

# 國立清華大學

## 碩士論文

題目：隨機域模型下非正規部分因子設計之效  
應重要性及混淆

The Importance of Effects under Random  
Field Models and Their Aliasing in  
Nonregular Designs

所 別： 統計學研究所 組別：工業統計組

指導教授： 鄭少為(Shao-Wei Cheng) 博士

姓 名： 宋治立(Chih-Li Sung)

學 號： 9724502

中華民國九十九年七月

## 摘要

在實驗設計中，經常因為成本上的考量無法執行完全因子設計，而必須選擇實驗次數較少的部分因子設計。與完全因子設計相比，部分因子設計中會產生效應混淆的情形。在傳統實驗設計中常使用的固定效應模型下，效應混淆的性質已有完整且有系統的討論與發展。然而在電腦實驗設計中，經常使用的模型是隨機域模型，而在隨機域模型下，該如何發展及討論效應混淆的情形，在文獻上則較少有深入的探討。Wang (2009)論文中討論了在隨機域模型下，二水準的正規設計中的效應混淆情形，在本論文中我們將推廣至更一般的部分因子設計。我們將在本論文中討論多水準因子在隨機域模型下各種效應的重要性，並對任意的部分因子設計提出方法來觀察隨機域模型下的效應混淆程度。

## 致謝辭

感謝我的指導老師：鄭少為老師。您清晰的思考以及做事的熱忱一直是我學習的目標，與您做論文的過程中，老師都能很有條理地發現我論文不足的部分，且也傳授了我們金字塔原理，使我的思考邏輯有不小的進步。另外還感謝老師細心的修改我的論文，使我的論文更加完整。

感謝我的同學們：小江、閔銘、語軒、國豪、姚姚、淑伶、淑妮、小馬、廷彰、秋傑、羅驛、皇維、小潘、Wush。有你們的陪伴使我碩士生涯過的更有樂趣。

感謝我的家人：我的爸媽、我的兄弟、女友雅君。有你們的支持，讓我更有動力完成這篇論文。

感謝清華。六年前讓我有機會進入我夢寐以求的清華大學來學習數學，四年後，又再度讓我踏入國內學術最高殿堂清華大學來研究統計。學校總是有最好的資源、師資以及優良的學習環境，讓我有好的數學統計基礎，才能順利完成這篇論文。



# 目錄

<b>1</b>	<b>緒論及文獻探討</b>	<b>1</b>
1.1	緒論 . . . . .	1
1.2	文獻回顧 . . . . .	2
1.2.1	二水準完全因子設計與部分因子設計 . . . . .	2
1.2.2	多水準因子設計與效應不完全混淆的部分因子設計 . . . . .	4
1.2.3	隨機域模型 . . . . .	6
1.2.4	三種模型的比較 . . . . .	8
<b>2</b>	<b>隨機域模型下效應的重要性</b>	<b>10</b>
2.1	固定效應模型中效應的重要性 . . . . .	10
2.2	固定效應模型、隨機效應模型以及隨機域模型之間的連結 . . . . .	11
2.3	隨機域模型下效應的重要性 . . . . .	13
2.3.1	隨機域模型下的效應 . . . . .	14
2.3.2	效應的重要性 . . . . .	29
<b>3</b>	<b>隨機域模型下的效應混淆</b>	<b>33</b>
3.1	模型複雜度與效應混淆 . . . . .	33
3.2	隨機域模型之模型複雜度 . . . . .	34
3.3	效應混淆程度 . . . . .	35
3.3.1	由固定效應模型之角度 . . . . .	35
3.3.2	由隨機域模型之角度 . . . . .	42
<b>4</b>	<b>結論</b>	<b>49</b>



## 圖目錄

2.1	$\Gamma^T X$ 矩陣第一個對角線元至第九個對角線元的絕對值與 $k$ 的變化關係。 . . . . .	20
3.1	$5^2$ 完全因子設計中各效應的特徵值曲線 . . . . .	39
3.2	例5中設計 (1) 的混淆集合之效應特徵值曲線 . . . . .	40
3.3	例5中設計 (2) 的混淆集合之效應特徵值曲線 . . . . .	40
3.4	例5中設計 (3) 的混淆集合之效應特徵值曲線 . . . . .	41
3.5	例5中設計 (4) 的混淆集合之效應特徵值曲線 . . . . .	41



## 表目錄

2.1 隨機域模型各效應與對應之固定效應模型下的正交多項式效應, 以及各效應的重要性指標 . . . . .	31
--	----



# 第 1 章

## 緒論及文獻探討

### 1.1 緒論

在一般實驗設計中，對使用完全因子設計(full factorial design) 或部分因子設計 (fractional factorial design) 下的實驗，經常使用的分析模型為固定效應模型 (fixed effect model)。對固定效應模型，實驗設計的各種性質及理論，在文獻上已有完整的發展。然而，近年來電腦實驗 (computer experiment) 的實驗設計經常使用的分析模型為隨機域模型 (random field model)，而隨機域模型中許多實驗設計的課題，尚未發展得很成熟。因此本篇論文的重點是嚐試將在固定效應模型下已發展的觀念與性質，推廣至隨機域模型。

本論文將探討如何把固定效應模型中效應混淆 (effect aliasing) 的觀念推廣至隨機域模型。Steinberg and Bursztyn (2004)將隨機域模型與固定效應模型透過隨機效應模型(random effect model) 作連結。Wang (2009)已討論如何對二水準的正規(regular) 部分因子設計，使用此連結來觀察隨機域模型中效應混淆的嚴重程度。本論文將延續Wang (2009)的論點來觀察對任意的部分因子設計(例如多水準因子、非正規設計)，如何觀察隨機域模型內效應混淆的嚴重程度。因此，我們將會在隨機域模型下，討論效應的重要性，以及任意設計的效應混淆情形這些課題。

內文的部分，下一節為文獻回顧，介紹一些本論文需要的預備知識，包含完全因子設計、部分因子設計、部分因子設計下的效應混淆以及隨機域模型。第二章則探討在任意水準的因子設計下，隨機域模型中效應的重要性。我們發現隨機域模型下效應的重要性可用設計所形成的相關係數矩陣的特徵值作為指標。在定義



完效應重要性後，第三章將討論在部分因子設計下效應混淆的程度，從模型由簡單到複雜的觀點來說明效應的混淆如何變嚴重，並用兩個不同角度來探討隨機域模型下混淆的嚴重程度。第四章為結論。

## 1.2 文獻回顧

本節文獻回顧將介紹固定效應模型下的效應混淆，並簡單介紹隨機域模型。在第一子節與第二子節簡單介紹完全因子設計以及部分因子設計，並討論固定效應模型下部分因子設計的效應混淆，其中第一子節介紹具有完全混淆 (fully aliasing) 性質的部分因子設計，第二子節則介紹具有不完全混淆 (partial aliasing) 性質的部分因子設計。第三子節介紹隨機域模型與其性質。最後第四子節則介紹三種模型的比較，分別為固定效應模型、隨機效應模型以及隨機域模型。

### 1.2.1 二水準完全因子設計與部分因子設計

若一實驗有  $n$  個因子，在每次試驗 (run) 時，每個因子會有設定值，此設定值我們稱之為水準 (level)。每一次試驗皆產生一組長度為  $n$  的向量  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ ，其中  $x_i \in \{-1, +1\}$ ,  $i = 1, \dots, n$ ，為第  $i$  個因子的設定值，而我們稱此向量  $\mathbf{x}$  為一組水準組合 (level combination)。

因為每個因子皆有  $+1, -1$  兩個水準設定，故所有可能的水準組合有  $2^n$  種，若實驗做全部的水準組合，稱此設計為  $2^n$  完全因子設計。但當  $n$  大時，在實務上往往因為時間或金錢因素而無法執行完全因子設計，此時只能從  $2^n$  個水準組合中挑一部分來執行，我們稱此設計為部分因子設計。在部分因子設計中，最常使用的為  $2^{n-k}$  部分因子設計，執行的不同水準組合共有  $2^{n-k}$  種，是完全因子設計的  $2^{-k}$  倍。挑選  $2^{n-k}$  種水準組合的過程可先從  $n$  個因子中挑選  $n - k$  個因子，對此  $n - k$  個因子作完全因子設計，其他  $k$  因子的水準設定值則為前  $n - k$  個因子的某些因子水準設定值的乘積。在以此方法挑選的  $2^{n-k}$  部分因子設計中，任兩個效應會完全混淆或完全直交，我們稱這種部分因子設計為正規設計。下一子節我們會介紹非正規的部分因子設計。

例 1. 若一實驗有五個因子  $A, B, C, D, E$ ，若現在想得到一個  $2^{5-2}$  部分因子設

計，則我們可先取  $A, B, C$  三個因子的完全因子設計，若令  $D$  因子的水準設定值為  $A, B, C$  因子各自水準設定值的乘積，令  $E$  因子的水準設定值為  $A, C$  因子各自水準設定值的乘積，則可以  $D = ABC, E = AC$  來表示，我們稱此為定義關係 (defining relation)。由其可得此設計的定義對比子群 (defining contrast subgroup) 為

$$I = ABCD = ACE = BDE.$$

對這個設計，當我們在估計  $D$  因子的主效應時，會得到跟  $A, B, C$  交互作用一樣的估計式，也就是

$$\bar{y}(D+) - \bar{y}(D-) = \bar{y}(ABC+) - \bar{y}(ABC-),$$

因此在估計此效應時，我們無法區別是估計  $D$  的主效應或是  $A, B, C$  交互作用效應，故我們稱  $D$  的主效應與  $A, B, C$  交互作用效應產生了混淆，以  $D = ABC$  表示。若要得到所有效應彼此之間的混淆關係，則可對定義對比子群  $I = ABCD = ACE = BDE$  此等式乘上任一效應，可得

$$\begin{array}{llll} I & = ABCD & = ACE & = BDE, \\ A & = BCD & = CE & = ABDE, \\ B & = ACD & = ABCE & = DE, \\ C & = ABD & = AE & = BCDE, \\ D & = ABC & = ACDE & = BE, \\ E & = ABCDE & = AC & = BD, \\ AB & = CD & = BCE & = ADE, \\ AD & = BC & = DCE & = ABE, \end{array}$$

以上每一列中的四個效應估計式皆相等，因此這些效應彼此混淆在一起，以上每一列中的效應所形成的集合，我們稱之為一個混淆集合 (alias set)。

對於部分因子設計中的效應混淆情形，在固定效應模型下已有許多評斷效應混淆嚴重程度的準則，如最高解析度準則 (maximum resolution criterion) 以及最小偏差準則 (minimum aberration criterion)。在介紹這兩準則前，需先定義解

析度 (resolution) 以及字長模式 (word length pattern)。解析度為定義對比子群中，長度最短的字串之長度。字長模式則對定義對比子群中的字串，以一個向量依字串長度的順序記錄各種長度的字串之個數，其中最長為3的長度（因為一般設計皆不允許有長度為2的字串），最長為因子個數。若在所有設計中，選取有最大解析度的設計，則稱最高解析度準則。而最小偏差準則是依序比較字長模式中的每個位置的數字大小，在頭一個數字不相同的位置上，此位置的字串個數較小者被認為是混淆較不嚴重的設計。以下將用這兩個準則來比較兩個部分因子設計。

**例 2.** 若有兩  $2^{6-2}$  部分因子設計，因子分別為  $A, B, C, D, E, F$ ，第一個部分因子設計的定義關係為  $E = ABC, F = ABD$ ，則定義對比子群為  $I = ABCE = ABDF = CDEF$ ，最短的字串長度為4，所以此設計的解析度為IV，字長模式為  $(0, 3, 0, 0)$ 。第二個部分因子設計的定義關係為  $E = ABCD, F = AB$ ，則定義對比子群為  $I = ABCDE = ABF = CDEF$ ，最短的字串長度為3，所以此設計的解析度為III，字長模式為  $(1, 1, 1, 0)$ 。第一個設計解析度為IV，第二個設計解析度為III，所以由最高解析度準則會認為第一個設計混淆較不嚴重。若由最小偏差準則，第一個設計字長模式為  $(0, 3, 0, 0)$ ，第二個設計字長模式為  $(1, 1, 1, 0)$ ，則因為這兩個向量在第一個位置就不相等且  $0 < 1$ ，所以認為第一個設計混淆較不嚴重。

### 1.2.2 多水準因子設計與效應不完全混淆的部分因子設計

在部分因子設計中，較常見的為1.2.1節所提的  $2^{n-k}$  部分因子設計，它是  $2^n$  完全因子設計經過一個定義關係而選出來的部分因子設計。然而在某些情況，我們常會希望試驗次數能夠更有彈性，並且在許多多水準的部分因子設計中，並無法如同前一子節建構設計  $2^{n-k}$  部分因子設計的方法來選取水準組合，我們稱這些部分因子設計為非正規設計 (nonregular design)。在固定效應模型中，非正規設計經常會因效應不完全混淆而產生複雜混淆 (complex aliasing) 的情形，而在這時候經常會使用混淆矩陣 (alias matrix) 來了解設計中效應混淆的程度。以下簡單介紹如何由混淆矩陣來觀察混淆程度。

假設  $\mathbf{y}$  是一個  $N \times 1$  向量， $\mathbf{X}_1$  以及  $\mathbf{X}_2$  各別為  $N \times k_1$  以及  $N \times k_2$  矩陣，

其中  $\mathbf{X}_1$  及  $\mathbf{X}_2$  的每一行皆代表一個效應, 且  $\beta_1$  與  $\beta_2$  各別為  $k_1 \times 1$  與  $k_2 \times 1$  的參數向量。假設真實模型為

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_1\beta_1 + \mathbf{X}_2\beta_2 + \epsilon, \quad (1.1)$$

其中  $E(\epsilon) = 0$  和  $\text{var}(\epsilon) = \sigma^2 I$ ,  $I$  為單位矩陣。若我們用的配適模型 (fitted model) 為

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_1\beta_1 + \epsilon, \quad (1.2)$$

且我們現在主要有興趣的參數為  $\beta_1$ , 那麼在模型 (1.2) 下的最小平方方法 (ordinary least square) 估計式為

$$\hat{\beta}_1 = (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T \mathbf{y}.$$

而在真實模型 (1.1) 下, 其期望值為

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}_1) &= (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T E(\mathbf{y}) \\ &= (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T (\mathbf{X}_1\beta_1 + \mathbf{X}_2\beta_2) \\ &= \beta_1 + (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2\beta_2, \end{aligned} \quad (1.3)$$

可看出在真實模型下,  $(\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2\beta_2$  是  $\hat{\beta}_1$  的偏差(bias)。我們稱

$$L = (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2$$

為混淆矩陣, 它能提供  $\mathbf{X}_2$  內的效應對  $\mathbf{X}_1$  內的效應之混淆係數。

**例 3.** 若有一個兩水準三因子部分因子設計, 假設有6個實驗次數, 設計矩陣為

Run	A	B	C
1	—	—	—
2	—	—	+
3	—	+	—
4	—	+	+
5	+	—	—
6	+	—	+

模型矩陣 (model matrix) 為

$$\begin{pmatrix} I & A & B & C & AB & AC & BC & ABC \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

利用 (1.3), 若以  $\mathbf{X}_1$  為  $I$  效應,  $\mathbf{X}_2$  為其他效應, 則可得到

$$E(\hat{\beta}_I) = \beta_I - \frac{1}{3}\beta_A - \frac{1}{3}\beta_B - \frac{1}{3}\beta_{AB},$$

由此我們可看到  $I$  與  $A$ 、 $B$  以及  $AB$  有不完全混淆, 且混淆係數皆為  $-\frac{1}{3}$ 。若以  $\mathbf{X}_1$  為  $A$  效應,  $\mathbf{X}_2$  為其他效應, 則可得到

$$E(\hat{\beta}_A) = \beta_A - \frac{1}{3}\beta_I - \frac{1}{3}\beta_B - \frac{1}{3}\beta_{AB},$$

由此我們可看到  $A$  與  $I$ 、 $B$  以及  $AB$  有不完全混淆, 且混淆係數皆為  $-\frac{1}{3}$ 。相同地, 可得到

$$E(\hat{\beta}_B) = \beta_B - \frac{1}{3}\beta_I - \frac{1}{3}\beta_A - \frac{1}{3}\beta_{AB},$$

$$E(\hat{\beta}_C) = \beta_C - \frac{1}{3}\beta_{AC} - \frac{1}{3}\beta_{BC} - \frac{1}{3}\beta_{ABC},$$

可分別得知  $B$  與  $I$ 、 $A$ 、 $AB$  有不完全混淆, 以及  $C$  與  $AC$ 、 $BC$ 、 $ABC$  有不完全混淆, 且混淆係數皆為  $-\frac{1}{3}$ 。

### 1.2.3 隨機域模型

在介紹隨機域模型之前, 首先介紹何謂高斯隨機函數 (Gaussian random function)、平穩性 (stationary) 以及相關係數函數 (correlation function)。

**定義 1.** 假設  $\chi \in \Re^n$ , 其中  $n$  為正整數, 代表因子個數, 而  $\chi$  為實驗區間。對任意  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L \in \chi$ , 若  $(Z(\mathbf{x}_1), \dots, Z(\mathbf{x}_L))$  為一個多維常態分配, 則我們稱  $Z(\mathbf{x})$  是一個高斯隨機函數。

高斯隨機函數是由  $\mu(\mathbf{x}) \equiv E\{Z(\mathbf{x})\}$ ,  $\mathbf{x} \in \chi$  以及它的相關係數函數  $\text{cov}\{Z(\mathbf{x}_1), Z(\mathbf{x}_2)\}$ ,  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \chi$  所決定。

**定義 2.** 假設  $Z(\cdot)$  為一個隨機函數, 對任意  $\mathbf{h} \in \mathfrak{R}^n$  及任意  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L \in \chi$  使得  $\mathbf{x}_1 + \mathbf{h}, \dots, \mathbf{x}_L + \mathbf{h} \in \chi$ , 若滿足  $(Z(\mathbf{x}_1), \dots, Z(\mathbf{x}_L))$  與  $(Z(\mathbf{x}_1 + \mathbf{h}), \dots, Z(\mathbf{x}_L + \mathbf{h}))$  有相同的分配, 則稱  $Z(\cdot)$  有平穩性。

在一般情況下, 我們會要求高斯隨機函數具有平穩性。我們可很容易地證明具有平穩性的高斯隨機函數滿足

$$\text{cov}\{Z(\mathbf{x}_1), Z(\mathbf{x}_2)\} = C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \equiv C(\mathbf{h}), \quad (1.4)$$

其中  $C$  為某個共變異函數 (covariance function)。由 (1.4) 式可得知  $Z(\mathbf{x}_1), Z(\mathbf{x}_2)$  的共變異數僅由  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  的距離來決定, 與  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  的位置無關。

令  $C(\mathbf{0}) = \sigma^2$ , 則  $R(\mathbf{h}) \equiv C(\mathbf{h})/\sigma^2$ ,  $\mathbf{h} \in \mathfrak{R}^n$ ,  $R(\cdot)$  稱之為相關係數函數。相關係數函數  $R(\cdot)$  必須滿足以下性質:

1.  $R(\mathbf{0}) = 1$ ,
2.  $R(-\mathbf{h}) = R(\mathbf{h})$ , 也就是  $R(\cdot)$  函數必須對稱於原點,
3.  $R(\cdot)$  為正半定 (positive semidefinite) 函數。

在Sacks et al. (1989)此論文所使用相關係數函數為

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \prod_s \exp\{-\lambda_s |x_{1s} - x_{2s}|^{\alpha(s)}\},$$

其中  $\mathbf{x}_1 = (x_{11}, \dots, x_{1n})$ ,  $\mathbf{x}_2 = (x_{21}, \dots, x_{2n})$ ,  $\lambda_s > 0$ ,  $\alpha(s) \in (0, 2]$ 。本篇論文將使用此相關係數函數, 並給定  $\alpha(s) = 2$ , 也就是

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \prod_s \exp\{-\lambda_s (x_{1s} - x_{2s})^2\}.$$

關於高斯隨機函數及其他常被使用的相關函數之細節, 可參考Santner et al. (2003)。

以下我們將介紹隨機域模型。最一般化的隨機域模型為

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{s=1}^t \beta_s f_s(\mathbf{x}) + Z(\mathbf{x}) + \varepsilon,$$



其中  $f_s(\cdot)$  為已知的函數,  $\beta_s$  為未知參數,  $\varepsilon$  為誤差項,  $Z(\mathbf{x})$  是平均數為 0 的平穩高斯隨機函數。因為在電腦實驗裡只要輸入的設定相同, 則出來的結果也會相同, 故電腦實驗所使用的隨機域模型, 沒有誤差項, 為

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{s=1}^t \beta_s f_s(\mathbf{x}) + Z(\mathbf{x}),$$

因為本文著重在高斯隨機函數的部分, 因此討論的模型中僅有高斯隨機函數, 以及誤差項, 模型為

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

若是想探討電腦實驗的隨機域模型, 僅需將誤差項的變異令為 0 即可。

#### 1.2.4 三種模型的比較

在本論文中, 我們透過隨機效應模型來連結固定效應模型與隨機域模型, 因此這邊要比較固定效應模型、隨機效應模型與隨機域模型。

一般實驗設計的數據經常使用固定效應模型  $Y = \sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$  來做分析, 其中  $f_i$  為已知的因子效應,  $\beta_i$  為對應的未知參數, 而  $\varepsilon$  則為實驗誤差, 假設其分配為  $\varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2 I)$ , 則  $Y$  的分配為

$$Y(\mathbf{x}) \sim N\left(\sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x}), \sigma_\varepsilon^2 I\right),$$

很明顯地我們可以發現因子影響反應變數的部分為  $\sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x})$ , 也就是反應變數與因子之間的關係是由  $Y$  的期望值  $\sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x})$  這個結構來描述。

隨機效應模型與固定效應有相同的模型結構  $Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ , 但隨機效應模型的效應參數為隨機變數, 也就是  $\beta_i$  為隨機變數,  $\varepsilon$  同樣為實驗誤差, 若給定  $\beta_i \sim N(0, \sigma_\beta^2 \tau_i^2)$ , 且  $\beta_i$  之間彼此獨立,  $\varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2 I)$ , 則  $Y$  的分配為

$$Y(\mathbf{x}) \sim N(0, \sigma_\beta^2 \mathbf{f}(\mathbf{x}) \Sigma \mathbf{f}'(\mathbf{x}) + \sigma_\varepsilon^2 I), \quad (1.5)$$

其中  $\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x}))'$ ,  $\Sigma$  為一個對角線矩陣, 對角線的元素為  $\tau_1^2, \dots, \tau_t^2$ , 對角線以外皆為 0。很明顯可發現在隨機效應模型中, 因子影響反應變數的部分為  $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \Sigma \mathbf{f}'(\mathbf{x})$ , 也就是說, 反應變數與因子之間的關係是透過  $Y$  的共變異矩陣

來描述的。這與固定效應模型中，反應變數與因子之間的關係是由  $Y$  的期望值  $\sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x})$  這個結構來描述有很大的不同。

隨機域模型為  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \varepsilon$ ，其中  $Z(\mathbf{x}) \sim N(0, \sigma_Z^2 R)$ ，若給定  $\varepsilon \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2 I)$ ，則

$$Y \sim N(0, \sigma_Z^2 R + \sigma_\varepsilon^2 I), \quad (1.6)$$

其中  $R$  為由各實驗設定所形成之相關係數矩陣，故其為因子的函數。因此可得知在隨機域模型中，反應變數與因子之間的關係亦是透過  $Y$  的共變異矩陣描述的，但是(1.6)中的  $\sigma_Z^2 R$  未必可寫成 (1.5) 中的  $\sigma_\beta^2 \mathbf{f}(\mathbf{x}) \Sigma \mathbf{f}'(\mathbf{x})$  的型式。

從結構上看，固定效應模型與隨機效應模型皆使用線性模型  $Y = \sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$  的結構，透過事先定義好的因子效應  $f_i(\mathbf{x})$ ，來描述因子與反應變數之間的關聯。相對之下，在隨機域模型中則較不易看出因子效應所扮演的角色。另一方面，若從分配上看，則隨機域模型與隨機效應模型皆使用  $Y$  的共變異矩陣來描述因子如何影響反應變數，此與固定效應模型用  $Y$  的期望值來描述反應變數與因子之間的關係不同。

在第二章，我們將透過隨機效應模型來連結固定效應模型與隨機域模型，使得隨機域模型裡的效應可以用固定效應模型的方式來解釋，並且觀察相關係數函數如何影響隨機域模型裡效應的重要性。



## 第 2 章

### 隨機域模型下效應的重要性

#### 2.1 固定效應模型中效應的重要性

在一般實驗設計中，我們經常使用固定效應模型  $Y = \sum_{i=1}^t f_i(\mathbf{x})\beta_i + \varepsilon$ ，其中  $f_i$  代表不同的效應，如此建模則清楚地可由  $\beta_i$  的大小來決定效應的重要性， $\beta_i$  越大則此效應越重要，反之， $\beta_i$  越小則此效應越不重要。在實驗前，兩水準實驗的效應可依等級排序原則 (hierarchical ordering principal, Wu and Hamada (2009), Sec 4.6) 來定義效應重要性。這個經驗法則告訴我們相同階數的效應一樣重要，且越低階的效應越重要，反之越高階的效應則越不重要。例如主效應比二因子交互效應重要、二因子交互效應則比三因子交互作用效應重要，依此類推。相同的，在數量型(quantitative)因子的實驗設計也有類似於等級排序原則的結果，例如線性效應比二次效應重要、二次效應則比三次效應重要，依此類推，且同樣階數的效應有相同的重要性。這個經驗法則的產生是經由長期的經驗累積，因經常在估計效應時得到低階效應較高階效應容易顯著。

在實驗後，因為可以得到反應變數的觀測值，故可估計各效應  $\beta_i$  的估計值。效應的估計值  $\hat{\beta}_i$  可決定實驗後此效應的重要性。我們經常觀察藉由  $|\frac{\hat{\beta}_i}{\text{se}(\hat{\beta}_i)}|$  是否顯著大於 0，來決定此效應是否顯著重要。

很清楚地，實驗前的效應重要性與實驗後的效應重要性並不一定會一致。例如經常在實驗後，會有某些高階效應較低階效應顯著，其與等級排序原則並不一致。我們將依不同的情況來決定效應的重要性，在實驗前並無反應變數的觀測值所以只能利用等級排序原則來決定效應的重要性，而在實驗後得到反應變數的觀測值

的資訊，則可依估計值的大小來決定效應的重要性。

我們已介紹如何描述固定效應模型中效應的重要性，以下我們將透過固定效應模型、隨機效應模型與隨機域模型的連結，將固定效應模型中效應重要性的概念推廣至隨機域模型。

## 2.2 固定效應模型、隨機效應模型以及隨機域模型之間的連結

若現在有一個  $n$  因子  $r$  組試驗水準組合的實驗設計，且以隨機域模型建模

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

其中  $Z(\mathbf{x})$  為高斯隨機函數， $\varepsilon$  為誤差項。兩個相異的水準組合之反應值  $Y(\mathbf{x}_i), Y(\mathbf{x}_j)$  會有相關性，此相關性以相關函數  $R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  表示，其中  $\mathbf{x}_i$  表示第  $i$  次實驗時各因子水準形成之  $n$  維向量，稱為第  $i$  次實驗的水準組合，以  $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$  表示。這裡相關函數使用 1.2.3 小節裡提的

$$R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \text{cor}(Z(\mathbf{x}_i), Z(\mathbf{x}_j)) = \exp\left\{-\sum_s \lambda_s (x_{is} - x_{js})^2\right\} \quad (2.1)$$

作為本章討論的相關函數，此相關函數參數  $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$  記為  $\boldsymbol{\lambda}$ 。由於有  $r$  組實驗設定  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r$ ，故以一個  $r \times r$  的相關係數矩陣  $R$  描述這  $r$  組實驗之反應值彼此之間的相關係數，其  $ij$  元為  $\text{cor}(Z(\mathbf{x}_i), Z(\mathbf{x}_j))$ 。

對隨機域模型，並不容易由其模型中明確地了解因子與反應變數之間的效應關係，因此我們將用隨機效應模型當作橋樑，來連接固定效應模型與隨機域模型，如此可透過固定效應模型來了解在隨機域模型中，因子與反應變數之間的效應關係。在 1.2.4 小節提及固定效應模型、隨機效應模型與隨機域模型三種模型的比較，其中我們指出隨機效應模型可由兩種不同的觀點來看它。從模型結構上來看為  $Y = \sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ ，其與固定效應模型有相似的線性結構，而若由其反應變數  $Y$  的分配上來看，則在隨機效應模型與隨機域模型，反應變數與因子之間的關聯皆由  $Y$  的共變異矩陣來建立的，此與固定效應模型利用  $Y$  的期望值來描述反應變數與因子的關聯有很大的不同。接下來我們將透過這三種模型之間連結，

來解讀隨機域模型，並將固定效應模型上已發展的設計性質與概念，推廣到隨機域模型。

因為隨機效應模型與隨機域模型中  $Y$  的分配有一致性，即它們皆用共變異矩陣描述反應變數與因子之關聯，故我們可令此兩個模型中  $Y$  的分配相等。在隨機效應模型中，模型結構為  $Y = \sum_{i=1}^t \beta_i f_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ ，其中  $\beta_i \sim N(0, \sigma^2 \tau_i^2)$ ， $f_i$  代表某效應，我們可以得到

$$\mathbf{F}\boldsymbol{\beta} \sim N_n(0, \sigma^2 \mathbf{F}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{F}'),$$

其中

$$\mathbf{F} = (\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_t),$$

$$\mathbf{f}_i = (f_i(\mathbf{x}_1), \dots, f_i(\mathbf{x}_r))',$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \tau_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \tau_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \tau_t^2 \end{pmatrix},$$

$\mathbf{F}$  為一個  $r \times t$  矩陣。而隨機域模型中，則得到

$$(Z(\mathbf{x}_1), \dots, Z(\mathbf{x}_r))' \sim N_n(0, \sigma^2 R),$$

若兩個模型要等同，我們會期望

$$\mathbf{F}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{F}' = R. \quad (2.2)$$

因為  $R$  為相關係數矩陣，故  $\mathbf{F}$  中的每一行(效應)皆需適當地標準化(normalized)，方能使得  $\mathbf{F}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{F}'$  亦為相關係數矩陣。由方陣的特徵值分解，可以知道若將一個  $r \times r$  的矩陣  $R$  作特徵值分解，得其特徵值  $\kappa_1, \dots, \kappa_r$ ，對應的單位特徵向量為  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r$ ，其中  $\mathbf{v}_i = (v_{1i}, \dots, v_{ri})'$ 。令

$$\Gamma = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_r \\ | & | & & | \end{pmatrix}, \Lambda = \begin{pmatrix} \kappa_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \kappa_r \end{pmatrix},$$

則有：

$$\Gamma'\Gamma = I, R = \Gamma\Lambda\Gamma'. \quad (2.3)$$

由 (2.2) 以及 (2.3), 當  $t = r$  時 (即隨機效應模型包含  $r$  個效應), 我們可以將  $\mathbf{F}$  視為  $\Gamma$ ,  $\Sigma$  則視為  $\Lambda$ , 也就是說,  $\mathbf{f}_i = \mathbf{v}_i, \tau_i^2 = \kappa_i$ 。

透過隨機效應模型與隨機域模型中  $Y$  的分配之一致性, 我們得到了若將隨機域模型的相關係數矩陣之特徵向量  $\mathbf{v}_i$  視為隨機效應模型中的效應  $\mathbf{f}_i$ , 將隨機域模型的相關係數矩陣之特徵值  $\kappa_i$  視為隨機效應模型中的  $\tau_i^2$ , 則我們可將效應的概念引入隨機域模型中。因此, 若現在有一個  $n$  因子試驗次數為  $r$  的實驗設計, 實驗設定為  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r$ , 且以隨機域模型  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \varepsilon$  建模, 相關函數為  $R$ , 得到矩陣  $R$  特徵向量為  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r$ , 特徵值為  $\kappa_1, \dots, \kappa_r$ , (注意這些特徵向量及特徵值會隨著實驗點  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r$  之改變而改變), 則可等同於一個隨機效應模型

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^r \beta_i v_i(\mathbf{x}) + \varepsilon, \beta_i \sim N(0, \kappa_i),$$

其中  $v_i(\mathbf{x})$  為滿足  $v_i(\mathbf{x}_j) = v_{ij}$  之函數。在 1.2.4 小節我們提到從結構上看, 固定效應模型與隨機效應模型有類似的模型結構, 因此隨機域模型  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \varepsilon$  可用  $Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^r \beta_i v_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$  來描述因子與反應變數之間的關係。如此一來, 我們可以將在固定效應模型中已發展的觀念與性質透過此連結傳遞至隨機域模型中。然而, 實驗設計在固定效應模型的分析下, 常會事先定義出固定效應  $f_i$ , 如主效應, 線性效應, 二次效應等等, 但  $v_i$  未必會正好等於這些固定效應  $f_i$ 。下一小節我們將比對  $v_i$  與  $f_i$  以找出  $v_i$  與  $f_i$  之間的關聯, 並透過這三個模型的連結來得到隨機域模型中效應的重要性。

## 2.3 隨機域模型下效應的重要性

對隨機效應模型  $Y = \sum_{i=1}^r \beta_i f_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ , 其中  $\beta_i$  為隨機變數, Chipman et al. (1997) 曾提及一個描述效應重要性的方法。如果給定事前分配

$$\pi(\beta_i) = N(0, \sigma^2 \tau_i^2),$$

若認為效應  $\beta_i$  為重要效應時，則給  $\tau_i^2$  較大的值，也就是讓  $\beta_i$  的變異數較大，使其為較大值的機率變大。反之，若認為效應  $\beta_i$  為不重要效應時，則給  $\tau_i^2$  較小的值，也就是讓  $\beta_i$  的變異數較小，使其為較大值的機率變小。這說明了隨機效應模型中，效應的重要性可由效應之參數變異數  $\tau_i^2$  來決定，效應之參數變異數越大，則此效應越重要，反之，效應之參數變異數越小，則此效應越不重要。

由於在完全因子設計下，並不會有效應混淆產生，所以我們想在完全因子設計下討論效應的重要性。Wang (2009)之論文已探討在二水準完全因子設計下，隨機域模型中效應的重要性問題，本篇論文將把其結果推廣至任何水準數的完全因子設計上。為了簡化陳述，這裡我們用  $p^n$  完全因子設計作說明，其中  $p \geq 2$ ,  $p$  為水準數， $n$  為因子數。但此陳述可直接推廣至任意  $p_1^{n_1} \times p_2^{n_2} \times \cdots \times p_g^{n_g}$  完全因子設計，其中  $p_1, \dots, p_g$  為不同的水準數， $n_1, \dots, n_g$  為因子數。首先我們將隨機域模型中的  $p^n \times p^n$  的相關係數矩陣  $R$  作特徵值分解，得其特徵值  $\kappa_1, \dots, \kappa_{p^n}$  及其對應的單位特徵向量  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{p^n}$ 。經由2.2節三種模型的連結，我們可以得到隨機域模型  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \varepsilon$  可改寫成隨機效應模型  $Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{p^n} \beta_i v_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ ，其中  $v_i(\mathbf{x}_j) = v_{ij}$ 。但是因為  $v_i(\mathbf{x})$  未必是某個事先定義好的效應，因此我們想了解  $v_i(\mathbf{x})$  為何種效應。前面曾提及，將實驗點代入  $v_i$  後形成的向量為相關係數矩陣的特徵向量，故我們可知道函數  $v_i$  在實驗點上的值為何，藉由比對  $v_i$  與固定效應模型的固定效應  $f_i$  在實驗點上的值，以了解是否可由固定效應  $f_i$  來解釋  $v_i$ 。而我們發現  $v_i(\mathbf{x})$  可由正交多項式(orthogonal polynomial, Wu and Hamada (2009), Sec 2.3) 來解釋，如此得到  $v_i(\mathbf{x})$  可對應於固定效應模型的效應。以下將簡單介紹正交多項式以及講解如何找到  $v_i(\mathbf{x})$  所對應到的效應。

### 2.3.1 隨機域模型下的效應

在固定效應模型中，因子屬於數量型時，我們想探討的經常是因子與反應變數之間的線性關係、二次曲線關係等等。Wu and Hamada (2009) 提出用正交多項式來描述因子與反應變數之間的關係。我們用下例來說明何謂正交多項式。

**例 4.** 若有一個三水準一因子實驗，三水準分別為  $-1, 0$  以及  $1$ ，則一階與二階正



交多項式分別為

$$P_1(x) = x, P_2(x) = 3x^2 - 2.$$

在  $x = -1, 0, 1$  時, 可得到

$$P_1(x) = -1, 0, 1, P_2(x) = 1, -2, 1.$$

可以很容易看出在  $x = -1, 0, 1$  時, 因為  $(-1, 0, 1)(1, 2, 1)^T = [(-1)(1) + (0)(-2) + (1)(1)] = 0$ , 所以  $P_1(x), P_2(x)$  為互相直交的。根據  $P_1(x), P_2(x)$ , 在固定效應模型中我們可用模型

$$Y(x) = \beta_0 + \beta_1 \frac{P_1(x)}{C_1} + \beta_2 \frac{P_2(x)}{C_2} + \varepsilon$$

來描述因子與反應變數之間的關係, 其中  $C_1, C_2$  為將實驗點代入後使得模型矩陣內該效應之向量長度為1的常數。若可估計常數效應  $\beta_0$ 、一階效應  $\beta_1$  以及二階效應  $\beta_2$ , 並想預估非此三水準設定的反應值, 如 0.5, -0.7 等, 則令  $x = 0.5$  或  $x = -0.7$  代入

$$\hat{Y}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \frac{P_1(x)}{C_1} + \hat{\beta}_2 \frac{P_2(x)}{C_2}$$

則可得到預估的反應值。

例4說明了在固定效應模型中, 三水準一因子設計下如何用正交多項式  $P_1(x), P_2(x)$  來建立模型, 若推廣至  $p$  水準設計, 則 Wu and Hamada (2009) 提供了如何推廣至更高階的正交多項式  $P_1(x), P_2(x), \dots, P_{p-1}(x)$  的方法。而對多因子設計, 除主效應外, 還必須考慮交互作用項, 因此若有  $p$  水準  $n$  因子的  $p^n$  完全因子設計, 且實驗設定為  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$ , 在固定效應模型則可使用模型

$$\begin{aligned} Y(\mathbf{x}) = & \frac{\beta_0}{C_0} + \sum_{i=1}^n \beta_{1i} \frac{P_{1i}(\mathbf{x})}{C_{1i}} + \sum_{i=1}^n \beta_{2i} \frac{P_{2i}(\mathbf{x})}{C_{2i}} + \dots + \sum_{i=1}^n \beta_{(p-1)i} \frac{P_{(p-1)i}(\mathbf{x})}{C_{p-1}} \\ & + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \beta_{11ij} \frac{P_{1i}(\mathbf{x})P_{1j}(\mathbf{x})}{C_{11ij}} + \dots + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \beta_{(p-1)(p-1)ij} \frac{P_{(p-1)i}(\mathbf{x})P_{(p-1)j}(\mathbf{x})}{C_{(p-1)(p-1)ij}} \\ & + \dots + \beta_{(p-1)\dots(p-1)12\dots n} \frac{P_{(p-1)1}(\mathbf{x})P_{(p-1)2}(\mathbf{x}) \dots P_{(p-1)n}(\mathbf{x})}{C_{(p-1)\dots(p-1)12\dots n}} + \varepsilon. \end{aligned} \quad (2.4)$$

若令  $X$  為此模型的模型矩陣，則  $X$  是一個  $p^n \times p^n$  的矩陣。令此矩陣的行向量為  $X_1, \dots, X_{p^n}$ 。更多關於固定效應模型如何用正交多項式來建立模型的介紹，可參考 Wu and Hamada (2009)。

在2.3節開頭我們已說明對  $p^n$  完全因子設計，隨機域模型可等同於隨機效應模型

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{p^n} \beta_i v_i(\mathbf{x}) + \varepsilon,$$

其中  $v_i(\mathbf{x})$  為滿足  $v_i(\mathbf{x}_j) = v_{ij}$  之函數。我們想知道  $v_i(\mathbf{x})$  可由正交多項式構成的固定效應模型中的哪些效應來做解釋。我們已知將實驗點代入函數  $v_i(\mathbf{x})$  後形成的向量為相關係數矩陣的特徵向量  $\mathbf{v}_i$ ，而因為  $\mathbf{v}_i$  為  $p^n \times 1$  向量，且正交多項式的行向量  $X_1, \dots, X_{p^n}$  可擴展 (span) 成一個  $p^n$  維的實數空間，因此  $\mathbf{v}_i$  可寫成  $X_1, \dots, X_{p^n}$  的一組線性組合，而我們可由該線性組合中，每個  $X_i$  的係數大小來了解  $v_i(\mathbf{x})$  主要可由哪些正交多項式所解釋。因為  $\mathbf{v}_i$  可寫成  $X_1, \dots, X_{p^n}$  的一組線性組合，也就是

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= h_{11}X_1 + \dots + h_{1p^n}X_{p^n} \\ &\vdots \\ \mathbf{v}_{p^n} &= h_{p^n 1}X_1 + \dots + h_{p^n p^n}X_{p^n} \end{aligned} \quad (2.5)$$

令

$$\Gamma = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \dots & \mathbf{v}_{p^n} \\ | & | & & | \end{pmatrix}, H = \begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1p^n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ h_{p^n 1} & \dots & h_{p^n p^n} \end{pmatrix},$$

則 (2.5) 式可改寫成

$$\Gamma = XH^T, \quad (2.6)$$

將 (2.6) 式等式兩邊轉置後，右邊再乘上  $X$ ，則得到

$$\Gamma^T X = HX^T X$$

因為  $X$  為固定效應模型中完全因子設計的模型矩陣，且  $X$  中每個行向量皆為直交且長度皆為1，也就是說， $X^T X = I$ ，因此可得

$$\Gamma^T X = H.$$

我們可由矩陣  $H$  中第  $i$  列的值來觀察特徵向量  $\mathbf{v}_i$  如何寫成  $X$  行向量的線性組合, 並由其係數大小得知  $\mathbf{v}_i$  主要為固定效應模型中的哪些效應所組成。若從幾何空間的角度來看,  $\Gamma^T X$  為  $\Gamma$  投影在  $X$  的程度, 若  $\mathbf{v}_i$  投影在某  $X_j$  上的投影量特別大時, 則  $X_j$  對  $\mathbf{v}_i$  此效應的貢獻較多, 並可用  $X_j$  此效應來解釋  $\mathbf{v}_i$  的主要部分。我們將用下面例子做說明。

**例 5.** 若是有一個三水準的二因子完全因子設計, 二因子分別為  $A, B$ , 因子設定為

$$\begin{aligned} \text{因子 } A & \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \\ \text{因子 } B & \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

若在正交多項式構成的固定效應模型下則由 (2.4) 式可得到模型矩陣  $X$  為

$$X = \begin{pmatrix} I & A & B & AB & A^2 & B^2 & A^2B & AB^2 & A^2B^2 \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{18}} & -\frac{2}{\sqrt{18}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{12}} & -\frac{2}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{18}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{18}} & -\frac{2}{\sqrt{12}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{\sqrt{18}} & -\frac{2}{\sqrt{18}} & 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{2}{\sqrt{12}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{18}} & -\frac{2}{\sqrt{18}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{12}} & -\frac{2}{\sqrt{36}} \\ \frac{1}{\sqrt{9}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{1}{\sqrt{18}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{36}} \end{pmatrix},$$

在隨機域模型中相關係數函數裡對應的參數為  $\lambda_1, \lambda_2$ , 若給定  $\lambda_1 = 0.2, \lambda_2 = 0.1$ ,



則相關係數矩陣的單位特徵向量為

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \mathbf{v}_3 & \mathbf{v}_4 & \mathbf{v}_5 & \mathbf{v}_6 & \mathbf{v}_7 & \mathbf{v}_8 & \mathbf{v}_9 \\ -0.305 & 0.396 & -0.386 & 0.5 & 0.252 & -0.236 & -0.318 & -0.305 & 0.194 \\ -0.333 & 0.432 & 0 & 0 & 0.275 & 0.4320 & 0 & 0.560 & -0.356 \\ -0.305 & 0.396 & 0.386 & -0.5 & 0.252 & -0.236 & 0.318 & -0.305 & 0.194 \\ -0.356 & 0 & -0.450 & 0 & -0.432 & -0.275 & 0.546 & 0 & -0.333 \\ -0.389 & 0 & 0 & 0 & -0.471 & 0.504 & 0 & 0 & 0.611 \\ -0.356 & 0 & 0.450 & 0 & -0.432 & -0.275 & -0.546 & 0 & -0.333 \\ -0.305 & -0.396 & -0.386 & -0.5 & 0.252 & -0.236 & -0.318 & 0.305 & 0.194 \\ -0.333 & -0.432 & 0 & 0 & 0.275 & 0.432 & 0 & -0.560 & -0.356 \\ -0.305 & -0.396 & 0.386 & 0.5 & 0.252 & -0.236 & 0.318 & 0.305 & 0.194 \end{pmatrix},$$

故可得

$$\Gamma^T X = \begin{pmatrix} I & A & B & AB & A^2 & B^2 & A^2B & AB^2 & A^2B^2 \\ \mathbf{v}_1 & -0.996 & 0 & 0 & 0 & 0.074 & -0.042 & 0 & 0 & 0.003 \\ \mathbf{v}_2 & 0 & -0.999 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.042 & 0 \\ \mathbf{v}_3 & 0 & 0 & -0.997 & 0 & 0 & 0 & -0.074 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_5 & 0.074 & 0 & 0 & 0 & 0.996 & 0.003 & 0 & 0 & 0.042 \\ \mathbf{v}_6 & 0.042 & 0 & 0 & 0 & -0.003 & -0.996 & 0 & 0 & 0.074 \\ \mathbf{v}_7 & 0 & 0 & 0.074 & 0 & 0 & 0 & -0.997 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_8 & 0 & -0.042 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.999 & 0 \\ \mathbf{v}_9 & -0.003 & 0 & 0 & 0 & -0.042 & 0.074 & 0 & 0 & 0.996 \end{pmatrix},$$

由上式我們可以得知

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1 &= -0.996 + 0.074A^2 + 0.042B^2 - 0.003A^2B^2 && \approx -I, \\
\mathbf{v}_2 &= 0.999A - 0.042AB^2 && \approx A, \\
\mathbf{v}_3 &= -0.997B + 0.074A^2B && \approx -B, \\
\mathbf{v}_4 &= AB && = AB, \\
\mathbf{v}_5 &= 0.074 + 0.996A^2 - 0.003B^2 - 0.042A^2B^2 && \approx A^2, \\
\mathbf{v}_6 &= -0.042 + 0.003A^2 - 0.996B^2 + 0.074A^2B^2 && \approx -B^2, \\
\mathbf{v}_7 &= -0.074B - 0.997A^2B && \approx -A^2B, \\
\mathbf{v}_8 &= -0.042A - 0.999AB^2 && \approx -AB^2, \\
\mathbf{v}_9 &= 0.042A^2 + 0.042B^2 + 0.996A^2B^2 && \approx A^2B^2,
\end{aligned}$$

很明顯地可看見在以上的每一個式子中，皆有一個係數相當接近1或-1，且因為

$$(\Gamma^T X)^T (\Gamma^T X) = X^T \Gamma \Gamma^T X = X^T X = I,$$

也就是說  $\Gamma^T X$  每一列的平方和皆為1，因此若  $H$  的第  $i$  列中某個係數接近於1或-1，則該列中其它係數皆會很小，故  $\mathbf{v}_i$  在此接近1(或-1)的係數所對應之效應上的投影量相當大，亦即我們可以將隨機域模型的  $v_i$  視為代表固定效應模型中的該效應。

我們將例5延伸至  $\lambda_1 = k + 0.01, \lambda_2 = k$  的情形，其中  $k$  為任意值，則  $\Gamma^T X$  矩陣第一個對角線元至第九個對角線元的絕對值與  $k$  的變化關係分別為圖 2.1 中的 (1) 至 (9)，可以看出這九個對角線元在  $k$  值變大時有遞減後收斂的趨勢，且其 (收斂) 值由圖觀察都在0.95以上，因此在例5中，假設  $\lambda_1 = k + 0.01, \lambda_2 = k$ ，則對不同的  $k$  值  $v_i$  皆可幾乎完全由  $X_i$  所解釋。

在例5中我們得知對三水準二因子的完全因子設計，隨機域模型中的效應  $v_i$  幾乎完全可由正交多項式構成的固定效應模型中的一個效應所解釋。關於這個結論是否可以推廣至任意水準數或任意因子數的證明，在本論文完成前尚未推導出來。但我們嚐試過許多不同水準數以及因子數的設定，其計算結果皆有類似例5的情形。

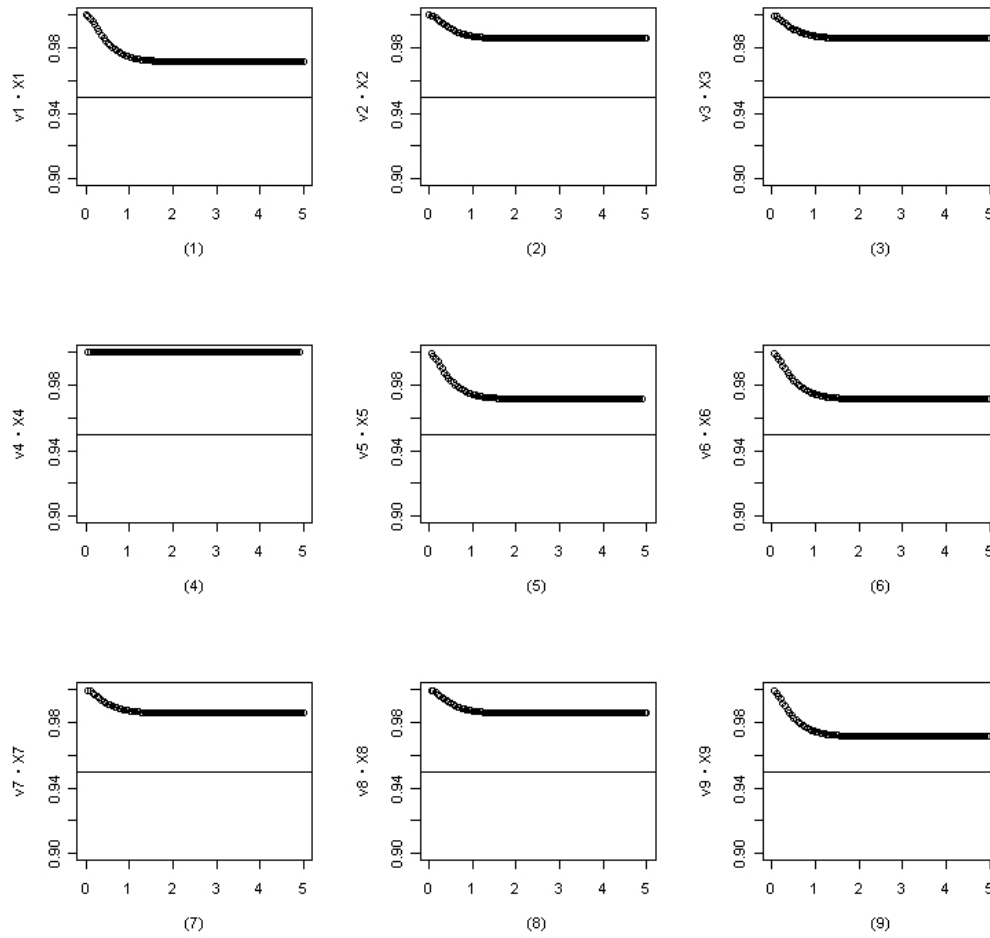


圖 2.1:  $\Gamma^T X$  矩陣第一個對角線元至第九個對角線元的絕對值與  $k$  的變化關係。

另外由例5也可觀察到  $\Gamma^T X$  此矩陣有許多元素為0, 以下我們將證明這些元素是在  $\lambda$  為任意值時皆為0, 這表示  $v_i$  與許多正交多項式  $X_j$  彼此之間為互相直交, 也就是這些  $X_j$  效應對  $v_i$  沒有貢獻。我們有興趣想了解哪些特徵向量與哪些正交多項式彼此之間互為直交, 以下將會證明此結果。在此之前, 我們先介紹幾個此證明會使用到的定義與性質。

**定義 3.** 對所有  $\alpha > 0$ , 令

1.  $\lceil \alpha \rceil$  為大於或等於  $\alpha$  的最小整數。
2.  $\lfloor \alpha \rfloor$  為小於或等於  $\alpha$  的最大整數。

**定義 4.** 若  $J$  為一個  $m \times m$  對稱元素矩陣 (element matrix), 其滿足

$$J_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{如果 } j = m - i, \\ 0, & \text{如果 } j \neq m - i. \end{cases}$$

也就是

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

**定義 5.** 若  $A$  為一個  $m \times m$  矩陣, 且滿足

$$A_{i,j} = A_{m-i+1, m-j+1} \quad \text{對於所有 } 1 \leq i, j \leq m,$$

則稱  $A$  為中心對稱矩陣 (centrosymmetric matrix)。

由定義4以及定義5得知, 若  $A$  為中心對稱矩陣, 則若且唯若

$$A = JAJ.$$

**定義 6.** 若  $v$  為一個  $m$  維向量, 且滿足

$$Jv = v,$$

則  $v$  稱為對稱的 (symmetric)。若  $v$  滿足

$$Jv = -v,$$

則  $v$  稱為斜對稱的 (skew symmetric)。

**例 6.** 若  $A$  為一  $3 \times 3$  矩陣,  $A$  的形式為

$$A = \begin{pmatrix} b & d & c \\ e & a & e \\ c & d & b \end{pmatrix},$$

則因為

$$\begin{aligned} JAJ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & d & c \\ e & a & e \\ c & d & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c & d & b \\ e & a & e \\ b & d & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} b & d & c \\ e & a & e \\ c & d & b \end{pmatrix} = A, \end{aligned}$$

所以  $A$  是一中心對稱矩陣。

若有兩向量分別為  $a^T = (1, 2, 3, 2, 1)$ ,  $b^T = (1, 2, 0, -2, -1)$ , 則因為

$$Ja = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = a,$$

$$Jb = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = -b,$$

因此  $a$  是對稱的, 而  $b$  是斜對稱的。由以上的運算可發現, 若  $J$  乘上一矩陣  $M$ , 則  $JM$  此矩陣的列順序正好與  $M$  的列順序相反, 而若一矩陣  $M$  乘上  $J$ , 則  $MJ$  此矩陣的行順序正好與  $M$  的行順序相反。

Cantoni and Butler (1976) 此篇論文提供了一些中心對稱矩陣的性質, 以下介紹本章會用到的性質。

**定理 1.** (Cantoni and Butler, 1976) 若  $Q$  為一個  $m \times m$  的對稱以及中心對稱矩陣, 則

1. 若  $m$  為偶數, 則存在  $m/2 \times m/2$  的矩陣  $A$  與  $C$  使得  $Q$  可寫成

$$Q = \begin{pmatrix} A & C^T \\ C & JAJ \end{pmatrix}.$$

矩陣  $Q$  的  $m/2$  個特徵向量  $v_i$  為斜對稱的且互相直交(因為  $Q$  為對稱矩陣)。且特徵向量  $v_i$  可寫成

$$v_i = (1/\sqrt{2})[u_i, Ju_i]^T,$$

其中  $u_i$  為  $A-JC$  矩陣的特徵向量。而  $v_i$  對應的特徵值  $\kappa_i$  等同於  $A-JC$  矩陣中  $u_i$  對應的特徵值, 也就是說

$$(A - JC)u_i = \kappa_i u_i, i = 1, \dots, m/2.$$

另外  $m/2$  個矩陣  $Q$  的特徵向量  $v_i$  為對稱的且互相直交。特徵向量  $v_i$  可寫成

$$v_i = (1/\sqrt{2})[u_i, Ju_i]^T,$$

其中  $u_i$  為  $A+JC$  矩陣的特徵向量。而  $v_i$  對應的特徵值  $\kappa_i$  等同於  $A+JC$  矩陣中  $u_i$  對應的特徵值, 也就是

$$(A + JC)u_i = \kappa_i u_i, i = 1, \dots, m/2.$$

2. 若  $m$  為奇數, 則存在  $\lfloor m/2 \rfloor \times \lfloor m/2 \rfloor$  的矩陣  $A$  與  $C$ 、 $\lfloor m/2 \rfloor \times 1$  的向量  $s$  以及常數  $q$  使得  $Q$  可寫成

$$R = \begin{pmatrix} A & s & C^T \\ s^T & q & s^T J \\ C & Js & JAJ \end{pmatrix}$$

矩陣  $Q$  的  $\lfloor m/2 \rfloor$  個特徵向量  $v_i$  為斜對稱的且互相直交。特徵向量  $v_i$  可寫成

$$v_i = (1/\sqrt{2})[u_i, 0, -Ju_i]^T,$$

其中  $u_i$  為  $A-JC$  矩陣的特徵向量。而  $v_i$  對應的特徵值  $\kappa_i$  等同於  $A-JC$  矩陣中  $u_i$  對應的特徵值, 也就是

$$(A - JC)u_i = \kappa_i u_i, i = 1, \dots, \lfloor m/2 \rfloor.$$

另外  $\lfloor m/2 \rfloor + 1$  個矩陣  $Q$  的特徵向量  $v_i$  為對稱的且互相直交。特徵向量  $v_i$  可寫成

$$v_i = (1/\sqrt{2})[u_i, 2\alpha_i, Ju_i]^T,$$

其中  $\begin{pmatrix} u_i \\ \alpha_i \end{pmatrix}$  為  $\begin{pmatrix} A + JC & \sqrt{2}s \\ \sqrt{2}s^T & q \end{pmatrix}$  矩陣的特徵向量。而  $v_i$  對應的特徵值  $\kappa_i$  等同於  $\begin{pmatrix} A + JC & \sqrt{2}s \\ \sqrt{2}s^T & q \end{pmatrix}$  矩陣中  $\begin{pmatrix} u_i \\ \alpha_i \end{pmatrix}$  對應的特徵值，也就是

$$\begin{pmatrix} A + JC & \sqrt{2}s \\ \sqrt{2}s^T & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i \\ \alpha_i \end{pmatrix} = \kappa_i \begin{pmatrix} u_i \\ \alpha_i \end{pmatrix}, i = 1, \dots, \lfloor m/2 \rfloor + 1.$$

在介紹本節的主要定理之前，首先要介紹該定理證明會用到的一些性質。為了方便說明，以下所提的  $p$  水準  $n$  因子的  $p^n$  完全因子設計，若  $p$  水準數為奇數，令  $p = 2m + 1$ ，則定義  $p$  個水準為  $\{m, \dots, 1, 0, -1, \dots, -m\}$ 。若  $p$  水準數為偶數，令  $p = 2m$ ，則定義  $p$  個水準為  $\{m - 0.5, \dots, 0.5, -0.5, \dots, -m + 0.5\}$ 。且實驗設定順序皆使用 Yates order。例如二水準三因子的完全因子設計，Yates order 的設計矩陣即為

順序	因子1	因子2	因子3
1	—	—	—
2	+	—	—
3	—	+	—
4	+	+	—
5	—	—	+
6	+	—	+
7	—	+	+
8	+	+	+

可很容易推廣至多水準完全因子設計的 Yates order。

**引理 1.** 令  $p^n$  為一  $p$  水準  $n$  因子之完全因子設計，其實驗水準組合為  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$ ，在隨機域模型中相關係數矩陣  $R$  為透過 (2.1) 式求得。則其相關係數矩陣  $R$  為一個中心對稱矩陣，也就是  $R_{i,j} = R_{p^n-i+1, p^n-j+1}$ 。



證明. 在 Yates order 的完全因子設計中, 很明顯可看出此實驗水準組合滿足

$$|x_{i1} - x_{j1}| = |x_{(p^n-i+1)1} - x_{(p^n-j+1)1}|, \dots, |x_{in} - x_{jn}| = |x_{(p^n-i+1)n} - x_{(p^n-j+1)n}|, 1 \leq i, j \leq p^n,$$

則對上面的等式左右邊皆取平方並乘上每個因子對應的參數  $\lambda_i$  後得到

$$\lambda_1(x_{i1} - x_{j1})^2 = \lambda_1(x_{(p^n-i+1)1} - x_{(p^n-j+1)1})^2, \dots, \lambda_n(x_{in} - x_{jn})^2 = \lambda_n(x_{(p^n-i+1)n} - x_{(p^n-j+1)n})^2,$$

則我們能得到

$$\begin{aligned} R_{i,j} &= \exp\{-\lambda_1(x_{i1} - x_{j1})^2 - \dots - \lambda_n(x_{in} - x_{jn})^2\} \\ &= \exp\{-\lambda_1(x_{(p^n-i+1)1} - x_{(p^n-j+1)1})^2 - \dots - \lambda_n(x_{(p^n-i+1)n} - x_{(p^n-j+1)n})^2\} \\ &= R_{p^n-i+1, p^n-j+1} \end{aligned}$$

□

例 7. 假設有一  $3^2$  完全因子設計, 其設計矩陣  $D$  為

$$D^T = \begin{matrix} \text{因子1} \\ \text{因子2} \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & +1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

當  $\lambda_1 = 0.2, \lambda_2 = 0.1$  時, 則可以得到相關矩陣

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0.905 & 0.670 & 0.819 & 0.741 & 0.549 & 0.449 & 0.407 & 0.301 \\ 0.905 & 1 & 0.905 & 0.741 & 0.819 & 0.741 & 0.407 & 0.449 & 0.407 \\ 0.670 & 0.905 & 1 & 0.549 & 0.741 & 0.819 & 0.301 & 0.407 & 0.449 \\ 0.819 & 0.741 & 0.549 & 1 & 0.905 & 0.670 & 0.819 & 0.741 & 0.549 \\ 0.741 & 0.819 & 0.741 & 0.905 & 1 & 0.905 & 0.741 & 0.819 & 0.741 \\ 0.549 & 0.741 & 0.819 & 0.670 & 0.905 & 1 & 0.549 & 0.741 & 0.819 \\ 0.449 & 0.407 & 0.301 & 0.819 & 0.741 & 0.549 & 1 & 0.905 & 0.670 \\ 0.407 & 0.449 & 0.407 & 0.741 & 0.819 & 0.741 & 0.905 & 1 & 0.905 \\ 0.301 & 0.407 & 0.449 & 0.549 & 0.741 & 0.819 & 0.670 & 0.905 & 1 \end{pmatrix}$$

可以看到  $R_{i,j} = R_{9-i+1, 9-j+1}$  對於所有的  $1 \leq i, j \leq 9$ , 所以  $R$  為一個中心對稱矩陣。

**引理 2.** 假設  $p^n$  為一完全因子設計, 實驗設定為  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$ ,  $X$  為正交多項式所構成的固定效應模型 (2.4) 式中的模型矩陣, 則  $X$  的行向量皆為對稱的或斜對稱的。

證明. 從Wu and Hamada (2009)中得知正交多項式有以下形式:

$$\begin{aligned} P_1(x) &= x, \\ P_2(x) &= c_1x^2 + c_2, \\ P_3(x) &= c_3x^3 + c_4x, \\ P_4(x) &= c_5x^4 + c_6x^2 + c_7, \\ P_5(x) &= c_8x^5 + c_9x^3 + c_{10}x, \\ &\vdots \end{aligned}$$

其中  $c_1, \dots, c_{10}$  為某常數。可看出當  $i$  為奇數時, 正交多項式  $P_i(x)$  為奇函數(odd function), 也就是  $P_i(x) = -P_i(-x)$ , 而當  $i$  為偶數時, 正交多項式  $P_i(x)$  為偶函數 (even function), 也就是  $P_i(x) = P_i(-x)$ 。在 Yates order 的完全因子設計中, 若將各因子的水準設定視為向量, 則很明顯可看出各因子皆為斜對稱的。若將斜對稱的向量代入奇函數, 則還是斜對稱的向量, 而若將斜對稱的向量代入偶函數, 則為對稱的向量。也就是說, 若  $p^n$  完全因子設計的實驗設定為  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$ , 則當  $i$  為奇數,  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$  代入正交多項式  $P_i(\mathbf{x})$  後皆為斜對稱的, 當  $i$  為偶數,  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$  代入正交多項式  $P_i(\mathbf{x})$  後皆為對稱的。

我們可很容易地證明: 對稱與對稱的向量相乘為則為對稱的向量、斜對稱與對稱的向量相乘則為斜對稱的向量以及斜對稱與斜對稱的向量相乘則為對稱的向量。因此在(2.4) 式中交互作用的部分, 也皆為對稱的或斜對稱的。故得證  $X$  的行向量皆為對稱的或斜對稱的。  $\square$

由引理 2 的證明可很容易得知, 若  $p^n$  為偶數, 則模型矩陣中  $X$  有  $p^n/2$  個行向量是對稱的, 另外  $p^n/2$  個行向量是斜對稱的。若  $p^n$  為奇數, 則模型矩陣中  $X$  有  $\lfloor p^n/2 \rfloor$  個行向量是對稱的, 另外  $\lfloor p^n/2 \rfloor + 1$  個行向量是斜對稱的。

**定理 2.** 假設  $p^n$  為一完全因子設計, 實驗設定  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$ ,  $X$  為由正交多項

式所構成的固定效應模型 (2.4) 式中的模型矩陣, 而隨機域模型中相關係數矩陣  $R$  為透過 (2.1) 式求得, 則

1. 若  $p^n$  為偶數, 則相關係數矩陣  $R$  有  $p^n/2$  個的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  為對稱的, 且其與模型矩陣  $X$  中斜對稱的行向量直交, 另外  $p^n/2$  個的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  為斜對稱的, 且其與模型矩陣  $X$  中對稱的行向量直交。
2. 若  $p^n$  為奇數, 相關係數矩陣  $R$  有  $\lfloor p^n/2 \rfloor + 1$  個的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  為對稱的, 且其與模型矩陣  $X$  中斜對稱的行向量直交, 另外  $\lfloor p^n/2 \rfloor$  個的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  為斜對稱的, 且其與模型矩陣  $X$  中對稱的行向量直交。

證明. 由引理1可得知相關係數矩陣  $R$  為一個中心對稱的矩陣, 且我們已知  $R$  為一個對稱矩陣, 則由定理1可得知,

1. 若  $p^n$  為偶數, 則  $R$  有  $p^n/2$  個斜對稱的特徵向量  $[u_i, -Ju_i]^T$ ,  $p^n/2$  個對稱的特徵向量  $[u_i, Ju_i]^T$ . 且由引理2得知, 模型矩陣  $X$  的行向量皆為斜對稱的或對稱的, 假設  $X$  中某斜對稱的行向量為  $[b_i, -Jb_i]^T$ , 另外某對稱的行向量為  $[b_i, Jb_i]^T$ , 則斜對稱的特徵向量與模型矩陣  $X$  中對稱的行向量內積為

$$[u_i, -Ju_i][b_i, Jb_i]^T = u_i b_i^T - Ju_i b_i^T J^T = u_i b_i^T - u_i b_i^T = 0.$$

相同地, 對稱的特徵向量與模型矩陣  $X$  中斜對稱的行向量內積也為0。

2. 若  $p^n$  為奇數, 則  $R$  有  $\lfloor p^n/2 \rfloor$  個斜對稱的特徵向量  $[u_i, -Ju_i]^T$ ,  $\lfloor p^n/2 \rfloor + 1$  個對稱的特徵向量  $[u_i, Ju_i]^T$ . 且由引理2得知, 模型矩陣  $X$  的行向量皆為斜對稱的或對稱的, 假設  $X$  中某斜對稱的行向量為  $[b_i, 0, -Jb_i]^T$ , 另外某對稱的行向量為  $[b_i, \delta_i, Jb_i]^T$ , 則斜對稱的特徵向量與模型矩陣  $X$  中對稱的行向量內積為

$$[u_i, 0, -Ju_i][b_i, \delta_i, Jb_i]^T = u_i b_i^T - Ju_i b_i^T J^T = u_i b_i^T - u_i b_i^T = 0.$$

相同地, 對稱的特徵向量與模型矩陣  $X$  中斜對稱的行向量內積也為0。

□

從引理 2 的證明以及定理 2 得知, 相關係數矩陣  $R$  中斜對稱的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  與偶數階的正交多項式直交, 也就是斜對稱的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  中並無偶數階的正交多項式之貢獻。相關係數矩陣  $R$  中對稱的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  與奇數階的正交多項式直交, 也就是對稱的特徵向量  $\mathbf{v}_i$  中並無奇數階的正交多項式之貢獻。定理 2 是某個固定的實驗順序下討論, 但我們可很容易地將這個結論推廣至其他任意的實驗順序。

### 2.3.2 效應的重要性

在 2.3 節開頭我們已說明在隨機效應模型下, 效應的重要性可用隨機效應的變異數  $\text{var}(\beta_i)$  為依據, 變異數越大則該效應的重要性越高。在 2.2 節中利用隨機效應模型與隨機域模型的連結, 得到了隨機域模型  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \varepsilon$  可改寫成隨機效應模型  $Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{p^n} \beta_i v_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ , 其中  $v_i(\mathbf{x}_j) = v_{ij}$ , 且隨機域模型中相關係數函數的特徵值  $\kappa_i$  等同於隨機效應模型中效應的變異數  $\text{var}(\beta_i)$ , 因此, 可用隨機域模型中相關係數矩陣的特徵值  $\kappa_i$  來當作在隨機域模型中效應重要性的指標。

**例 8.** 若是有一個三水準的二因子完全因子設計, 二因子分別記為  $A, B$ , 因子設定如同例 5, 則固定效應模型的模型矩陣  $X$  也如同例 5。隨機域模型中相關係數函數的參數分別為  $\lambda_1, \lambda_2$ , 若給定  $\lambda_1 = 0.25, \lambda_2 = 0.05$ , 則相關係數矩陣的單位

特徵向量爲

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \mathbf{v}_3 & \mathbf{v}_4 & \mathbf{v}_5 & \mathbf{v}_6 & \mathbf{v}_7 & \mathbf{v}_8 & \mathbf{v}_9 \\ -0.307 & -0.402 & -0.382 & 0.26 & 0.5 & 0.323 & -0.227 & -0.298 & 0.192 \\ -0.321 & -0.421 & 0 & 0.272 & 0 & 0 & 0.434 & 0.568 & -0.367 \\ -0.307 & -0.402 & 0.382 & 0.260 & -0.5 & -0.323 & -0.227 & -0.298 & 0.192 \\ -0.367 & 0 & -0.457 & -0.434 & 0 & -0.540 & -0.272 & 0 & -0.321 \\ -0.385 & 0 & 0 & -0.454 & 0 & 0 & 0.519 & 0 & 0.613 \\ -0.367 & 0 & 0.457 & -0.434 & 0 & 0.540 & -0.272 & 0 & -0.321 \\ -0.307 & 0.402 & -0.382 & 0.260 & -0.5 & 0.323 & -0.227 & 0.298 & 0.192 \\ -0.321 & 0.421 & 0 & 0.272 & 0 & 0 & 0.434 & -0.568 & -0.367 \\ -0.307 & 0.402 & 0.382 & 0.26 & 0.5 & -0.323 & -0.227 & 0.298 & 0.192 \end{pmatrix},$$

其中  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_9$  對應到的特徵值  $\kappa_1, \dots, \kappa_9$  分別爲  $6.477 > 1.780 > 0.417 > 0.189 > 0.115 > 0.012 > 0.007 > 0.002 > 0.000$ 。

因爲

$$\Gamma^T X = \begin{pmatrix} I & A & B & AB & A^2 & B^2 & A^2B & AB^2 & A^2B^2 \\ \mathbf{v}_1 & -0.996 & 0 & 0 & 0 & 0.087 & 0.022 & 0 & 0 & -0.002 \\ \mathbf{v}_2 & 0 & -0.999 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.022 & 0 \\ \mathbf{v}_3 & 0 & 0 & -0.996 & 0 & 0 & 0 & 0.087 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_4 & 0.087 & 0 & 0 & 0 & 0.996 & -0.002 & 0 & 0 & -0.022 \\ \mathbf{v}_5 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_6 & 0 & 0 & 0.087 & 0 & 0 & 0 & 0.996 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_7 & -0.022 & 0 & 0 & 0 & 0.002 & -0.996 & 0 & 0 & 0.087 \\ \mathbf{v}_8 & 0 & -0.022 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.999 & 0 \\ \mathbf{v}_9 & 0.002 & 0 & 0 & 0 & 0.022 & 0.087 & 0 & 0 & 0.996 \end{pmatrix},$$

得到

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1 &= -0.996 + 0.087A^2 + 0.022B^2 - 0.002A^2B^2 \approx -I, \\
\mathbf{v}_2 &= -0.999A + 0.022AB^2 \approx -A, \\
\mathbf{v}_3 &= -0.996B + 0.087A^2B \approx -B, \\
\mathbf{v}_4 &= 0.087 + 0.996A^2 - 0.002B^2 - 0.022A^2B^2 \approx A^2, \\
\mathbf{v}_5 &= AB = AB, \\
\mathbf{v}_6 &= 0.087B + 0.996A^2B \approx A^2B, \\
\mathbf{v}_7 &= -0.022 + 0.002A^2 - 0.996B^2 + 0.087A^2B^2 \approx -B^2, \\
\mathbf{v}_8 &= -0.022A - 0.999AB^2 \approx -AB^2, \\
\mathbf{v}_9 &= 0.002 + 0.022A^2 + 0.087B^2 + 0.996A^2B^2 \approx A^2B^2,
\end{aligned}$$

可知隨機域模型  $v_i$  皆可由某個正交多項式效應所解釋。我們將隨機域模型  $v_i$  效應與對應的固定效應模型的正交多項式效應，以及對應的重要性指標  $\kappa_i$  整理成表 2.1。由表可知，隨機域模型  $v_i$  效應對應的固定效應模型中的效應，其重要性排

表 2.1: 隨機域模型各效應與對應之固定效應模型下的正交多項式效應，以及各效應的重要性指標

隨機域模型 應 $v_i$	固定效應模型 效應 $X_i$	重要性 $\kappa_i$	隨機域模型 效應 $v_i$	固定效應模型 效應 $X_i$	重要性 $\kappa_i$
$v_1$	$I$	6.477	$v_5$	$AB$	0.115
$v_2$	$A$	1.780	$v_6$	$A^2B$	0.012
$v_3$	$B$	0.417	$v_7$	$B^2$	0.007
$v_4$	$A^2$	0.189	$v_8$	$AB^2$	0.002
			$v_9$	$A^2B^2$	0.000

序為  $I > A > B > A^2 > AB > A^2B > B^2 > AB^2 > A^2B^2$ 。因隨機域模型中的參數照大小排序為  $\lambda_1 (= 0.25) > \lambda_2 (= 0.05)$ ，這表示此模型在  $A$  這個因子上具有較高的複雜度，也就是  $A$  是影響反應變數較多的因子，而  $B$  這個因子上具有較低的複雜度，也就是  $B$  是影響反應變數較少的因子。所以在效應的重要性排序上可以看到  $A > B$  的順序，並可觀察到包含  $A$  的高階效應比僅包含  $B$  的低階的效應重要的情形，如  $A^2B > B^2$ ，這是因為包含因子  $A$  的效應之重要性都會

提高的關係。關於隨機域模型的模型複雜度與其參數  $\lambda_i$  的關係在第三章第二節會有更詳細的說明。





## 第 3 章

### 隨機域模型下的效應混淆

#### 3.1 模型複雜度與效應混淆

在固定效應模型中，以二水準的實驗設計來看，在第一章文獻回顧中已說明在部分因子設計下，當估計某效應而事實上估計到其他效應時，我們稱為產生混淆。在固定效應模型中效應重要性若依等級排序原則，則可使用最高解析度準則或是最小偏差準來評估效應混淆的程度。然而在隨機域模型下，效應的重要性與參數  $\lambda$  相關，如在例 8 中我們可以發現在參數  $\lambda_i$  不同的情況下，則有可能出現高階效應較低階效應重要的情況，這與固定效應模型中效應重要性的等級排序原則有差別，因此在固定效應模型中評估混淆嚴重程度的準則並不完全適用在隨機域模型下。

我們可以用另一個觀點來看到效應混淆，若真實模型的重要效應不多時，我們稱為是一個簡單的模型，反之則稱複雜的模型。舉例來說，在固定效應模型中，若有一個只包含主效應的簡單模型，則對於解析度為 III 的設計，就不會有主效應與主效應產生混淆，因此解析度為 III 以上的設計便足以承受如此簡單的模型。但若對一個較複雜模型，比如包含主效應以及所有的二因子交互作用效應，那麼解析度 III 的設計便因為主效應會與二因子交互作用產生混淆而無法承受這個較複雜的模型，這時便必須增加實驗次數來提高設計的解析度，才能承受較複雜的模型。由以上討論，我們得知每一個部分因子設計都有可承受的模型複雜度上限，當模型複雜度超過此設計所能承受的負荷，便會產生混淆。換句話說，若選定一設計，當模型複雜度不斷提升時，則效應混淆的程度則會越嚴重，此觀點在隨機域模型中



一樣適用。以下我們有興趣在隨機域模型中觀察模型的複雜度如何隨參數  $\lambda_i$  改變而產生變化。

### 3.2 隨機域模型之模型複雜度

在隨機域模型中, 反應變數與因子之間的關聯是由  $Y$  的共變異矩陣來建立的, 我們可以由模型的相關係數函數來了解模型的複雜程度。本篇論文所使用的相關係數函數為

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \prod_s \exp\{-\lambda_s(x_{1s} - x_{2s})^2\},$$

首先定義  $C_r = \{\mathbf{x} | R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) \geq r\}$ , 此為與  $\mathbf{x}_1$  相關係數  $\geq r$  的區域, 也就是說這區域內的任意點  $\mathbf{x}$  皆與  $\mathbf{x}_1$  相關性至少為  $r$ 。很明顯地, 若  $r$  值越大, 則表示  $\mathbf{x}$  與  $\mathbf{x}_1$  的相關性越高。而隨著  $r$  變大,  $C_r$  的範圍亦會變小。對兩個  $\lambda$  不同的隨機域模型, 我們可藉由比較它們的  $C_r$  範圍大小, 來了解它們的模型複雜度。 $C_r$  的範圍越廣, 也就是說, 當我們知道  $\mathbf{x}_1$  的資訊則可知道  $\mathbf{x}_1$  附近越廣的資訊, 這種情況我們可視模型是較簡單的。反之若  $C_r$  的範圍越小, 也就是說, 當我們知道  $\mathbf{x}_1$  的資訊則可知道  $\mathbf{x}_1$  附近越小範圍的資訊, 這種情況我們可視模型是較複雜的。由於

$$r = R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \prod_s \exp\{-\lambda_s(x_{1s} - x_{2s})^2\} = \exp\left\{-\sum_s \lambda_s(x_{1s} - x_{2s})^2\right\},$$

對兩邊同取  $\log$  得:

$$-\log r = \sum_s \lambda_s(x_{1s} - x_{2s})^2, \quad \text{其中 } r > 0,$$

可發現此相關區域為一個高維度橢球, 其中第  $j$  維的半軸長為  $\sqrt{-\log r / \lambda_j}$ 。若固定相關性  $r$ , 當  $\lambda_j$  越小, 表示第  $j$  維的半軸長則越大, 那麼第  $j$  維的相關區域也越大, 模型在第  $j$  維度上則越簡單。反之當  $\lambda_j$  越大, 表示第  $j$  維的半軸長則越小, 那麼第  $j$  維的相關區域也越小, 模型在第  $j$  維度上則越複雜。因此, 在該隨機域模型下模型的複雜度可由相關區域大小進而簡化為由參數  $\lambda_1, \dots, \lambda_k$  的大小來表示。

### 3.3 效應混淆程度

由前兩節我們得知，固定一個設計，當模型複雜度提升時，則該設計的效應混淆程度會越嚴重。而在隨機域模型下，模型複雜度是由相關係數函數中的參數  $\lambda_1, \dots, \lambda_k$  所決定的，當參數越大，該因子之模型複雜度則越高。Wang (2009) 論文已探討若使用兩水準的正規部分因子設計，在隨機域模型下的效應混淆情形。然而在電腦實驗中，因子的水準數通常較多。又因為成本與時間的考量，經常無法使用完全因子設計而需使用部分因子設計，例如拉丁方陣設計(Latin hypercube design)。故我們想了解多水準部分因子設計在隨機域模型底下的效應混淆情形，以下將從兩個不同的角度來說明在部分因子設計下的隨機域模型是如何產生效應混淆。

#### 3.3.1 由固定效應模型之角度

在第二章中曾說明對  $p^n$  完全因子設計，隨機域模型  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \varepsilon$  如何透過隨機效應模型的連結得到對應的固定效應模型  $Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{p^n} \beta_i v_i(\mathbf{x}) + \varepsilon$ ，且發現在大部分的情形  $v_i$  效應皆可很接近  $X_i$  效應，其中  $X_i$  是以固定效應模型建模時的正交多項式效應，所以我們可假設此隨機域模型對應到的固定效應模型與 (2.4) 式相差不大。接下來我們要將固定效應模型下效應混淆概念推廣至隨機域模型，並觀察隨機域模型下的混淆結構。

在固定效應模型中，經常利用混淆矩陣來觀察混淆結構，在本節我們將把固定效應模型的混淆矩陣概念推廣至隨機域模型來觀察混淆結構。若現在有一個定義關係為  $I = ABD = ACE = BCDE$  的  $2^{5-2}$  部分因子設計，這是一個具有完全混淆性質的設計，在固定效應模型下若我們現在想估計  $\beta_A$ ，那麼可得到

$$E(\hat{\beta}_A) = \beta_A + \beta_{BD} + \beta_{CE} + \beta_{ABCDE}.$$

對此我們可以解釋為本來想估計  $\beta_A$  而事實上是估計  $\beta_A + \beta_{BD} + \beta_{CE} + \beta_{ABCDE}$  的綜合效應，所以會認為  $A, BD, CE, ABCDE$  這四個效應產生了混淆。

若現在有一個不完全混淆結構，如例3的兩水準三因子部分設計，此設計為6

個試驗次數, 若想估計  $\beta_I$ , 可以得到

$$E(\hat{\beta}_I) = \beta_I - \frac{1}{3}\beta_A - \frac{1}{3}\beta_B - \frac{1}{3}\beta_{AB}.$$

同樣的, 我們也可以解釋為本來想估計  $\beta_I$ , 但實際上是估計  $\beta_I - \frac{1}{3}\beta_A - \frac{1}{3}\beta_B - \frac{1}{3}\beta_{AB}$ 。所以我們會認為  $I$  與  $A, B, AB$  這四個效應產生了不完全混淆。

若已知產生混淆, 並且想知道混淆的嚴重程度, 則必須先知道混淆在一起的各效應的重要性。在固定效應模型中, 常由等級排序原則來描述效應重要性。以前段所提到的定義關係為  $I = ABD = ACE = BCDE$  的  $2^{5-2}$  部分因子設計為例, 在此定義關係中, 常數效應與兩個三階效應以及一個四階效應混淆, 如果我們認為三階以上的效應為較不重要且可省略, 會認為此設計混淆不嚴重。相反的, 如果我們認為三階以上效應很重要且不可省略, 那此設計混淆程度變較嚴重。同樣的, 此概念也可以套用到不完全混淆結構的設計。在前段的例3中, 我們知道  $I$  與  $A, B, AB$  這四個效應產生了不完全混淆, 也就是常數效應與兩個一階效應以及一個二階效應混淆, 但係數皆為  $-\frac{1}{3}$ 。如果我們認為一階以上的效應為較不重要且可省略, 會認為此設計混淆不嚴重。相反的, 如果我們認為一階以上效應很重要且不可省略, 那此設計的混淆程度變較嚴重, 且隨著係數越大越嚴重。

由以上的敘述我們做出以下結論: 效應混淆之嚴重程度由兩方面決定, 包括

1. 效應的重要性。固定效應模型中, 可由參數  $\beta_i$  的大小來決定效應的重要性。
2. 混淆矩陣之係數。混淆矩陣之係數是由設計所決定。

這些關於效應混淆的概念皆建立在固定效應模型下, 以下我們將效應的重要性推廣至隨機域模型, 並以同樣的概念來描述效應混淆。

我們在第二章中已經說明在隨機效應模型中, 效應的重要性可以由隨機效應的變異數  $\text{var}(\beta_i)$  來判斷。在固定效應模型中, 我們可觀察  $\beta_I, -\frac{1}{3}\beta_A, -\frac{1}{3}\beta_B, -\frac{1}{3}\beta_{AB}$  這四項的大小來判斷混淆程度。而在隨機效應模型裡, 若假設隨機效應之間彼此獨立, 則可用  $\text{var}(\beta_I), \frac{1}{9}\text{var}(\beta_A), \frac{1}{9}\text{var}(\beta_B), \frac{1}{9}\text{var}(\beta_{AB})$  的大小來描述此四項的混淆程度。若使用在第二章提及的隨機效應模型與隨機域模型之連結, 可將隨機效應模型的效應變異數  $\text{var}(\beta_i)$  視為隨機域模型中相關係數矩陣的特徵值  $\kappa_i$ 。因此

若我們想知道例3此設計在隨機域模型下的混淆程度, 則可比較  $\kappa_I, \frac{1}{9}\kappa_A, \frac{1}{9}\kappa_B, \frac{1}{9}\kappa_{AB}$  的相對比例。

以上是用例子來簡單介紹如何將固定效應模型中混淆矩陣的概念透過隨機效應模型連接到隨機域模型, 以下我們將詳細地說明在部分因子設計下的隨機域模型中, 如何觀察效應混淆的嚴重程度。在第一章文獻回顧中我們提到, 若真實模型為  $\mathbf{y} = \mathbf{X}_1\boldsymbol{\beta}_1 + \mathbf{X}_2\boldsymbol{\beta}_2 + \boldsymbol{\epsilon}$ , 而我們用  $\mathbf{y} = \mathbf{X}_1\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\epsilon}$  當配適模型, 則會得到  $E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_1) = \boldsymbol{\beta}_1 + (\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1)^{-1}\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_2\boldsymbol{\beta}_2$ 。若  $\mathbf{X}_1$  為模型矩陣中某一效應  $X_i$ ,  $\mathbf{X}_2$  放模型矩陣中其他的效應, 可得到

$$E(\hat{\beta}_i) = \beta_i + (\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1)^{-1}X_i^T\mathbf{X}_2\boldsymbol{\beta}_2 = \beta_i + \sum_{j=1, i \neq j} a_{ij}\beta_j,$$

其中  $-1 \leq a_{ij} \leq 1$ ,  $a_{ij} = \frac{X_i^T X_j}{\|X_i\|^2}$ ,  $a_{ij}$  與  $X_j$  在  $X_i$  的方向上之投影量相關, 可視為這兩個效應相似性的指標。我們得知  $X_i$  效應與  $X_{s_i}$  效應有不完全混淆, 其中  $s_i \in \{j | a_{ij} \neq 0\}$ , 我們將  $X_j$  效應與  $X_{s_i}$  這些效應, 視為同一個混淆集合, 且稱此混淆集合為  $X_i$  效應的混淆集合。在隨機效應模型中, 我們可以由  $\text{var}(\beta_i)$  與  $a_{s_i}^2 \text{var}(\beta_{s_i})$  的相對比例, 來知道同一混淆集合中混淆的情形是否嚴重。亦即在隨機域模型中, 可以由  $\kappa_i$  與  $a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$  的相對比例, 來了解同一混淆集合中效應混淆的嚴重程度。

我們將以上的想法總結如下。若有一個  $p$  水準  $n$  個因子的部分因子設計, 對給定的  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ , 可先算出由  $p^n$  完全因子設計下得到之相關係數矩陣的特徵值且由大到小依序為  $\kappa_1 \geq \kappa_2 \geq \dots \geq \kappa_{p^n}$ 。而對每個部分因子設計, 皆有  $p^n$  個混淆集合, 其中第  $i$  個混淆集合的混淆程度可由  $\kappa_i$  與  $a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$  來衡量,  $s_i \in \{j | a_{ij} \neq 0\}$ 。首先, 我們提出若要觀察一個設計之效應混淆程度, 可以從該設計之混淆集合內的效應混淆程度著手, 我們可以藉由比較  $\kappa_i$  與  $a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$  是否接近來觀察混淆程度:

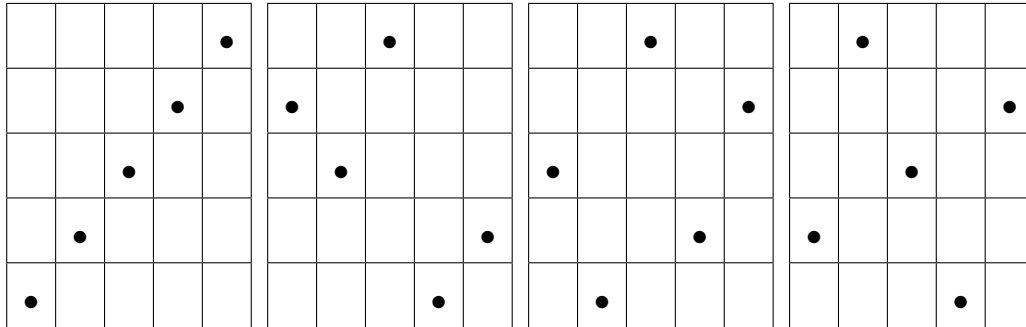
1. 若是  $\kappa_i$  遠大於  $a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$ , 則此混淆集合內效應混淆的程度相當輕微。
2. 令  $s_i \in \{j | a_{ij} \neq 0\}$ , 若是一個混淆集合裡存在  $s_i$  使得  $\kappa_i \approx a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$  或  $\kappa_i \ll a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$ , 那麼  $X_i$  此效應與  $X_{s_i}$  效應的混淆情形已發生。
3. 若是一個混淆集合裡有很多  $s_i$  使得  $\kappa_i \approx a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$  或  $\kappa_i \ll a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$ , 代表該混淆集合內效應混淆的程度很嚴重。

以上是判定一個混淆集合內的效應混淆程度的方法，但只觀察混淆集合內的效應混淆程度是有問題，若是該混淆集合中  $\kappa_i \approx a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$ ，雖然我們可以得到此效應與  $X_{s_i}$  混淆很嚴重的結論，但若  $\kappa_i$  此效應特徵值很小，也就是說  $X_i$  效應並不重要，那麼雖然此混淆集合中混淆很嚴重，也不應該認定為該設計之效應混淆程度很嚴重，因為對這些不重要的效應與哪些效應產生了嚴重的混淆，我們並沒有興趣。因此若要判斷一個設計的效應混淆嚴重程度，除了觀察一個混淆集合內的效應混淆程度之外，還必須觀察  $\kappa_i$  的大小。若是第  $i$  個混淆集合的  $\kappa_i$  相對其他混淆集合的  $\kappa_j$  大，且該混淆集合內之效應混淆嚴重才應該被視為設計之效應混淆程度高。

以上的方法是對一個  $\lambda$  固定的隨機域模型，也就是模型之複雜度已固定之下，觀察一個設計的效應混淆程度。以下我們將用例子來比較四個部分因子設計的效應混淆嚴重程度，並觀察改變  $\lambda$  使得模型的複雜度漸漸提升時，效應混淆越趨嚴重的情形。我們將會發現當模型越複雜，對單一混淆集合內的混淆情形會越嚴重。

**例 9.** 假設現在有四個五水準兩因子部分因子設計，實驗次數為5次，二因子分別為  $A, B$ ，此四個設計分別為：

(1)			(2)			(3)			(4)		
Run	A	B	Run	A	B	Run	A	B	Run	A	B
1	2	2	1	2	-1	1	2	1	1	2	1
2	1	1	2	1	-2	2	1	-1	2	1	-2
3	0	0	3	0	2	3	0	2	3	0	0
4	-1	-1	4	-1	0	4	-1	-2	4	-1	2
5	-2	-2	5	-2	1	5	-2	0	5	-2	-1





這四個設計皆為拉丁方陣設計。設計 (1) 的實驗點皆落在對角線上，很明顯是一個不均勻分配的拉丁方陣設計，設計 (2) 的實驗點較設計 (1) 均勻些，設計 (3) 是一個均勻的拉丁方陣設計，設計 (4) 為Ye (1998)所提出的正交拉丁方陣設計。

令隨機域模型中相關係數函數中因子對應的參數為  $\lambda_1, \lambda_2$ ，為簡化討論，我們將假設  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ 。圖3.1為在  $5^2$  完全因子設計下，各特徵值  $\kappa_i$  隨著  $\lambda$  改變的變化，由於不希望造成圖形中有太多線而不易觀察，因此將原本有25個效應特徵值只畫上數個較大的效應特徵值。由圖3.1可發現，隨著  $\lambda$  的改變，效應特徵值的排序皆為  $\kappa_I > \kappa_A = \kappa_B > \kappa_{AB} > \kappa_{A^2} = \kappa_{B^2} > \kappa_{AB^2} = \kappa_{A^2B}$ ，且在  $\lambda$  越大時，所有的效應特徵值均向1逼近，這表示在  $\lambda$  大時，所有效應皆不可忽略，故需要較複雜的模型才能描述因子與反應值的關係。圖3.2 ~ 3.5呈現了設計 (1) ~ (4) 之混淆集合隨著  $\lambda$  改變的混淆情形。由於版面有限，我們只放了最重要的4個混淆集合，分別為 (a) 常數效應 (b)  $A$  的線性效應 (c)  $B$  的線性效應以及 (d)  $A, B$  的線性交互作用效應這四個混淆集合。其中實線代表主要的效應，即為  $\kappa_i$ ，其他虛線皆為部分混淆的效應，即為  $a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$ 。

從圖3.2 ~ 3.5可發現，當  $\lambda$  越大時，即模型趨向複雜時，這些有混淆的效應特徵值 (即  $\kappa_i$  與  $a_{s_i}^2 \kappa_{s_i}$ ) 皆漸漸靠近，即效應混淆程度越來越嚴重。接下來我們比較這四個設計混淆嚴重程度。我們先觀察常數項與其他效應混淆的程度，因此我們先觀察圖3.2 ~ 3.5的 (a) 圖，可發現設計 (1) 與設計 (2) 的圖中發生  $\kappa_I \approx a_{s_I}^2 \kappa_{s_I}$  的情形要比設計 (3) 與設計 (4) 較早發生，顯示對此混淆集合，設計 (1) 與設計 (2) 的效應混淆程度較設計 (3) 與設計 (4) 嚴重。同樣的看法我們再觀察因子  $A$  的線性效應與其他效應混淆的程度，由圖3.2 ~ 3.5的 (b) 圖，可發現設計 (1) 的圖中發生  $\kappa_A \approx a_{s_A}^2 \kappa_{s_A}$  的情形要比設計 (2) 較早發生 (設計 (1) 的圖中實線與其中一條虛線完全重疊)，顯示對此混淆集合，設計 (1) 的效應混淆程度較設計 (2) 嚴重。設計 (4) 的圖中發生  $\kappa_A \approx a_{s_A}^2 \kappa_{s_A}$  的情形要比設計 (3) 較早發生，顯示對此混淆集合，設計 (4) 的效應混淆程度較設計 (3) 嚴重。另外可用相同的方式由圖3.2 ~ 3.5的 (c)、(d) 圖分別觀察因子  $B$  的線性效應以及  $AB$  的交互作用效應與其他效應混淆的程度。從上述內容可發現在同樣的模型複雜度下，設計 (3) 為這四個設計中混淆程度較不嚴重的。但若要清楚的比較這四

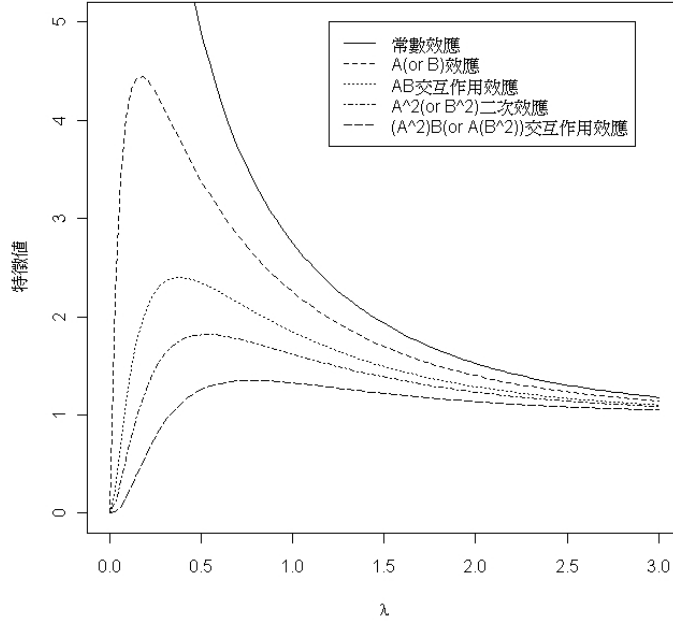


圖 3.1:  $5^2$  完全因子設計中各效應的特徵值曲線

個設計的效應混淆嚴重程度，必須要發展準則來量化效應混淆的程度，這是未來可繼續探討的研究。

### 3.3.2 由隨機域模型之角度

在  $p^n$  完全因子設計下，從第二章中三種模型的連結可得到由隨機域模型  $Y(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}) + \epsilon$  建模，可等同於隨機效應模型

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{p^n} \beta_i \mathbf{v}_i + \epsilon, \beta_i \sim N(0, \sigma^2 \kappa_i),$$

其中  $\mathbf{v}_i, \kappa_i$  分別為  $p^n \times p^n$  相關係數矩陣  $R$  的特徵向量以及特徵值，其中  $\mathbf{y} = (Y(\mathbf{x}_1), \dots, Y(\mathbf{x}_{p^n}))'$ ,  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{p^n}$  為實驗設定。若從  $p^n$  個水準組合中挑選出  $r$  個水準組合的部分因子設計，其中  $r < p^n$ ，同樣的我們可以透過三種模型的連結得到隨機域模型可等同於隨機效應模型

$$\mathbf{y}^* = \sum_{i=1}^r \beta_i^* \mathbf{v}_i^* + \epsilon, \beta_i \sim N(0, \sigma^2 \kappa_i^*),$$

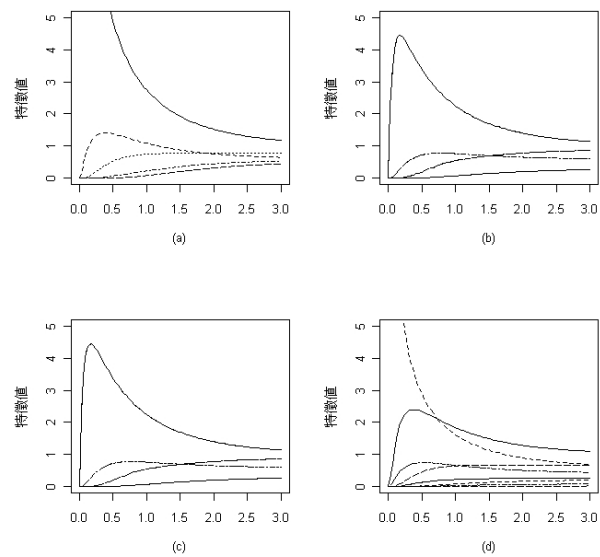


圖 3.2: 例5中設計 (1) 的混淆集合之效應特徵值曲線

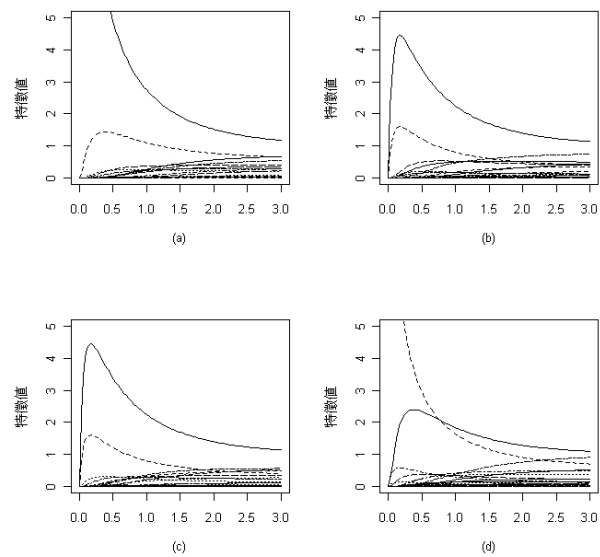


圖 3.3: 例5中設計 (2) 的混淆集合之效應特徵值曲線



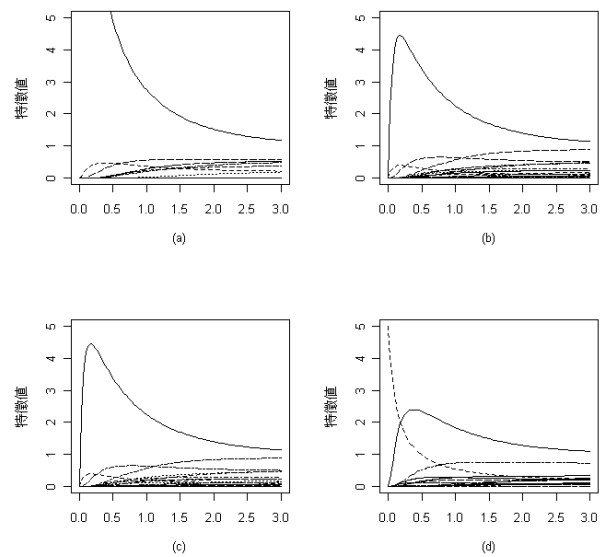


圖 3.4: 例5中設計 (3) 的混淆集合之效應特徵值曲線

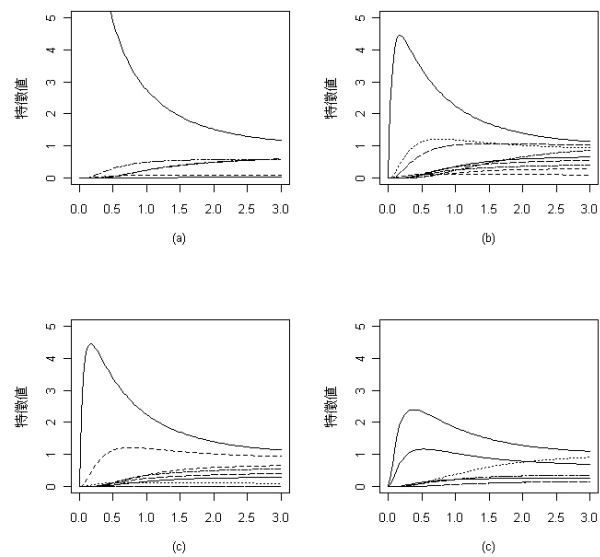


圖 3.5: 例5中設計 (4) 的混淆集合之效應特徵值曲線

其中  $\mathbf{v}_i^*, \kappa_i^*$  分別為  $r \times r$  相關係數矩陣  $R^*$  的特徵向量以及特徵值, 其中  $\mathbf{y}^* = (Y(\mathbf{x}_1^*), \dots, Y(\mathbf{x}_r^*))', \mathbf{x}_1^*, \dots, \mathbf{x}_r^*$  為實驗設定。

我們知道隨機效應模型與固定效應模型有相同的線性結構, 所以我們將用在固定效應模型下已發展的性質與方法來說明隨機域模型下的混淆情形。假設  $L$  為一個  $r \times p^n$  矩陣, 若部分因子設計第  $i$  組水準組合等於原完全因子設計中第  $j$  組水準組合, 也就是部分因子設計中實驗設定  $\mathbf{x}_i^*$  等同於完全因子設計中實驗設定  $\mathbf{x}_j$ , 則矩陣  $L$  的  $ij$  元為 1, 其他皆為 0。則很容易可得知  $\mathbf{y}^* = L\mathbf{y}$ 。

假設有一個  $r$  組試驗次數的部分因子設計, 在固定效應模型下我們有真實模型為

$$\mathbf{y}^* = L\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{p^n} \beta_i L\mathbf{v}_i + \boldsymbol{\epsilon},$$

而用來配適的模型為  $\mathbf{y}^* = \sum_{i=1}^r \beta_i^* \mathbf{v}_i^* + \boldsymbol{\epsilon}$ , 利用最小平方估計法可以得到

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^* = (\Gamma^{*T} \Gamma^*)^{-1} \Gamma^{*T} \mathbf{y}^*,$$

其中  $\boldsymbol{\beta}^* = (\beta_1^*, \dots, \beta_n^*)', \Gamma^* = (\mathbf{v}_1^*, \dots, \mathbf{v}_n^*), \Gamma^{*T} \Gamma^* = I$ 。那麼在真實模型下, 可得到期望值

$$\begin{aligned} E(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*) &= (\Gamma^{*T} \Gamma^*)^{-1} \Gamma^{*T} E(\mathbf{y}^*) \\ &= \Gamma^{*T} L \Gamma \boldsymbol{\beta}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

為了方便說明, 以下將定義

$$\Gamma^{*T} L \Gamma = G = \begin{pmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1p^n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{r1} & \cdots & g_{rp^n} \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

由 (3.1) 得知  $\hat{\beta}_i^*$  的期望值為真實模型下  $\beta_1, \dots, \beta_{p^n}$  的線性組合, 即  $g_{i1}\beta_1 + \dots + g_{ip^n}\beta_{p^n}$ 。如同上一節的概念, 我們事實上是估計綜合效應  $g_{i1}\beta_1 + \dots + g_{ip^n}\beta_{p^n}$ , 因此會認為  $\beta_{s_i}, s_i \in \{j | g_{ij} \neq 0\}$  這些效應產生了不完全混淆, 且係數與效應的重要程度可決定效應混淆的嚴重程度。我們視  $g_{i1}\beta_1, \dots, g_{ip^n}\beta_{p^n}$  為第  $i$  個混淆集合。

我們已從隨機域模型透過隨機效應模型來連結固定效應模型, 且觀察到此固定效應模型的混淆情形, 接著我們將類似上一節的作法, 推廣至隨機域模型, 觀察隨機域模型下的混淆結構。在固定效應模型中, 我們可由  $g_{i1}\beta_1, \dots, g_{ip^n}\beta_{p^n}$  部分之重要程度的相對比例來知第  $i$  個混淆集合混淆的情形。在隨機效應模型, 我們則由  $g_{i1}^2 \text{var}(\beta_1), \dots, g_{ip^n}^2 \text{var}(\beta_{p^n})$  的相對比例來知道第  $i$  個混淆集合混淆的情形。透過第二章隨機效應模型與隨機域模型的連結, 因為隨機效應模型的效應變異數  $\text{var}(\beta_i)$  可視為隨機域模型相關係數矩陣的特徵值  $\kappa_i$ , 所以在隨機域模型中, 我們由  $g_{i1}^2 \kappa_1, \dots, g_{ip^n}^2 \kappa_{p^n}$  的相對比例來了解第  $i$  個混淆集合混淆內的嚴重程度。

此外, 我們並發現

$$GG^T = \Gamma^{*T} L \Gamma \Gamma^T L^T \Gamma^* = \Gamma^{*T} L L^T \Gamma^* = \Gamma^{*T} \Gamma^* = I,$$

也就是說,  $G$  矩陣內的列向量彼此之間互相直交, 且平方和為 1。我們得知第  $i$  列元素取平方  $g_{i1}^2, g_{i2}^2, \dots, g_{ip^n}^2$  的總和皆為 1, 這表示  $g_{i1}^2 \kappa_1, \dots, g_{ip^n}^2 \kappa_{p^n}$  可解釋為對於第  $i$  個混淆集合中, 每個重要性指標  $\kappa_1, \dots, \kappa_{p^n}$  分別貢獻了  $g_{i1}^2, g_{i2}^2, \dots, g_{ip^n}^2$  的比例, 這些比例總和為 1。

與前一節相同的, 除了觀察混淆集合內的效應混淆程度, 我們還必須觀察每個混淆集合的重要程度, 若此混淆集合為不重要的, 則雖然此混淆集合中效應混淆很嚴重, 但因為此混淆集合較不重要, 對此混淆集合中哪些效應產生混淆我們自然並無太大的興趣。我們可由  $g_{i1}^2 \kappa_1, \dots, g_{ip^n}^2 \kappa_{p^n}$  的總和當作第  $i$  個混淆集合的重要性指標, 並且發現

$$g_{i1}^2 \kappa_1 + \dots + g_{ip^n}^2 \kappa_{p^n} = \kappa_i^*,$$

其中  $\kappa_i^*$  為相關係數矩陣  $R^*$  的特徵值, 這表示  $R^*$  的特徵值  $\kappa_i^*$  可解釋為對原本相關係數矩陣特徵值  $\kappa_1, \dots, \kappa_{p^n}$  做了一些權重再加總, 這些權重相加等於 1。以下將證明此結果。

**定理 2.** 假設  $p^n$  完全因子設計, 相關係數矩陣  $R$  的特徵值為  $\kappa_1, \dots, \kappa_{p^n}$ , 並假設一個  $r$  組試驗次數的部分因子設計, 相關係數矩陣  $R^*$  的特徵值為  $\kappa_1^*, \dots, \kappa_r^*$ , 則

$$\Lambda^* = G \Lambda G^T,$$

其中

$$\Lambda_{p^n \times p^n} = \begin{pmatrix} \kappa_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{p^n} \end{pmatrix}, \Lambda_{r \times r}^* = \begin{pmatrix} \kappa_1^* & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_r^* \end{pmatrix}.$$

證明. 因為  $R^* = LRL^T$ , 將  $R^*$  與  $R$  作特徵分解, 則可得到

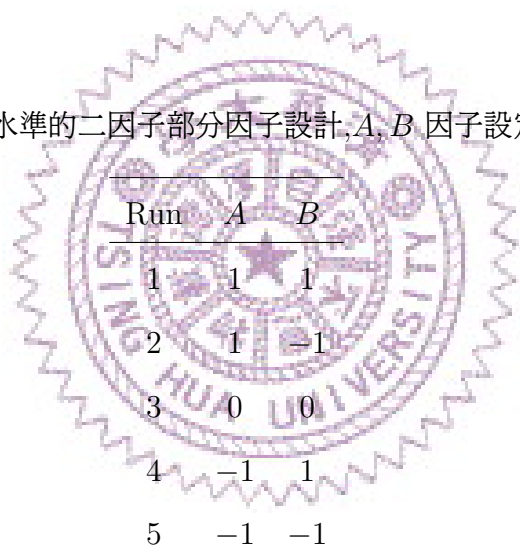
$$\Gamma^* \Lambda^* \Gamma^{*T} = L \Gamma \Lambda \Gamma^T L^T,$$

將等式兩邊同時左乘  $\Gamma^{*T}$ , 右乘  $\Gamma^*$  得到

$$\Lambda^* = \Gamma^{*T} L \Gamma \Lambda \Gamma^T L^T \Gamma^* = G \Lambda G^T.$$

□

例 10. 若是有一個三水準的二因子部分因子設計,  $A, B$  因子設定分別為



Run	$A$	$B$
1	1	1
2	1	-1
3	0	0
4	-1	1
5	-1	-1

當  $\lambda_1 = 0.2, \lambda_2 = 0.1$ , 則由 (3.2) 式可得到

$$G^T = \begin{pmatrix} & \mathbf{v}_1^* & \mathbf{v}_2^* & \mathbf{v}_3^* & \mathbf{v}_4^* & \mathbf{v}_5^* \\ \mathbf{v}_1 & 0.724 & 0 & 0 & 0 & -0.004 \\ \mathbf{v}_2 & 0 & -0.792 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_3 & 0 & 0 & 0.772 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mathbf{v}_5 & -0.175 & 0 & 0 & 0 & -0.667 \\ \mathbf{v}_6 & 0.131 & 0 & 0 & 0 & 0.677 \\ \mathbf{v}_7 & 0 & 0 & 0.636 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_8 & 0 & 0.611 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{v}_9 & -0.654 & 0 & 0 & 0 & 0.310 \end{pmatrix}.$$

由矩陣  $G$  可看出對第一個混淆集合  $\mathbf{v}_1^*$ , 完全因子設計下的  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_5, \mathbf{v}_6, \mathbf{v}_9$  這四個效應的係數皆不等於 0, 可知這四個效應在第一個混淆集合中產生了不完全混淆; 對第二個混淆集合  $\mathbf{v}_2^*$ , 完全因子設計下的  $\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_8$  這兩個效應的係數皆不等於 0, 可知這兩個效應在第二個混淆集合中產生了不完全混淆; 對第三個混淆集合  $\mathbf{v}_3^*$ , 完全因子設計下的  $\mathbf{v}_3, \mathbf{v}_7$  這兩個效應的係數皆不等於 0, 可知這兩個效應在第三個混淆集合中產生了不完全混淆; 對第五個混淆集合  $\mathbf{v}_5^*$ , 完全因子設計下的  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_5, \mathbf{v}_6, \mathbf{v}_9$  這四個效應的係數皆不等於 0, 可知這四個效應在第五個混淆集合中產生了不完全混淆; 而對第四個混淆集合  $\mathbf{v}_4^*$ , 因為等同於完全因子設計下的  $\mathbf{v}_4$  效應, 因此此混淆集合內並沒有產生效應混淆。

由例 5 的結果可知完全因子設計下的  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_9$  分別對應到固定效應模型  $I, A, B, AB, A^2, B^2, A^2B, AB^2, A^2B^2$  效應, 因此可以說在第一個以及第五個混淆集合中  $I, A^2, B^2, A^2B^2$  這四個效應產生混淆; 在第二個混淆集合中  $A, AB^2$  這兩個效應產生混淆; 而在第三個混淆集合中  $B, A^2B$  這兩個效應產生混淆。

若從混淆矩陣的觀點來看, 由於此設計的模型矩陣為

$$X = \begin{pmatrix} I & A & B & AB & A^2 & B^2 & A^2B & AB^2 & A^2B^2 \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & 0 & 0 & \frac{-2}{\sqrt{8}} & \frac{-2}{\sqrt{8}} & 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{1}{\sqrt{8}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{-1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{20}} \end{pmatrix},$$

同例3的作法可得到

$$E(\hat{\beta}_I) = \beta_I + 0.316\beta_{A^2} + 0.316\beta_{B^2} + 0.800\beta_{A^2B^2},$$

$$E(\hat{\beta}_A) = \beta_A + \beta_{AB^2},$$

$$E(\hat{\beta}_B) = \beta_B + \beta_{A^2B},$$

$$E(\hat{\beta}_{AB}) = \beta_{AB}.$$

從  $\hat{\beta}_I$  的期望值可得知  $I, A^2, B^2, A^2B^2$  這四個效應產生了不完全混淆, 而從  $\hat{\beta}_A$  的期望值可得知  $A, AB^2$  這兩個效應產生完全混淆, 從  $\hat{\beta}_B$  的期望值可得知  $B, A^2B$  這兩個效應產生完全混淆, 並從  $\hat{\beta}_{AB}$  的期望值可得知  $AB$  效應並不與其他效應產生混淆, 這與上述用矩陣  $G$  觀察混淆情形得到的結果皆相當類似。然而, 在混淆的係數比例上則有些不同。例如由混淆矩陣得到  $A, AB^2$  這兩個效應產生完全混淆, 也就是這兩個效應混淆的係數比例為  $1:1$ , 然而由矩陣  $G$  得到  $A, AB^2$  這兩個效應產生部分混淆, 混淆的係數比例為  $-0.792:0.611$ , 這與混淆矩陣得出來的結果有些微不同, 且因為相關係數矩陣的特徵向量將會隨著  $\lambda_i$  不同而有所改變, 進而造成在計算  $G = \Gamma^{*T} L \Gamma$  時, 矩陣  $G$  得到的混淆係數也會隨著  $\lambda_i$  不同而有所改變。

我們可以發現以隨機域模型的角度來看, 其與固定效應模型的不同在於, 效應混淆的係數不只由設計決定, 且與因子對應的參數  $\lambda_i$  值有關, 也就是與每個因子的複雜程度有關。

從例10可得到如何利用矩陣  $G$  來看出每一個混淆集合有哪些效應產生混淆, 並與固定效應模型所發展的混淆矩陣做比較, 可發現若以固定效應模型的角度與

隨機域模型的角度來觀察效應混淆，會有些不同。若我們有興趣觀察效應混淆的嚴重程度，除了  $G$  矩陣可得知哪些效應產生混淆以及混淆的係數，必須加入效應重要性的訊息。我們可使用與上一節相同的作法，先由完全因子設計下的隨機域模型之相關係數矩陣的特徵值  $\kappa_1, \dots, \kappa_{p^n}$ ，來得知隨機域模型中各個效應的重要性，並觀察  $g_{i1}^2 \kappa_1, \dots, g_{ip^n}^2 \kappa_{p^n}$  的相對比例來了解第  $i$  個混淆集合的嚴重程度。



## 第 4 章

### 結論

在本論文中，我們透過固定效應模型、隨機效應模型、以及隨機域模型這三個模型的連結，並利用固定效應模型下已發展關於效應混淆的概念來討論隨機域模型下非正規部分因子設計之效應混淆。我們在完全因子設計下，透過隨機域模型下相關係數矩陣的特徵值分解，得到了隨機域模型的效應與相關係數矩陣的特徵向量有關，並建立這些效應與固定效應模型下的正交多項式效應之間的關聯。而效應的重要性則與相關係數矩陣的特徵值相關。此外，我們從兩個不同的角度，將固定效應模型下觀察效應混淆的概念推廣至隨機域模型。

本論文還沒完整證明出對任意的完全因子設計，隨機域模型的效應皆可幾乎等同於固定效應模型下的正交多項式，且在部分因子設計中，多水準的實驗設計在固定效應模型還有許多不同的方法來觀察效應混淆，並提供準則來決定設計的好壞，但在隨機域模型下，其相關的成果仍不多，這些都是未來可研究的課題。



## 參考文獻

- Cantoni, A. and Butler, P. (1976), “Eigenvalues and eigenvectors of symmetric centrosymmetric matrices”, *Linear Algebra and its Applications*, 13, 275–288.
- Chipman, H., Hamada, M., and Wu, C. F. J. (1997), “A bayesian variable selection approach for analyzing designed experiments with complex aliasing”, *Technometrics*, 39, 372–381.
- Sacks, J., Welch, W. J., and Mitchell, T. J. (1989), “Design and analysis of computer experiments”, *Statistical Science*, 4(4), 409–423.
- Santner, T. J., Williams, B. J., and Notz, W. I. (2003), *The Design and Analysis of Computer Experiments*, Springer.
- Steinberg, D. M. and Bursztyn, D. (2004), “Data analytic tools for understanding random field regression models”, *Technometrics*, 46(4), 411–420.
- 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*, 2nd Edition. Wiley Series.
- Ye, K. Q. (1998), “Orthogonal column latin hypercubes and their application in computer experiments”, *Journal of the American Statistical Association*, 93, 1430–1439.