F_3F_4F_6F_7 = F_2F_3F_4F_5F_7F_8。$$

此即爲最佳的2^{8-2}部份因子設計。爲了檢查以上的設計 (稱爲D_0) 之表現, 我們將其與以下三個2^{8-2}最小偏差設計比較:

$$D_1 : I = F_1F_3F_4F_5F_6 = F_1F_2F_6F_7F_8 = F_2F_3F_4F_5F_7F_8$$

$$D_2 : I = F_1F_2F_5F_6F_8 = F_3F_4F_5F_6F_7 = F_1F_2F_3F_4F_7F_8$$

$$D_3 : I = F_1F_2F_6F_7F_8 = F_3F_4F_5F_6F_7 = F_1F_2F_3F_4F_5F_8$$

比較的方法與例**8**中相同, 而這裡是假設

$$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7, \lambda_8) = (t, t, t, t, 1.3t, 1.6t, 1.6t, 2t),$$

比較結果如圖4.4。在圖4.4中, 由左到右分別爲D_1與D_0的比較, D_2與D_0的比較, D_3與D_0的比較。由圖4.4可看出每一條線都是大於0, 也就是D_0不論與哪一個設計相比都是表現最好的。

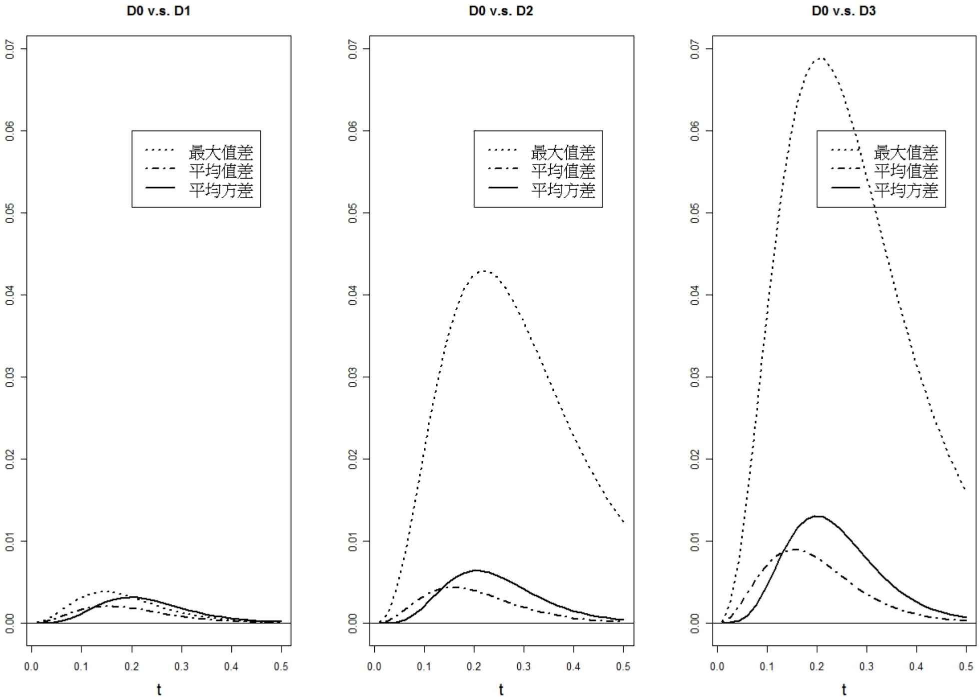

圖 **4.4:** 2^{8-2}最小偏差設計比較結果

另外從圖4.4中還會發現, 每一個圖中的三條曲線從左到右越來越高。仔細觀察這三個用來比較的設計, 分別由它們的定義對比子群中把複雜度較高之因子移除後來比較。首先是D_1, 當D_1把F_5, F_6, F_7, F_8這些因子拿掉後, 它符合2^{4-2}的最小偏差設計, 把F_6, F_7, F_8抽離時則不符合最小偏差設計, 把F_8抽離時又符合最小偏差設計。若以由階段式設計的觀點來看D_1, 它在步驟2時不符合最小偏差, 其他步驟都符合。同樣的, D_2是在步驟1時不符合最小偏差, D_3則是步驟1跟步驟2都不符合最小偏差。從這裡可以觀察出, 越多步驟違反最小偏差的準則, 則挑選出來的設計與最佳設計相差越多, 另外越前面的步驟也有越重要的趨勢 (從D_1跟D_2的差別中可看出)。

第 5 章

結論

本論文希望在隨機域模型下, 透過觀察預測變異數來挑選2^{n-k}部份因子設計, 找出使預測變異數最低的設計。當$k = 1$時, 僅有一個預測變異數, 我們證明此時使用長度最長的字串當作生成元, 即可得到最低的預測變異數。當$k \geq 2$時, 會有$2^k - 1$個預測變異數, 因此較不容易比較不同設計間預測變異數的大小。若每個因子的複雜度參數λ_i皆相同時, 整體的預測變異數, 在利用最小偏差作為挑選設計的準則下, 會呈現較好的結果。而在每個因子的λ_i不同的情況下, 也可利用階段式法挑選最小偏差設計, 達到較好的結果。本文中並未以未知參數λ_i的估計能力好壞當做選取設計的準則, 要如何挑選設計才能使得估計出來的λ_i能夠最準確或最輕微的混淆, 是未來可研究的方向。

參考文獻

Fang, K. T., Li, R., and Sudjianto, A. (2006), *Design and Modeling for Computer Experiments*, Chapman & Hall/CRC.

Mukerjee, R. and Wu, C. F. J. (2006), *A Modern Theory of Factorial Designs*, Springer.

Santner, T. J., Williams, B. J., and Notz, W. I. (2003), *The Design and Analysis of Computer Experiments*, Springer.

Wang, W. T. (2009), "Effect aliasing in random field model", Master's thesis, National Tsing Hua University.

Wu, C. F. J. and Hamada, M. S. (2009), *Experiments: Planning, Analysis, and Optimization*, Wiley Series.