國　立　清　華　大　學

碩士論文

題目　：　具巢狀區塊結構實驗的平均與變異模型之建構法

Building Location and Dispersion Models for Experiments with Nested Plot Structure

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　：　陳　柏　旭 (Po - Hsu Chen)

學　　號　：　9624503

中華民國九十八年七月

摘要

對具有重複點的實驗, 我們除可探討解釋變數如何影響反應變數的平均結構, 亦可探討前者如何影響後者的變異結構; 若重複點是由干擾因子的水準改變下所觀測獲得的, 則爲穩健參數設計。但傳統的實驗設計中, 所探討的變異結構, 只考慮所有重複點所造成的總變異; 而傳統的穩健參數設計中, 也只考慮所有干擾因子所造成的總變異。然而, 在具有區塊結構的實驗中, 總變異可能是由不同區塊因子所共同造成的, 使用傳統的穩健參數設計, 無法區分不同區塊因子所造成的變異, 亦無法了解這些變異是如何受解釋變數的影響, 故可能會喪失一些關於變異的資訊。本研究以具有巢狀區塊結構的多階層實驗爲對象, 改進傳統穩健參數設計中的平均-變異法與反應建模法, 對反應值建立平均模型, 以及對各個區塊因子所造成的變異建立模型。在新版本的平均-變異法中, 對控制因子不同的水準組合, 我們利用巢狀隨機模型描述區塊因子之效應, 並估計出各個區塊因子所造成變異之大小, 進而對各個區塊因子建立變異模型; 而在新版本的反應建模法中, 首先我們將控制與區塊因子皆視爲獨立變數, 並將其對反應變數建立反應模型, 接著將反應模型中的區塊因子視爲隨機變數, 並適當地對其做運算, 以建立各個區塊因子的變異模型。此外, 針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 其處理結構中除有控制因子外, 亦可能具有干擾因子之實驗, 對此我們提出兩階段建模策略, 來建立各個區塊因子的變異模型, 及干擾因子的變異模型。最後, 可以藉由調整平均模型中控制因子之水準, 使平均反應值達到目標值; 也可藉由調整各個變異模型中控制因子之水準, 使各個區塊因子與干擾因子所造成的變異, 盡可能的降低。

關鍵詞: 多階層實驗、穩健參數設計、平均-變異法、反應建模法。

致謝詞

兩年也許是生命中的一剎那, 然而, 在清華求學的這兩年卻是我目前生命中最重要的時刻。感謝上天! 感謝上帝!

感謝我最親愛的家人: 老爸、老媽、與老妹。曾經在求學的路上跌了一跤的我, 失去了信心, 選擇的逃避。因爲有您們的不斷地鼓勵與支持, 我才能重新找回笑容, 重新獲得力量, 去面對橫阻於前的一切。我知道我仍不夠好, 我知道我仍須努力, 但我更知道我對得起您們的犧牲與奉獻, 相信我, 我不會讓您們失望的!

感謝我最辛苦的指導教授鄭少爲老師。在您細心與耐心的指導與教導下, 我對於研究有那麼一絲絲體會。每當研究遇到瓶頸, 老師您總是指引我一個大方向, 帶領我從中破繭而出。每當我想出解決問題的辦法時, 心中的喜悅與成就感是不可言喻的。猶記得一年前有時都會偷偷幻想如果咪聽能夠放假該有多好! 到了現在我是多麼渴望再次跟老師您咪聽, 哀! 突然有種不想畢業想要繼續跟著老師學習的衝動! 感謝我最優秀的清大統研老師們。每位老師都擁有個深不見底的百寶袋, 深藏了無數的知識與能力。讓我能一點一點的挖取寶物, 一點一點的累積智慧。

感謝我最帥氣與最美麗的清大統研夥伴們。謝謝阿木與阿泰, 在這一年跟著老闆求學的過程中, 一起討論一起克服種種難關。謝謝威寶, 用 MSN 陪我度過漫漫長夜, 跟我分享所有八卦, 以及許多關於人生的看法。謝謝阿ㄐ, 有你的 FTP 與 BBS, 讓我能開心的度過每一天。謝謝帆哥, 有你的模仿, 老師們都變得可愛親切。謝謝瑋哥, 跟你聊天總是令我成長, 看見你的求學態度總是令我汗顏。謝謝老江, 總是幫我解決作業中最難的證明。謝謝小潘, 陪我一起捕 GRE, 答應我, 出國的夢想我們一起努力。感謝 WUSH, 讓我知道什麼是強者, 自己有多渺小。謝謝多比、丁丁、五燈, 你們都是學習的好夥伴。謝謝慧卿、小猴子、小暴。

最後, 感謝我最愛的寶貝姿慧。對妳的感謝是沒有任何言語能夠表達的, 只有用我一輩子的愛, 一輩子的關懷, 一輩子的照顧, 讓我用行動證明我的感謝吧!

目錄

圖目錄

表目錄

第 1 章 緒論與文獻回顧

1.1 研究背景與研究目的

對具有重複點 (replication) 的實驗, 我們除可探討解釋變數如何影響反應變數的平均結構, 亦可探討前者如何影響後者的變異結構; 若這些重複點是在有系統地變動干擾因子 (noise factor) 的水準 (level) 下所觀測獲得的, 則爲穩健參數設計 (robust parameter design)。在傳統的實驗設計中, 所探討的變異結構, 只考慮所有重複點所造成的總變異; 而傳統的穩健參數設計中, 亦只考慮所有干擾因子所造成的總變異。然而, 在具有區塊結構 (plot structure) 的實驗中, 所有重複點的總變異可能是由不同區塊因子 (plot factor) 所共同造成的, 使用傳統的穩健參數設計, 無法區分不同區塊因子所造成的變異, 亦無法了解這些變異是如何受到解釋變數的影響, 故可能會喪失一些關於變異的資訊。

傳統的穩健參數設計是針對具有控制因子 (control factor) 和干擾因子的實驗, 分別建立一個平均模型以及一個變異模型, 藉由調整控制因子不同的水準, 希望能達到以下兩個目標:

1. 使得平均反應值達到目標值;
2. 使得干擾因子所造成反應值的變異盡可能地降低。

穩健參數設計中, 常用的建模方法有兩種: 平均-變異法 (location and dispersion modeling) 與反應建模法 (response modeling)。在具有區塊結構的實驗中, 不論使用傳統的平均-變異法或反應建模法, 皆只能建立一個變異模型, 其描述所有重複點所造成的總變異是如何受到控制因子的影響, 故無法對不同區塊因子所造成的變異建立模型。如果我們可以區分不同區塊因子所造成的變異大小, 並建立各

個區塊因子的變異模型, 了解各個區塊因子所造成的變異是如何受到控制因子的影響, 將可以提供實驗者更多關於變異的資訊, 讓實驗者更有效的使用穩健參數設計, 使得平均反應值達到目標值, 且可以針對不同區塊因子, 降低其在製程中所造成的變異。

本論文以具有巢狀 (nesting) 區塊結構的多階層實驗 (multi-stratum experiment) 爲例子, 提出新版本的平均-變異法與反應建模法, 使得我們除可建立一個平均模型, 亦可針對各個區塊因子來建立變異模型。此外, 針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 其處理結構 (treatment structure) 中, 除有控制因子外, 亦可能具有干擾因子, 對此我們提出一個新的分析策略, 來建立各個區塊的變異模型, 及干擾因子的變異模型, 了解各種因子所造成的變異, 是如何受到控制因子之影響。

1.2 動機實例

本研究動機實例, 如表1.1 , 取自於 Wu 和 Hamada (2000) 的長晶實驗 (Layer Growth Experiment)。附加層 (epitaxial layer) 的生長, 是在光滑矽晶圓上製造積體電路裝置的過程中的一個步驟。本實驗的目的, 是找出適當控制因子的水準, 使得平均附加層 (反應值) 的厚度達到 14.5 μm , 並且盡可能的降低反應值的變異。原始長晶實驗裡, 處理結構中共有八個兩水準的控制因子 $A-H$, 並使用 2^{8-4}_{IV} 部分因子設計, 以及兩個干擾因子 M, L , 詳請參考 Kackar and Shoemaker (1986); 爲了方便介紹具巢狀區塊結構實驗的平均與變異模型之建立法, 本論文假設長晶實驗的處理結構中, 只有三個兩水準控制因子 A, B, C , 詳見表1.1的處理結構, 其爲 2^{8-4}_{IV} 原始部分因子設計實驗中, 完全因子設計的部分, 每個控制因子所代表的意義及其水準, 詳見表1.2 ; 另外我們忽略原先實驗處理結構中的干擾因子 M, L , 並將一個 16/4/2 的巢狀區塊結構加入長晶實驗中, 且假設此巢狀區塊結構是由十六間不同的工廠 $F_1 \sim F_{16}$, 每間工廠裡皆有四台機器 $M_1 \sim M_4$, 每台機器上皆做兩次重複實驗 $R_1 \sim R_2$ 所組成, 詳見表1.1的區塊結構。

表 1.1: 長晶實驗資料與其區塊結構

處理結構			區塊結構								
控制因子			區塊因子								
				F_1		F_2		F_3		F_4	
A	B	C		$M_{1(1)}$	$M_{2(1)}$	$M_{1(2)}$	$M_{2(2)}$	$M_{1(3)}$	$M_{2(3)}$	$M_{1(4)}$	$M_{2(4)}$
+	+	+	R_1	14.29	14.80	14.27	14.70	15.32	15.93	15.27	14.92
+	+	+	R_2	14.19	14.72	14.19	14.76	14.43	14.90	15.41	15.13
				$M_{3(1)}$	$M_{4(1)}$	$M_{3(2)}$	$M_{4(2)}$	$M_{3(3)}$	$M_{4(3)}$	$M_{3(4)}$	$M_{4(4)}$
+	+	−	R_1	13.88	13.41	13.85	13.59	14.01	14.24	14.21	14.40
+	+	−	R_2	13.92	13.48	14.08	13.52	13.94	14.26	14.08	14.37
				F_5		F_6		F_7		F_8	
				$M_{1(5)}$	$M_{2(5)}$	$M_{1(6)}$	$M_{2(6)}$	$M_{1(7)}$	$M_{2(7)}$	$M_{1(7)}$	$M_{2(8)}$
+	−	+	R_1	14.17	13.25	14.14	13.19	14.15	14.22	14.15	14.27
+	−	+	R_2	14.03	13.33	14.08	13.44	14.17	14.30	14.28	14.41
				$M_{3(5)}$	$M_{4(5)}$	$M_{3(6)}$	$M_{4(6)}$	$M_{3(7)}$	$M_{4(7)}$	$M_{3(8)}$	$M_{4(8)}$
+	−	−	R_1	14.06	14.31	14.18	14.68	15.30	15.01	15.42	15.57
+	−	−	R_2	14.09	14.41	14.05	14.58	15.52	15.06	15.21	15.47
				F_9		F_{10}		F_{11}		F_{12}	
				$M_{1(9)}$	$M_{2(9)}$	$M_{1(10)}$	$M_{2(10)}$	$M_{1(11)}$	$M_{2(11)}$	$M_{1(12)}$	$M_{2(12)}$
−	+	+	R_1	13.73	13.90	12.65	14.45	14.90	13.75	14.19	14.22
−	+	+	R_2	13.29	14.56	13.27	13.71	14.80	14.32	14.63	13.82
				$M_{3(9)}$	$M_{4(9)}$	$M_{3(10)}$	$M_{4(10)}$	$M_{3(11)}$	$M_{4(11)}$	$M_{3(12)}$	$M_{4(12)}$
−	+	−	R_1	14.22	13.52	15.28	14.28	14.19	14.56	15.55	15.23
−	+	−	R_2	14.40	13.58	15.04	13.84	14.43	14.47	15.22	15.11
				F_{13}		F_{14}		F_{15}		F_{16}	
				$M_{1(13)}$	$M_{2(13)}$	$M_{1(14)}$	$M_{2(14)}$	$M_{1(15)}$	$M_{2(15)}$	$M_{1(16)}$	$M_{2(16)}$
−	−	+	R_1	14.53	14.57	14.67	13.71	14.74	15.87	14.97	14.97
−	−	+	R_2	14.25	14.03	15.28	14.64	14.18	15.22	15.55	16.00
				$M_{3(13)}$	$M_{4(13)}$	$M_{3(14)}$	$M_{4(14)}$	$M_{3(15)}$	$M_{4(15)}$	$M_{3(16)}$	$M_{4(16)}$
−	−	−	R_1	12.90	13.95	13.15	14.11	14.25	13.81	14.13	14.43
−	−	−	R_2	12.71	14.08	13.89	13.60	13.84	14.07	15.17	13.69

* 原始長晶實驗資料數據的精確度達到小數點後四位, 在此因為版面有限, 只列出四捨五入至小數點後第二位的值。
* 為了計算上方便, 我們對調了原始長晶實驗中, 一些控制因子水準組合下的觀測值。

表 1.2: 長晶實驗控制因子的水準設定

控制因子	水準 −	水準 +
A. 襯托器旋轉方式 (susceptor-rotation)	連續	振盪
B. 晶圓代碼 (code of wafers)	668G4	678G4
C. 儲存溫度 (deposition temperature)	1210	1220

針對此區塊結構, 我們將長晶實驗的目的設定爲, 建立控制因子與反應值相關的平均模型, 控制因子與區塊因子 (工廠) 所造成的變異相關的變異模型, 以及控制因子與區塊因子 (機器) 所造成的變異相關的變異模型, 並由上述模型中, 找出適當的控制因子水準設定, 使得平均反應值達到目標值, 以及盡可能地降低區塊因子所造成的變異。下一節文獻回顧會介紹多階層實驗, 以及隨機效應模型。第二章提出新版本的平均-變異法, 以建立上述模型。第三章提出新版本的反應建模法, 其目的亦爲建立上述模型。第四章在長晶實驗的處理結構中, 加入干擾因子, 並提出兩階段分析策略, 除可建立上述模型外, 亦可建立干擾因子的變異模型。第五章爲結論。

1.3 文獻探討

1.3.1 多階層實驗

Nelder (1965) 指出一個多階層實驗主要包含了兩個結構: 一個是處理結構, 另一個是區塊結構。在處理結構中的因子, 我們稱爲處理因子, 其包含了控制因子與干擾因子; 在區塊結構中的因子, 我們稱爲區塊因子。常見的區塊結構型式有兩種: 交叉的 (crossing) 與巢狀的。舉例來說: 如果在三間不同的工廠中做實驗, 每間工廠內皆有三種廠牌的機器, 並假設不同工廠內相同廠牌的機器, 其差異是不顯著的, 則稱工廠與機器爲交叉結構, 如表1.3 ; 如果在三間不同的工廠中做實驗, 每間工廠內皆有三台機器, 並假設第一間工廠內與第二間工廠內的三台機器, 是不相同的, 也就是說, 第一間工廠的第一台機器, 與第二間工廠的第一台機器, 雖然其編號皆有可能都爲 1 , 但兩台機器之間是沒有關聯的, 則稱工廠與機器爲巢狀結構,

如表1.4 。交叉結構與巢狀結構亦可同時出現在實驗中, 其它更複雜的多階層實驗結構, 請參見 Nelder (1965)。

表 1.3: 交叉結構

	工廠一	工廠二	工廠三
機器 (廠牌一)	y_{11}	y_{12}	y_{13}
機器 (廠牌二)	y_{21}	y_{22}	y_{23}
機器 (廠牌三)	y_{31}	y_{32}	y_{33}

表 1.4: 巢狀結構

工廠一			工廠二			工廠三		
機器一	機器二	機器三	機器一	機器二	機器三	機器一	機器二	機器三
$y_{1(1)}$	$y_{2(1)}$	$y_{3(1)}$	$y_{1(2)}$	$y_{2(2)}$	$y_{3(2)}$	$y_{1(3)}$	$y_{2(3)}$	$y_{3(3)}$

Nelder (1965) 利用隨機化理論 (randomization theory), 定義了區塊結構中自由度的性質 (degrees-of-freedom identity)。首先, 定義 n_i 爲第 i 個區塊因子中的水準數, 且 $v_i = n_i - 1$, 現在考慮具有兩個區塊因子, 其水準數分別爲 n_1, n_2 的實驗, 並定義巢狀函數 (nesting function) 爲

$$N(n_1, n_2) = n_1 n_2 = 1 + v_1 + n_1 v_2 \tag{1.1}$$

和交叉函數 (crossing function) 爲

$$C(n_1, n_2) = n_1 n_2 = 1 + v_1 + v_2 + v_1 v_2 \tag{1.2}$$

在 (1.1) 式與 (1.2) 式中, 第一個部分爲平均的自由度, 第二部分爲區塊間 (between-plots) 的自由度, 而第三部分爲區塊內 (within-plots) 的自由度。

在巢狀區塊結構中, 我們稱最上層的區塊爲總區 (whole-plot), 總區下一層的區塊爲子區 (sub-plot), 子區下一層的區塊爲次子區 (sub-sub-plot), 以此類推。

Bailey (2008) 定義將處理因子的水準組合分派到區塊上的動作, 稱爲設計 (design)。此外, 當某一個控制因子其某一特定水準, 被分配到一個區塊上時, 也就是在同一個區塊內, 此控制因子的水準皆相同, 稱此控制因子爲某區控制因子, 舉例來說, 如果某控制因子的水準, 在總區區塊上無法任意調動時, 則我們稱此控制因子爲總區控制因子; 同理, 如果另一個控制因子其水準在子區區塊上無法任意調動時, 我們稱此控制因子爲子區控制因子, 更下層的區塊控制因子, 可以以此類推。此概念同樣適用於處理結構中的干擾因子, 因此, 我們也可以將干擾因子分成總區干擾因子, 子區干擾因子, 與次子區干擾因子等。

1.3.2 隨機效應模型

Searle. et al. (1992) 提出在常態的假設下, 利用最大概似估計法 (Maximum Likelihood Estimation) 處理連續型資料的變異成分 (variance components) 是非常常見的。現在, 我們考慮一個一因子隨機效應模型 (random effect model)

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \epsilon_{ij} \begin{cases} i = 1, 2, \ldots, a \\ j = 1, 2, \ldots, n \end{cases} \tag{1.3}$$

其中 y_{ij} 是在第 ith 組中第 jth 觀測值, μ 是總平均, τ_i 是第 ith 組觀測值的隨機效應 (random effect), e_{ij} 是殘差項, 並假設 τ_i's 和 ϵ_{ij}'s 皆來自於常態分配。我們也可以用矩陣的形式表示 (1.3) 式, 即爲

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\epsilon} \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \sigma_\tau^2 \boldsymbol{I}_a & 0 \\ 0 & \sigma_\epsilon^2 \boldsymbol{I}_n \end{bmatrix} \right)$$

因此, 可以將代表所有觀測值的向量 $\boldsymbol{y}$ 表示成

$$\boldsymbol{y} \sim N[\mu \mathbf{1}_{an}, \ \boldsymbol{V} = \{\boldsymbol{I}_a \otimes (\sigma_\tau^2 \boldsymbol{J}_n + \sigma_\epsilon^2 \boldsymbol{I}_n)\}] \tag{1.4}$$

其中 $\boldsymbol{I}_a$ 代表一個 a 維的單位矩陣 (identity matrix), $\mathbf{1}_{an}$ 代表一個 an 維的向量, 其向量中每個元素皆爲 1 , 以及 $\boldsymbol{J}_n$ 代表一個 n 維的矩陣, 其矩陣中每個元素皆爲 1 , 而 $\otimes$ 爲 kronecker product。此外, $\boldsymbol{y}$ 的概似函數(likelihood function) 爲

$$L = L(\mu, \boldsymbol{V}|\boldsymbol{y}) = \frac{\exp[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \mu\mathbf{1}_{an})'\boldsymbol{V}^{-1}(\boldsymbol{y} - \mu\mathbf{1}_{an})]}{(2\pi)^{\frac{1}{2}(an)}|\boldsymbol{V}|^{\frac{1}{2}}} \tag{1.5}$$

由 (1.5) 式並利用最大概似法, 可求得各個因子變異數之最大概似估計式。其中, 要特別注意, 因極大化此概似函數的解不一定落在自然參數空間內 ($0 \le \sigma_\tau^2 < \infty$, $0 < \sigma_\epsilon^2 < \infty$), 因此, 當概似解沒有落在自然參數空間時 ,必須針對不同情況去做修正, 才能得到正確的最大概似估計式, 詳細推導過程詳見 Searle et al. (1992, Chapter 3.7)。

表1.5與表1.6分別列出, 一因子巢狀隨機效應模型之變異數分析表, 以及一因子隨機效應模型之最大概似估計式。

表 1.5: 一因子隨機效應模型之變異數分析表

變異來源	自由度	平方和	均方
τ_i	$a-1$	$SS_\tau = \sum_i n(\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2$	$MS_\tau = SS_\tau/(a-1)$
誤差	$a(n-1)$	$SS_E = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2$	$MS_E = SS_E/a(n-1)$
總和	$an-1$	$SS_T = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2$	

表 1.6: 一因子隨機效應模型之最大概似估計式

最大概似 解的條件	最大概似估計式 $\hat{\sigma}_\tau^2$	 $\hat{\sigma}_\epsilon^2$
$\dot{\sigma}_\tau^2 \ge 0$	$[(1-1/a)MS_\tau - MS_E]/n$	MS_E
$\dot{\sigma}_\tau^2 < 0$	0	SS_T/an

其中 (1.3) 式的最大概似解爲

$$\dot{\sigma}_\epsilon^2 = MS_E, \quad \dot{\sigma}_\tau^2 = \frac{(1-1/a)MS_\tau - MS_E}{n} \tag{1.6}$$

而表1.7列出一因子巢狀隨機效應模型之期望均方。

表 1.7: 一因子巢狀隨機效應模型之期望均方

一因子巢狀隨機效應模型		
$E(MS_\tau)$	$=$	$n\hat{\sigma}_\tau^2 + \hat{\sigma}_\epsilon^2$
$E(MS_E)$	$=$	$\hat{\sigma}_\epsilon^2$

此外, Searle et al. (1992) 亦探討二因子巢狀隨機效應模型, 其模型為

$$y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_{j(i)} + \epsilon_{(ij)k} \begin{cases} i = 1, 2, \ldots, a \\ j = 1, 2, \ldots, b \\ k = 1, 2, \ldots, n \end{cases} \tag{1.7}$$

並且假設 μ 為固定效應, τ_i 為服從 $N(0, \sigma_\tau^2)$ 的隨機效應, $\beta_{j(i)}$ 為服從 $N(0, \sigma_\beta^2)$ 的隨機效應, 以及 $\epsilon_{(ij)k}$ 為服從 $N(0, \sigma_\epsilon^2)$ 的誤差項。

表1.8與表1.9分別列出, 二因子巢狀隨機效應模型之變異數分析表, 以及二因子巢狀隨機效應模型之最大概似估計式。

表 1.8: 二因子巢狀隨機效應模型之變異數分析表

變異來源	自由度	平方和	均方
τ_i	$a-1$	$SS_\tau = \sum_i bn(\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2$	$MS_\tau = SS_\tau/(a-1)$
$\beta_{j(i)}$ (在 τ_i 內)	$a(b-1)$	$SS_{\beta:\tau} = \sum_i \sum_j n(\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..})^2$	$MS_{\beta:\tau} = SS_{\beta:\tau}/a(b-1)$
誤差	$ab(n-1)$	$SS_E = \sum_i \sum_j \sum_k (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2$	$MS_E = SS_E/ab(n-1)$
總和	$abn-1$	$SS_T = \sum_i \sum_j \sum_k (y_{ijk} - \bar{y}_{...})^2$	

表 1.9: 二因子巢狀隨機效應模型之最大概似估計式

最大概似解的條件	最大概似估計式		
	$\hat{\sigma}_\tau^2$	$\hat{\sigma}_\beta^2$	$\hat{\sigma}_\epsilon^2$
$\dot{\sigma}_\tau^2 \geq 0,\ \dot{\sigma}_\beta^2 \geq 0$	$\frac{(1-1/a)MS_\tau - MS_{\beta:\tau}}{bn}$	$\frac{MS_{\beta:\tau} - MS_E}{n}$	MS_E
$\dot{\sigma}_\tau^2 \geq 0,\ \dot{\sigma}_\beta^2 < 0$	$\frac{(1-1/a)MS_\tau - \hat{\sigma}_\epsilon^2}{bn}$	0	$\frac{SS_E + SS_{\beta:\tau}}{a(bn-1)}$
$\dot{\sigma}_\tau^2 < 0,\ \dot{\sigma}_\beta^2 \geq 0$	0	$\frac{1}{n}(\frac{SS_\tau + SS_{\beta:\tau}}{ab} - MS_E)$	MS_E
$\dot{\sigma}_\tau^2 < 0,\ \dot{\sigma}_\beta^2 < 0$	0	0	$\frac{SS_T}{abn}$

其中 (1.7) 式的最大概似解爲

$$\dot{\sigma}_\tau^2 = \frac{(1-1/a)MS_\tau - MS_{\beta:\tau}}{bn}, \quad \dot{\sigma}_\beta^2 = \frac{MS_{\beta:\tau} - MS_E}{n}, \quad \dot{\sigma}_\epsilon^2 = MS_E \qquad (1.8)$$

而表1.10列出二因子巢狀隨機效應模型之期望均方

表 1.10: 二因子巢狀隨機效應模型之期望均方

二因子巢狀隨機效應模型		
$E(MS_\tau)$	$=$	$bn\hat{\sigma}_\tau^2 + n\hat{\sigma}_\beta^2 + \hat{\sigma}_\epsilon^2$
$E(MS_{\beta:\tau})$	$=$	$n\hat{\sigma}_\beta^2 + \hat{\sigma}_\epsilon^2$
$E(MS_E)$	$=$	$\hat{\sigma}_\epsilon^2$

我們可以將 (1.3) 式與 (1.7) 式的一因子隨機效應模型與二因子巢狀隨機效應模型, 推廣至 n 因子巢狀隨機效應模型, 其模型爲

$$y_{ijk\ldots pqr} = \mu + {A^1}_i + {A^2}_{j(i)} + {A^3}_{k(ij)} + \ldots + {A^n}_{q(ijk\ldots p)} + \epsilon_{(ijk\ldots pq)r} \qquad \begin{cases} i &= 1,2,\ldots,a_1 \\ j &= 1,2,\ldots,a_2 \\ \vdots &= \quad \vdots \\ q &= 1,2,\ldots,a_n \\ r &= 1,2,\ldots,m \end{cases} \tag{1.9}$$

假設 μ 爲固定效應, ${A^1}_i$ 爲服從 $N(0,\sigma^2_{A^1})$ 的隨機效應, ${A^2}_{j(i)}$ 爲服從 $N(0,\sigma^2_{A^2})$ 的隨機效應, $\ldots$, ${A^n}_{q(ijk\ldots p)}$ 爲服從 $N(0,\sigma^2_{A^n})$ 的隨機效應, 以及 $\epsilon_{(ijk\ldots pq)r}$ 爲服從 $N(0,\sigma^2_\epsilon)$ 誤差項。

表1.11列出, n 因子巢狀隨機效應模型之變異數分析表, 而 $\sigma^2_{A^1}, \sigma^2_{A^2}, \ldots, \sigma^2_{A^n}$ 之最大概似估計式亦可模仿表1.9之做法而得。

表 1.11: n 因子巢狀隨機效應模型之變異數分析表

變異來源	自由度	平方和
A^1	$a_1 - 1$	$SS_{A_1} = \sum_i a_2a_3\ldots a_n m(\bar{y}_{(i)\ldots\ldots} - \bar{y}_{\ldots\ldots\ldots})^2$
A^2 (在 A^1 內)	$a_1(a_2-1)$	$SS_{A_2} = \sum_i\sum_j a_3a_4\ldots a_n m(\bar{y}_{(ij)\ldots\ldots} - \bar{y}_{(i)\ldots\ldots})^2$
A^3 (在 A^2 內)	$a_1a_2(a_3-1)$	$SS_{A_3} = \sum_i\sum_j\sum_k a_4a_5\ldots a_n m(\bar{y}_{(ijk)\ldots\ldots} - \bar{y}_{(ij)\ldots\ldots})^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
A^n (在 A^{n-1} 內)	$\prod_{i=1}^{n-1} a_i(a_n-1)$	$SS_{A_n} = \sum_i\sum_j\sum_k\ldots\sum_q m(\bar{y}_{(ijk\ldots pq).} - \bar{y}_{(ijk\ldots p)..})^2$
誤差	$\prod_{i=1}^{n} a_i(m-1)$	$SS_E = \sum_i\sum_j\sum_k\ldots\sum_r(y_{ijk\ldots pqr} - \bar{y}_{(ijk\ldots pq).})^2$
總和	$m\prod_{i=1}^{n} a_i - 1$	$SS_T = \sum_i\sum_j\sum_k\ldots\sum_r(y_{ijk\ldots pqr} - \bar{y}_{\ldots\ldots\ldots})^2$

第 2 章 分析方法一: 平均-變異法

傳統的穩健參數設計中, 平均-變異法是針對反應變數的平均以及變異, 分別對控制因子建立迴歸模型。我們以表2.1的實驗來說明, 傳統平均-變異法的精神。本實驗爲四個試驗 (run) 的完整因子設計 (full factorial design), 每個試驗各有四個重複 (replicate) 實驗點, 在每一組控制因子 A, B 的不同水準組合 (level combination) 中, 對所有重複實驗點, 分別計算 $\bar{y}_i$ 和 $\ln s_i^2$ (樣本平均數和樣本變異數取 log)。因此, 可以利用 $\bar{y}_i$ 建立一個平均與控制因子相關的平均模型 (location model), 以及利用 $\ln s_i^2$ 建立一個變異與控制因子相關的變異模型 (dispersion model), 關於平均-變異法的細節, 請參考 Wu 和 Hamada (2000)。

表 2.1: 傳統的平均-變異法

控制因子		重複實驗點					
A	B					$\bar{y}_i$	$\ln s_i^2$
$+$	$+$	y_{11}	y_{12}	y_{13}	y_{14}	$\frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4} y_{1j}$	$\ln(\frac{1}{3}\sum_{j=1}^{4}(y_{1j}-\bar{y}_{1.})^2)$
$+$	$-$	y_{21}	y_{22}	y_{23}	y_{24}	$\frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4} y_{2j}$	$\ln(\frac{1}{3}\sum_{j=1}^{4}(y_{2j}-\bar{y}_{2.})^2)$
$-$	$+$	y_{31}	y_{32}	y_{33}	y_{34}	$\vdots$	$\vdots$
$-$	$-$	y_{41}	y_{42}	y_{43}	y_{44}	$\frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4} y_{4j}$	$\ln(\frac{1}{3}\sum_{j=1}^{4}(y_{4j}-\bar{y}_{4.})^2)$

在建立平均模型與變異模型後, 我們可藉由調整平均模型中控制因子的水準, 使平均反應值達到目標值; 亦可藉由調整變異模型中控制因子的水準, 盡可能降低製程中的變異。當然, 可能會有一些控制因子同時出現在平均模型與變異模型中, 在這種情況下, 我們也許無法同時做到使反應值達到目標值, 且使得製程中所產生的變異達到最小,Wu 和 Hamada (2000) 提出一套分析策略來處理這樣的問題。

傳統的穩健參數設計中, 只考慮所有重複實驗點所造成的總變異, 然而, 在具有區塊結構的實驗中, 總變異可能是由不同區塊因子所造成的, 使用傳統的平均-變異法, 只能對總變異建立一個變異模型, 故無法了解各個區塊因子所造成的變異, 是如何受到控制因子的影響。本論文中, 我們提出一個新版本的平均-變異法, 其可以估計在不同控制因子水準組合下, 各個區塊因子所造成的變異, 進而建立各個區塊因子的變異模型。舉例來說, 我們可以將一個 $8/2$ 的巢狀區塊結構加入表2.1的實驗中, 如表2.2 。此時, 每種控制因子水準組合下的四個重複實驗點, 並不一定是在同一個區塊上所做的實驗, 我們可以想像此實驗在控制因子 A, B 的水準爲 (+,+) 時, 前兩個重複實驗點 y_{111}, y_{112} , 是在第一間工廠內做實驗, 可以用區塊因子 $F = +$ 表示, 而且 y_{111} 是在第一間工廠內的第一台機器上做實驗, 可以用區塊因子 $M = +$ 表示, y_{112} 是在第一間工廠內的第二台機器上做實驗, 可以用 $M = -$ 表示; 而此控制因子 A, B 水準下的後兩個重複實驗點 y_{121}, y_{122} , 是在第二間工廠內做實驗, 可以用區塊因子 $F = -$ 表示, 其中 y_{121}, y_{122} 也是分別在兩台不同的機器上所做的實驗, 此區塊結構可以以此類推到其它控制因子 A, B 不同的水準組合中, 其四個重複實驗點也是在兩間不同的工廠中, 且每間工廠內有兩台不同的機器上所做的實驗, 也就是說, 在控制因子 A, B 的四種水準組合中, 區塊結構裡共有八間工廠, 而每間工廠內皆有兩台不同的機器。使用傳統的平均-變異法, 會在控制因子不同的水準下, 計算所有重複實驗點所造成的總均方 (mean square error), 以估計總變異的大小, 總均方爲總平方和 (sum of square error) 的一個函數, 然而, 在表2.2的實驗中, 其實造成總平方和的來源有兩個: 一個是不同工廠所造成的平方和, 另一個是不同機器所造成的平方和, 因此, 我們可以將所有區塊因子造成的總平方和, 拆解成區塊因子 F 所造成的平方和, 加上區塊因子 M 所造成的平方和。

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}(y_{ijk}-\bar{y}_{i..})^2 = 2\sum_{j=1}^{2}(\bar{y}_{ij.}-\bar{y}_{i..})^2 + \sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}(y_{ijk}-\bar{y}_{ij.})^2 \tag{2.1}$$

在此要特別注意的是, 雖然總均方是所有區塊因子 (工廠加機器) 所造成的變異之估計式, 但各個區塊因子所造成的均方, 只是各個區塊因子所造成的變異之函數, 並不能直接代表各個區塊因子所造成的變異大小, 以表2.2的例子來說, 我們可以用總均方 $\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}(y_{ijk}-\bar{y}_{i..})^2/4$ 來估計在各種控制因子 A, B 的水準組合時,

所有區塊因子所造成的總變異, 但不能用工廠所造成的均方 $2\sum_{j=1}^{2}(\bar{y}_{ij.}-\bar{y}_{i..})^2/2$ 來估計在各個控制因子 A, B 的水準組合時, 工廠所造成的變異, 亦不能用機器所造成的均方 $\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}(y_{ijk}-\bar{y}_{ij.})^2/4$ 來估計機器所造成的變異。我們將於 2.1 節詳細的介紹, 該如何用隨機效應模型來描述反應值與控制因子和區塊因子之關聯性, 使得我們可以正確估計出各個區塊因子所造成的變異大小, 以及針對不同區塊因子建立變異模型。

表 2.2: 平均-變異法: 拆解總平方和

控制因子		區塊因子					總平方和
		F	$+$	$+$	$-$	$-$	
A	B	M	$+$	$-$	$+$	$-$	$\sum_j^2\sum_k^2(y_{ijk}-\bar{y}_{i..})^2=$
$+$	$+$		y_{111}	y_{112}	y_{121}	y_{122}	$2\sum_{j=1}^{2}(\bar{y}_{1j.}-\bar{y}_{1..})^2+\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}(y_{1jk}-\bar{y}_{1j.})^2$
$+$	$-$		y_{231}	y_{232}	y_{241}	y_{242}	$2\sum_{j=3}^{4}(\bar{y}_{2j.}-\bar{y}_{2..})^2+\sum_{j=3}^{4}\sum_{k=1}^{2}(y_{2jk}-\bar{y}_{2j.})^2$
$-$	$+$		y_{351}	y_{352}	y_{361}	y_{362}	$\vdots$
$-$	$-$		y_{371}	y_{372}	y_{381}	y_{382}	$2\sum_{j=7}^{8}(\bar{y}_{4j.}-\bar{y}_{4..})^2+\sum_{j=7}^{8}\sum_{k=1}^{2}(y_{4jk}-\bar{y}_{4j.})^2$

上述所介紹的表 2.2 實驗, 是一個多階層實驗 (multi-stratum experiments) 的簡單例子, 在更一般的多階層實驗中, 可能有屬於不同階層的控制因子與區塊因子。現在考慮一個具有 16/4/2 巢狀 (nesting) 區塊結構的實驗, 如圖 2.1, 此實驗的區塊結構中共有兩個區塊因子, 工廠是最上層的區塊因子, 也稱爲總區區塊因子 (whole-plot factor), 機器是工廠下一層的區塊因子, 稱爲子區區塊因子 (sub-plot factor)。此外, 在第一間工廠底下的第一台機器與第二間工廠地下的第一台機器, 是不一樣的, 也就是在不同工廠底下, 可能有兩台編號相同的機器, 但其實是兩台不同的機器, 也就是機器是套層 (nested) 於工廠之下。本實驗中共有十六間工廠, 可以用四個兩水準因子的十六個水準組合來表示, 我們將這四個因子分別表示爲 F_1, F_2, F_3, F_4 , 在每間工廠底下各自有四台機器, 可用兩個兩水準因子的四個水準組合來表示, 我們將這兩個因子分別表示爲 M_1, M_2 , 每台機器底下各做兩次重複實驗, 可以用一個兩水準因子來表示, 我們將此因子表示爲 R; 另一方面, 此多

階層實驗的處理結構中共有三個兩水準控制因子, 分別爲總區控制因子 A, B 和子區控制因子 C 。在本論文中, 皆利用 $(+, -)$ 來表示兩水準因子中不同的水準。

圖 2.1: 具有 16/4/2 巢狀區塊結構的實驗

針對圖2.1具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 使用傳統的平均-變異法, 是無法區分工廠與機器個別所造成的變異大小, 且只能建立一個所有區塊因子所造成的總變異與控制因子相關的變異模型; 而本論文所提出的新版本平均-變異法, 可以分別對不同的區塊因子, 建立其變異模型, 也就是在本例子中, 使用新版本的平均變異法, 可以得到一個平均模型, 以及兩個變異模型, 其分別爲工廠所造成的變異與控制因子相關的變異模型, 以及機器所造成的變異與控制因子相關的變異模型。

如果直接套用傳統穩健參數設計的平均-變異法, 我們會在控制因子 A, B, C 的所有不同水準組合下, 分別計算 $\bar{y}_i$ 和 $\ln s_i^2$ 。舉例來說: 在控制因子 $(A, B, C) =$

$(+,+,+)$ 的情況下, 計算 $\bar{y}_1$ 和 $\ln s_1^2$, 然而, 由圖2.2我們可以發現, 所有區塊因子所造成的總變異 $\sigma^2_{總變異}$, 其實是混合了四間不同的工廠, 每間工廠底下各兩台不同機器, 以及重複實驗所造成的變異之影響, 可以表示爲

$$\sigma^2_{總變異} = \sigma^2_{工廠} + \sigma^2_{機器} + \sigma^2_{重複實驗} \tag{2.2}$$

控制因子			區塊因子									
				F1	+	+	+	+	−	−	−	−
				F2	+	+	−	−	+	+	−	−
A(F3)	B(F4)	C(M2)	R	M1	+	−	+	−	+	−	+	−
+	+	+	+		y_1	y_2	...	...	...	...	...	y_8
+	+	+	−		y_9	...	...	...	...	...	...	y_{16}

圖 2.2: 在圖2.1 $(A, B, C) = (+, +, +)$ 的部分

因此, 針對圖2.1具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 使用傳統的平均-變異法, 我們僅估計所有區塊因子所造成的總變異之大小, 但沒有更進一步去了解工廠所造成的變異, 機器所造成的變異, 以及重複實驗所造成的變異; 此外, 使用傳統的平均-變異法, 我們亦只能了解所有區塊因子所造成的總變異, 是如何受到控制因子的影響, 但無法了解工廠所造成的變異, 機器所造成的變異, 以及重複實驗所造成的變異, 分別是如何受到控制因子的影響。如果我們有辦法區分不同區塊因子所造成的變異, 並建立模型來描述這些不同的變異是如何受到控制因子之影響, 對於整體實驗的改善, 會有更顯著的效果。舉例來說,

1. 當我們可能可以得到一個工廠的變異模型, 以及一個機器的變異模型, 則我們可以提供實驗者寶貴的資訊, 讓實驗者了解, 如何藉由調整控制因子的水準, 分別降低工廠與機器所造成的變異;

2. 如果實驗者關心的不僅僅是產品或製程時的總變異, 他們可能特別在意不同機器所造成的變異, 而並不是這麼在意不同工廠所造成的變異時, 有可能在工廠所造成的變異大於機器所造成的變異之情況下, 使用傳統平均-變異法建立的變異模型, 所建議之最佳控制因子的水準, 雖然可以使得總變異下降, 但也許反而會使得機器所造成的變異上升, 因此, 如果我們可以得到工廠與機器個別的變異模型, 則可以針對實驗者不同的需求, 提供較多的資訊;

3. 或者, 當我們可以了解不同機器所造成的變異, 是否遠大於工廠所造成的變異時, 若是, 則我們可以提供實驗者一個改善整體實驗環境的方向, 如果實驗者想要降低產品或製程的變異, 除了可藉由穩健參數設計得到的平均模型與變異模型, 選取適當的控制因子水準外, 亦可嘗試購買新的機器, 使不同機器間所造成的變異降低。

故當一個實驗的區塊結構是由好幾個不同的區塊因子所組成, 我們有興趣的不單單只是所有區塊因子所造成的總變異, 而是個別區塊因子所造成的變異。以下我們用圖 2.1 具有巢狀區塊結構的多階層實驗爲例子, 介紹該如何估計各個區塊因子所造成的變異, 建立平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型, 並推廣此方法, 以適用於各種具有巢狀區塊結構的實驗, 使得實驗者可以針對不同的情況下, 選取最佳控制因子的水準, 使平均反應值達到目標, 且盡可能地降低製程或產品的變異。

2.1 具有巢狀區塊結構的多階層實驗

在圖 2.1 具有巢狀區塊結構的多階層實驗中, 我們眞正有興趣想要了解的工廠, 可能有幾十或幾百家, 但是在經濟的考量下, 我們不可能對每間工廠都做實驗, 因此我們會考慮隨機的抽取幾間工廠爲樣本, 舉例來說, 本次實驗共選取了十六間工廠 $F_1 \sim F_{16}$, 而下次實驗時, 我們仍然可能選取十六間工廠來做實驗, 但此時的工廠一 F_1 與前一次實驗的工廠一 F_1 , 因爲抽樣的關係, 很有可能是不同的工廠。而每間工廠中也可能有幾十台的機器, 我們依然是隨機地抽取幾台來做實驗, 例如, 本次實驗在每間工廠中皆選取了四台機器 $M_1 \sim M_4$, 也就是說, 我們做實驗時的工廠與機器, 其實可視爲由其背後一個更大母體中隨機挑選出來的。也就是說, 工廠與機器所造成的變異, 可以視爲母體因抽樣所產生的。而重複實驗所產生的變異, 通常視爲隨機誤差所造成的。因此, 針對本實驗, 我們可以將所有區塊因子皆視爲隨機效應因子 (random effect factor)。另一方面, 在本實驗的處理結構中, 有三個控制因子, 我們有興趣了解這些控制因子是如何影響平均反應值, 以及如何影響各個區塊因子所造成的變異, 因此, 我們可以將控制因子視爲固定效應因子 (fixed effect factor)。此時, 我們可以利用巢狀隨機效應模型 (nested random effect model), 來描述在不同控制因子水準組合下, 反應值是如何受到區塊因子的影響, 於 2.1.1 節會詳細介紹巢狀隨機效應模型。

2.1.1 巢狀隨機效應模型

如果區塊因子所造成的變異, 會受到控制因子不同水準的影響, 也就是在不同控制因子的水準組合時, 區塊因子所造成的變異大小會有不同。舉例來說, 有可能在高溫時, 不同工廠所生產的晶圓, 品質差異不大; 可是在低溫的時候, 不同工廠所生產的晶圓, 品質差異很大, 也就是控制因子 (溫度) 的高低, 會影響區塊因子 (工廠) 所造成的變異。另外, 可能在濕度很低的環境中, 工廠內不同機器所生產的晶圓, 品質差異不大; 可是在濕度很高的環境下, 工廠內不同機器所生產的晶圓, 品質差異很大, 也就是控制因子 (濕度) 的高低, 會影響區塊因子 (機器) 所造成的變異。在這樣的實驗中, 我們可以藉由調整控制因子的水準, 例如: 在上述的例子中, 可能可以控制晶圓的生產環境爲高溫且低濕度, 來降低產品或製程中不同工廠及機器所造成的變異。因此, 針對圖 2.1 具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 我們可以針對不同控制因子水準的情況下, 建立一個二因子巢狀隨機效應模型 (two-way nested random effect model), 用來描述反應值 y 與控制因子, 以及區塊因子之關聯性, 並試著估計不同控制因子的水準時, 各個區塊因子所造成的變異大小。

二因子巢狀隨機效應模型如下

$$y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_{j(i)} + \epsilon_{(ij)k} \quad \begin{cases} i = 1, 2, \ldots, a \\ j = 1, 2, \ldots, b \\ k = 1, 2, \ldots, n \end{cases} \tag{2.3}$$

其中 μ 爲給定在控制因子不同水準組合時, 反應值 y_{ijk} 的平均值, 因爲控制因子的設定是固定, 因此我們將 μ 視爲一個固定效應; 而 τ_i 是第 i 間工廠的效應, 共有 a 間工廠, $\beta_{j(i)}$ 是第 i 間工廠內第 j 台機器的效應, 每間工廠內皆有 b 台機器, 因爲我們假設這些工廠和機器是由一個很大的母體中, 隨機抽取出來的; 而 ϵ_{ijk} 是第 i 間工廠內, 第 j 台機器上的第 k 次重複實驗點, 因此, 我們將 τ_i , $\beta_{j(i)}$ 和 $\epsilon_{(ij)k}$ 視爲隨機變數, 並且假設 τ_i 服從 $N(0, \sigma_\tau^2)$, $\beta_{j(i)}$ 服從 $N(0, \sigma_\beta^2)$ 以及 ϵ_{ijk} 服從 $N(0, \sigma_\epsilon^2)$。其中 σ_τ^2 代表總區區塊因子 (工廠) 的變異, σ_β^2 代表子區區塊因子 (機器) 的變異, σ_ϵ^2 代表隨機誤差項的變異。並假設 τ_i, $\beta_{j(i)}$, 和 $\epsilon_{(ij)k}$ 間互相獨立。如果實驗的區塊結構中, 存在更多區塊因子, 且其具有巢狀結構的設計, 我們

可以將此二因子巢狀隨機效應模型模型, 推廣至多因子巢狀隨機效應模型。

此外, 我們也可以用矩陣的形式來表示此二因子巢狀隨機效應模型,(2.3) 式可寫爲

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y} =&(\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b \otimes \mathbf{1}_n)\mu + (\boldsymbol{I}_a \otimes \mathbf{1}_b \otimes \mathbf{1}_n)\boldsymbol{\tau} \\ &+ (\boldsymbol{I}_a \otimes \boldsymbol{I}_b \otimes \mathbf{1}_n)\boldsymbol{\beta} + (\boldsymbol{I}_a \otimes \boldsymbol{I}_b \otimes \boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{\epsilon}\end{aligned} \tag{2.4}$$

其中

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_{111} \\ y_{112} \\ \vdots \\ y_{abn} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \vdots \\ \tau_a \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_{1(1)} \\ \beta_{2(1)} \\ \vdots \\ \beta_{b(a)} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_{1(11)} \\ \epsilon_{2(11)} \\ \vdots \\ \epsilon_{n(ab)} \end{bmatrix}$$

且 $\boldsymbol{I}_a$ 代表一個 a 維的單位矩陣 (identity matrix), $\mathbf{1}_{an}$ 代表一個 an 維的向量, 其向量中每個元素皆爲 1 , 以及 $\boldsymbol{J}_n$ 代表一個 n 維的矩陣, 其矩陣中每個元素皆爲 1, 而 $\otimes$ 爲 kronecker product。當我們給定 $\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\tau}$, $\boldsymbol{\beta}$, 和 $\boldsymbol{\epsilon}$ 的假設後, 可以得知觀測值 $\boldsymbol{y}$ 是來自於一個多維常態分配 $MN(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$, 其平均數 $\boldsymbol{\mu} = (\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b \otimes \mathbf{1}_n)\mu$, 變異數-共變數矩陣 (variance-covariance matrix) 爲

$$\boldsymbol{\Sigma} = (\boldsymbol{I}_a \otimes \boldsymbol{J}_b \otimes \boldsymbol{J}_n)\sigma_\tau^2 + (\boldsymbol{I}_a \otimes \boldsymbol{I}_b \otimes \boldsymbol{J}_n)\sigma_\beta^2 + (\boldsymbol{I}_a \otimes \boldsymbol{I}_b \otimes \boldsymbol{I}_n)\sigma_\epsilon^2 \tag{2.5}$$

由變異數-共變數矩陣 $\boldsymbol{\Sigma}$ 中, 我們可以了解區塊因子所造成的總變異, 其實是由總區區塊因子所造成的變異 σ_τ^2 、子區區塊因子所造成的變異 σ_β^2 , 以及隨機誤差所造成的變異 σ_ϵ^2 組合而成。

2.1.2 控制因子與區塊因子之關聯性

區塊因子所造成的變異大小, 其計算方法是考慮此區塊因子所代表的各個區塊單位上, 所有觀測值的平均之變化情形, 舉例來說, 總區區塊因子 (工廠) 所造成的變異之計算, 是由各間工廠所有觀測值的平均, 其差異的大小來衡量。因此, 當我們只考慮整間工廠所有觀測值的平均時, 是無法探討工廠內, 子區控制因子水準變化所造成的影響。另一方面, 在同一間工廠中所得的觀測值都是在相同的總區控

制因子水準下所產生的, 例如: 工廠一到工廠四, 其總區控制因子皆設定在高水準; 而工廠五到工廠八, 其總區控制因子皆設定在低水準, 此時, 我們可以由工廠一到工廠四每間工廠中, 個別工廠內所有觀測值的平均, 也就是由四個平均值的變化, 來了解總區控制因子在高水準時, 不同工廠所造成的變異大小, 並且由工廠五到工廠八每間工廠中, 個別工廠內所有觀測值的平均, 一樣是由四個平均值的變化, 來了解總區控制因子在低水準時, 不同工廠所造成的變異大小, 進而了解總區控制因子是如何影響總區區塊因子所產生的變異。上述的觀念適用於各層區塊因子中, 因此, 我們可以將上述的觀念推廣, 得到: 各個區塊因子所造成的變異, 只會受到所有比它還高階層的控制因子, 以及同階層的控制因子之影響, 並不會受到比此區塊因子低階層的控制因子之影響。換句話說, 即

1. 總區區塊因子所造成的變異, 只會受到總區控制因子的影響;

2. 子區區塊因子所造成的變異, 會受到總區控制因子與子區控制因子的影響;

3. 其餘次子區或更低階層子區之情形依此原則可類推。

另一方面, 我們可以從圖 2.1 具有巢狀區塊結構的實驗, 來了解上述控制因子與區塊因子之關聯性。假設現在我們所關心的是總區區塊因子 (工廠) 所造成的變異, 我們可以在給定總區控制因子 $(A, B) = (+, +)$ 的情況下, 如圖 2.3, 估計出四間不同工廠所造成的變異大小。但如果我們是給定在總區控制因子與子區控制因子 $(A, B, C) = (+, +, +)$ 的情況下, 如圖 2.2, 此時, 我們發現我們只能探討每間工廠中一半的觀測值, 也就是說, 在給定總區控制因子與子區控制因子 $(A, B, C) = (+, +, +)$ 的情況下, 區塊結構中依然有總區區塊因子 (工廠) 的存在, 但是, 因爲只能考慮工廠中一半的觀測值, 所以由此估計出來的變異數, 並不能眞正地代表工廠所造成的變異, 即此變異之估計是會有偏誤 (biased) 的。此外, 因爲子區控制因子的水準, 可以在每間工廠 (總區區塊因子) 中任意調整, 如果子區控制因子均衡 (高低水準出現次數相同) 地出現在每間工廠中, 也就是工廠中所有觀測值, 有一半是在子區控制因子的高水準時做實驗, 另一半是在子區控制因子低水準時做實驗, 此時, 整間工廠所有觀測值的平均, 剛好可以消掉子區控制因子對工廠的影響; 然而, 當子區控制因子不是均衡地出現在每間工廠中, 這樣子區控制因子不同水準所造成的變異, 會被混到總區區塊因子所造成的變異中, 因此, 可

能會造成估計工廠所造成的變異時有偏誤, 所以, 我們會建議實驗設計時, 所有控制因子, 都是採用均衡的設計, 而本論文只探討控制因子爲均衡設計的情況。

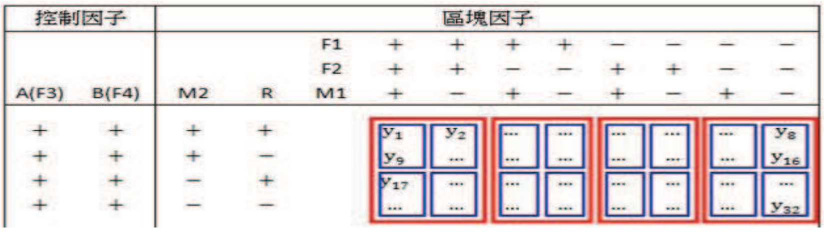

圖 2.3: 在圖2.1 $(A, B) = (+, +)$ 的部分

在接下來的兩節小中, 分別探討無子區控制因子與具有子區控制因子之實驗, 該如何計算總區區塊因子所造成的變異和子區區塊因子所造成的變異, 以及如何建立各個區塊因子的變異模型。因在這些實驗中, 沒有次子區控制因子與次子區區塊因子, 如果在其它具有次子區控制因子與次子區區塊因子之實驗中, 我們依然可以針對總區控制因子、子區控制因子和次子區控制因子在不同的水準下, 利用三因子巢狀隨機效應模型, 估計出各區塊因子所造成的變異, 以及建立總區控制因子, 子區控制因子和次子區控制因子對次子區區塊因子的變異模型。

2.1.3 無子區控制因子之實驗

本小節中討論, 處理結構中只有總區控制因子, 而區塊結構中有總區區塊因子、子區區塊因子的實驗。如圖2.4, 亦即圖2.1的實驗中, 忽略子區控制因子 C , 只保留總區控制因子 A, B , 其中 $F_1 \sim F_4$ 爲總區區塊因子, M_1, M_2 爲子區區塊因子, R 表示重複實驗點。

總區區塊因子 (工廠) 與子區區塊因子 (機器) 所造成的變異, 皆會受到總區控制因子 A, B 的影響, 因此, 我們可以先針對總區控制因子 A, B 設定在 (+,+) 的情況下, 如圖2.3, 我們可以發現在 $(A, B) = (+, +)$ 的情況下, 有一個 $4/4/2$ 的巢狀區塊結構, 即區塊結構中有四間工廠, 每間工廠內各有四台機器, 每台機器各重複做兩次實驗。因此, 針對控制因子 A, B 不同水準組合時, 我們皆可以建立一個二因子巢狀隨機效應模型, 描述在這種控制因子 A, B 的水準組合下, 反應值 y

圖 2.4: 圖2.1中只有總區控制因子 A, B 的實驗

與總區區塊因子, 以及子區區塊因子之關聯性, 並且估計各個區塊因子所造成的變異大小。

此二因子巢狀隨機效應模型如下

$$y_{ijk} = \mu_{(A,B)} + \tau_i + \beta_{j(i)} + \epsilon_{(ij)k} \quad \begin{cases} i = 1,2,3,4 \\ j = 1,2,3,4 \\ k = 1,2 \end{cases} \tag{2.6}$$

此模型中每個參數的假設, 與 (2.3) 式所介紹類似, 但爲了更清楚地表示出控制因子的影響, 我們在此模型的參數內加入控制因子的下標, 以代表這些參數有可能隨著控制因子之水準改變而變化。此時, 我們有興趣的是: 總區區塊因子所造成的變異 $\sigma^2_{\tau,(A,B)}$, 以及子區區塊因子所造成的變異 $\sigma^2_{\beta,(A,B)}$ 之估計方法, 文獻回顧1.3

節中已說明, Searle et al. (1992) 如何用最大概似估計法求出二因子巢狀隨機效應模型中, 各個因子變異數之估計式, 以下我們直接列出其結果

1. 總區區塊因子變異 $\sigma^2_{\tau,(A,B)}$ 的估計式

$$\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} = \begin{cases} \dfrac{(\frac{3}{4})MS_{\tau,(A,B)} - MS_{\beta:\tau,(A,B)}}{4\times 2} & \texttt{when } \dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} \geq 0,\ \dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} \geq 0 \\ \dfrac{(\frac{3}{4})MS_{\tau,(A,B)} - (SS_{E,(A,B)} + \frac{SS_{\beta:\tau,(A,B)}}{4(4\times2-1)})}{4\times 2} & \texttt{when } \dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} \geq 0,\ \dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} < 0 \\ 0 & \texttt{otherwise} \end{cases} \tag{2.7}$$

2. 子區區塊因子變異 $\sigma^2_{\beta,(A,B)}$ 的估計式

$$\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} = \begin{cases} \dfrac{MS_{\beta:\tau,(A,B)} - MS_{E,(A,B)}}{2} & \texttt{when } \dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} \geq 0,\ \dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} \geq 0 \\ \dfrac{1}{2}(\dfrac{SS_{\tau,(A,B)} + SS_{\beta:\tau,(A,B)}}{4\times 4} - MS_{E,(A,B)}) & \texttt{when } \dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} < 0,\ \dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} \geq 0 \\ 0 & \texttt{otherwise} \end{cases} \tag{2.8}$$

其中 $MS_{\tau,(A,B)}$ 代表總區區塊因子的均方, $MS_{\beta:\tau,(A,B)}$ 代表子區區塊因子的均方, 而 $MS_{E,(A,B)}$ 代表隨機誤差項的均方; $\dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)}$ 和 $\dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)}$ 是最大概似估計法的解。在平均-變異法中, 各區塊因子均方的計算方式, 是利用文獻回顧1.3節中表1.7, 各個區塊因子的平方和 (如 $SS_{\tau,(A,B)}$, $SS_{\beta:\tau,(A,B)}$ 與 $SS_{E,(A,B)}$) 運算而得。而 (2.6) 式中各區塊因子均方的計算公式為

$$\begin{aligned} MS_{\tau,(A,B)} &= \frac{SS_{\tau,(A,B)}}{a-1} &= \textstyle\sum_{i=1}^{4} 8(\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2/3 \\ MS_{\beta:\tau,(A,B)} &= \frac{SS_{\beta:\tau,(A,B)}}{a(b-1)} &= \textstyle\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4} 2(\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..})^2/12 \\ MS_{E,(A,B)} &= \frac{SS_{E,(A,B)}}{ab(n-1)} &= \textstyle\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4}\sum_{k=1}^{2} (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2/16 \end{aligned} \tag{2.9}$$

由此區塊因子變異數估計式的結構, 我們可以看出

1. 總區區塊因子所造成的變異, 是一個總區區塊因子的均方, 扣掉子區區塊因子的均方的函數; 換言之, 總區區塊因子的均方, 其實包含了總區區塊因子

的變異, 子區區塊因子的變異, 以及隨機誤差項的變異, 因此在估計總區區塊因子所造成的變異時, 我們必須將子區區塊因子與隨機誤差項所造成的變異扣掉。如果當子區區塊因子所造成的變異很小時, 由最大概似法估計法有可能會得到子區區塊因子所造成的變異爲 0 的估計值 (概似函數的解沒有落於參數空間), 此時, 總區區塊因子所造成的變異, 爲總區區塊因子的均方減去隨機誤差項的均方, 而此隨機誤差項的均方之計算, 是包含了子區區塊因子的平方和 $SS_{\beta:\tau,(A,B)}$ 與隨機誤差項的平方和 $SS_{E,(A,B)}$。

2. 子區區塊因子所造成的變異, 是一個子區區塊因子的均方, 扣掉隨機誤差項的均方的函數; 換言之, 子區區塊因子的均方, 其實包含了子區區塊因子的變異, 以及隨機誤差的變異。如果當總區區塊因子的變異很小時, 最大概似法的估計式有可能會得到總區區塊因子所造成的變異爲 0 的估計值 (概似函數的解沒有落於參數空間), 此時, 必須對子區區塊因子的均方, 做一些修正, 所以必須將總區區塊因子的平方和 $SS_{\tau,(A,B)}$ 與子區區塊因子的平方和, 皆視爲由子區區塊因子所造成的變異。

Chen (2008) 提出, 使用總區區塊因子的平方和, 代表總區區塊因子的變異 $\sigma^2_{\tau,(A,B)}$

$$\mathtt{G}_1(SS) = \sum_{i=1}^{2^{n_1}} (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 \propto SS_{\tau,(A,B)}$$

子區區塊因子的平方和, 代表子區區塊因子的變異 σ^2_β

$$\mathtt{G}_2(SS) = \sum_{i=1}^{2^{n_1}} \sum_{j=1}^{2^{n_2}} (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..})^2 \propto SS_{\beta:\tau,(A,B)}$$

次子區區塊因子的平方和, 代表次子區區塊因子的變異 σ^2_ϵ

$$\mathtt{G}_3(SS) = \sum_{i=1}^{2^{n_1}} \sum_{j=1}^{2^{n_2}} \sum_{k=1}^{2^{n_3}} (\bar{y}_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2 = SS_{E,(A,B)}$$

然而, 在這樣的做法中, 並不是眞正的估計出各個區塊因子所造成的變異, 而是估計出各個區塊的總變異情形, 可由 (2.9) 式了解, 各個區塊因子平方和與均方之關聯性, 以及由 (2.7) 式與 (2.8) 式, 了解各區塊因子的均方與各區塊因子所造成的

變異之關聯性。

由 (2.7) 式與 (2.8) 式, 我們可以估計出不同控制因子水準組合時, 反應值的平均 $\hat{\bar{y}}_{(A,B)} = \sum_i^4 \sum_j^4 \sum_k^2 y_{ijk}/32$, 以及各區塊因子所造成的變異之估計值, 詳見表2.3 。

表 2.3: 總區控制因子 A, B 與平均、變異之關聯性

總區控制因子		平均	總區區塊因子變異	子區區塊因子變異	隨機誤差變異
A	B	$\bar{y}_i$	$\sigma^2_{\tau_i}$	$\sigma^2_{\beta_i}$	$\sigma^2_{\epsilon_i}$
$+$	$+$	$\hat{\bar{y}}_{(+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(+,+)}$
$+$	$-$	$\hat{\bar{y}}_{(+,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(+,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(+,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(+,-)}$
$-$	$+$	$\hat{\bar{y}}_{(-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(-,+)}$
$-$	$-$	$\hat{\bar{y}}_{(-,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(-,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(-,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(-,-)}$

當估計出總區控制因子 A, B 不同水準組合時, 反應值的平均, 總區區塊因子所造成的變異, 以及子區區塊因子所造成的變異後, 可將總區控制因子 A, B 視爲獨立變數 X_A, X_B, 對反應值 $\hat{\bar{y}}_{(A,B)}$ 配適一個平均模型, 對 $\log(\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)})$ 配適一個總區區塊因子的變異模型, 以及對 $\log(\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)})$ 配適一個子區區塊因子的變異模型, 其中將因子變異數取 log 的原因是爲了避免變異模型估計出負的變異數之估計值。

$$\hat{y}_{(A,B)} = \hat{\gamma}_{00} + \hat{\gamma}_{01}X_A + \hat{\gamma}_{02}X_B + \hat{\gamma}_{03}X_AX_B \tag{2.10}$$

$$\ln \hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} = \hat{\gamma}_{10} + \hat{\gamma}_{11}X_A + \hat{\gamma}_{12}X_B + \hat{\gamma}_{13}X_AX_B \tag{2.11}$$

$$\ln \hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} = \hat{\gamma}_{20} + \hat{\gamma}_{21}X_A + \hat{\gamma}_{22}X_B + \hat{\gamma}_{23}X_AX_B \tag{2.12}$$

當得到上述三個模型後, 我們可以分別

1. 由平均模型 (2.10) 式, 我們可以藉由調整總區控制因子 A, B 的水準, 使得平均反應值達到目標, 這是傳統的穩健參數設計中, 就可以做到的;

2. 由總區區塊因子的變異模型 (2.11) 式, 我們可以藉由調整總區控制因子 A, B 的水準, 達到降低總區區塊因子所造成的變異, 而此部分是傳統穩健參數設計的平均-變異法無法達成的;

3. 由子區區塊因子的變異模型 (2.12) 式, 我們可以藉由調整總區控制因子 A, B 的水準, 達到降低子區區塊因子所造成的變異, 而此部分也是傳統穩健參數設計的平均-變異法無法達成的。

因傳統的平均-變異法, 只能針對所有區塊因子的總變異得到一個變異模型, 然而, 在我們提出的新版本平均-變異法中, 改進了傳統的方法, 使得我們可以針對不同區塊因子, 建立個別區塊因子的變異模型, 讓實驗者在選取控制因子的水準時, 更有彈性、更能符合實驗者的需求。如果當實驗有很多控制因子時, 我們亦可利用半常態圖 (half-normal plot) 找出, 在平均模型與兩個變異模型中, 顯著的控制因子; 如果有顯著的控制因子, 同時出現在平均模型與變異模型中, 其處理方式可參考 Wu 和 Hamada (2000) 提出的, 使用平均-變異法的分析策略。

2.1.4 具有子區控制因子之實驗

本小節延續2.1.3節之討論, 考慮與圖2.4無子區控制因子之實驗具有相同區塊結構的實驗, 並加入子區控制因子, 即本節所探討的實驗爲, 處理結構中同時具有總區控制因子與子區控制因子; 而區塊結構中亦具有總區區塊因子與子區區塊因子的實驗。以圖2.1所介紹的實驗爲例子, 此實驗中有總區控制因子 A, B, 子區控制因子 C, 總區區塊因子 $F_1 \sim F_4$, 子區區塊因子 M_1, M_2, 以及隨機誤差因子 R。

由2.1.2節可知, 總區區塊因子 (工廠) 所造成的變異只會受到總區控制因子的影響, 不會受到子區控制因子的影響。因此, 當我們有興趣探討的爲總區區塊因子所造成的變異時, 其計算與有無子區控制因子無關, 故在計算總區區塊因子所造成的變異時, 我們可以將具有子區控制因子之實驗簡化成無子區控制因子之實驗, 其總區區塊因子所造成的變異之計算法, 如同2.1.3節中所介紹。如果在具子區控制因子之實驗中, 給定在總區控制因子與子區控制因子的水準組合下, 去計算總區區塊因子所造成的變異是有偏誤的。舉例來說, 考慮兩個具有相同區塊結構的實驗, 在圖2.4無子區控制因子之實驗中, 當我們給定在總區控制因子 $(A, B) = (+, +)$

時, 每間工廠內有四台機器, 共有八個觀測值; 然而, 當我們把子區控制因子 C 加入圖 2.4 的實驗時, 如圖 2.1, 此時當我們給定在總區控制因子與子區控制因子 $(A, B, C) = (+, +, +)$ 時, 只能計算每間工廠內的兩台機器上, 所觀測到共四個實驗點, 也就是說, 當亦考慮子區控制因子 C 不同水準的情況下時, 所計算得到之總區區塊因子 (工廠) 所造成的變異, 其實只考慮了每間工廠中一半的觀測值, 因此, 無法得到正確地總區區塊因子所造成的變異。

子區區塊因子 (機器) 所造成的變異會受到總區控制因子的影響, 以及子區控制因子的影響, 爲了計算子區區塊因子的變異, 我們先考慮總區控制因子與子區控制因子 $(A, B, C) = (+, +, +)$ 的情況下, 如圖 2.2, 計算子區區塊因子所造成的變異, 此時, 我們可以發現在控制因子 $(A, B, C) = (+, +, +)$ 時, 巢狀區塊結構中共有四間工廠, 每間工廠內各有兩台機器, 以及在每台機器各重複做兩次實驗。因此, 可以建立一個二因子巢狀隨機效應模型, 來描述在控制因子 A, B, C 不同水準組合時, 反應值 y 與總區區塊因子, 以及子區區塊因子之關聯性, 並且估計各個區塊因子所造成的變異大小。

此時二因子巢狀隨機效應模型如下

$$y_{ijk} = \mu_{(A,B,C)} + \tau_i + \beta_{j(i)} + \epsilon_{ijk} \begin{cases} i = 1, 2, 3, 4 \\ j = 1, 2, \\ k = 1, 2 \end{cases} \tag{2.13}$$

此模型中每個參數的假設, 與 (2.3) 式所介紹類似。此時, 我們有興趣的是: 子區區塊因子所造成的變異 $\sigma^2_{\beta,(A,B,C)}$ 之估計方法, 文獻回顧 1.3 節中已說明, Searle et al. (1992) 如何利用最大概似估計法求出二因子巢狀隨機效應模型中, 各個因子變異數之估計式, 以下我們直接列出其結果

$$\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} = \begin{cases} \dfrac{MS_{\beta:\tau,(A,B,C)} - MS_{E,(A,B,C)}}{2} & \texttt{when } \dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B,C)} \geq 0,\ \dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} \geq 0 \\ \frac{1}{2}\left(\dfrac{SS_{\tau,(A,B,C)} + SS_{\beta:\tau,(A,B,C)}}{4\times 2} - MS_{E,(A,B,C)}\right) & \texttt{when } \dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B,C)} < 0,\ \dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} \geq 0 \\ 0 & \texttt{otherwise} \end{cases} \tag{2.14}$$

其中 $MS_{\beta:\tau,(A,B,C)}$ 代表子區區塊因子的均方, $MS_{E,(A,B,C)}$ 代表隨機誤差項的均方; $\dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B,C)}$ 和 $\dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)}$ 是最大概似估計法的解。在平均-變異法中, 各區塊因子均方的計算方式, 是利用文獻回顧1.3節中表1.7, 區塊因子平方和 ($SS_{\beta:\tau,(A,B,C)}$ 與 $SS_{E,(A,B,C)}$) 的公式運算而得, 套到本例 (2.13) 式, 子區區塊因子的均方與隨機誤差項的均方之計算公式為

$$\begin{aligned} MS_{\beta:\tau,(A,B,C)} &= \frac{SS_{\beta:\tau,(A,B,C)}}{a(b-1)} = \sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{2} 2(\bar{y}_{ij.}-\bar{y}_{i..})^2/4 \\ MS_{E,(A,B,C)} &= \frac{SS_{E,(A,B,C)}}{ab(n-1)} = \sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}(y_{ijk}-\bar{y}_{ij.})^2/8 \end{aligned} \tag{2.15}$$

由 (2.7) 式與 (2.15) 式, 我們可以估計出不同控制因子水準組合時, 反應值的平均 $\hat{\bar{y}}_{(A,B,C)} = \sum_i^4\sum_j^2\sum_k^2 y_{ijk}/16$, 以及各區塊因子變異之估計值, 詳見表2.4

表 2.4: 控制因子 A, B, C 與平均、變異之關聯性

控制因子			平均	總區區塊因子變異	子區區塊因子變異	隨機誤差變異
A	B	C	$\bar{y}_j$	$\sigma^2_{\tau_i}$	$\sigma^2_{\beta_j}$	$\sigma^2_{\epsilon_j}$
$+$	$+$	$+$	$\hat{\bar{y}}_{(+,+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(+,+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(+,+,+)}$
$+$	$+$	$-$	$\hat{\bar{y}}_{(+,+,-)}$		$\hat{\sigma}^2_{\beta,(+,+,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(+,+,-)}$
$+$	$-$	$+$	$\hat{\bar{y}}_{(+,-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(+,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(+,-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(+,-,+)}$
$+$	$-$	$-$	$\hat{\bar{y}}_{(+,-,-)}$		$\hat{\sigma}^2_{\beta,(+,-,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(+,-,-)}$
$-$	$+$	$+$	$\hat{\bar{y}}_{(-,+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(-,+,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(-,+,+)}$
$-$	$+$	$-$	$\hat{\bar{y}}_{(-,+,-)}$		$\hat{\sigma}^2_{\beta,(-,+,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(-,+,-)}$
$-$	$-$	$+$	$\hat{\bar{y}}_{(-,-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau,(-,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta,(-,-,+)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(-,-,+)}$
$-$	$-$	$-$	$\hat{\bar{y}}_{(-,-,-)}$		$\hat{\sigma}^2_{\beta,(-,-,-)}$	$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(-,-,-)}$

當估計出總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 不同水準組合時, 個別的平均反應值, 以及子區區塊因子所造成的變異後。可將總區控制因子與子區控制因子 A, B, C 視為獨立變數 X_A, X_B, X_C, 對 $\hat{\bar{y}}_{(A,B,C)}$ 配適一個平均模型, 對 $\log(\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)})$ 配適一個子區區塊因子的變異模型。此外, 亦可只將總區控制因子 A, B 視為獨立

變數 X_A, X_B, 對 $\log(\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)})$ 配適一個總區區塊因子的變異模型, 其中, 對變異數取 log 的原因是爲了避免變異模型估計出負的變異數之估計值。

$$\hat{y}_{(A,B,C)} = \hat{\gamma}_{00} + \hat{\gamma}_{01}X_A + \hat{\gamma}_{02}X_B + \hat{\gamma}_{03}X_C + \hat{\gamma}_{04}X_AX_B + \hat{\gamma}_{05}X_AX_C + \hat{\gamma}_{06}X_BX_C + \hat{\gamma}_{07}X_AX_BX_C \quad (2.16)$$

$$\ln\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} = \hat{\gamma}_{10} + \hat{\gamma}_{11}X_A + \hat{\gamma}_{12}X_B + \hat{\gamma}_{13}X_AX_B \quad (2.11)$$

$$\ln\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} = \hat{\gamma}_{20} + \hat{\gamma}_{21}X_A + \hat{\gamma}_{22}X_B + \hat{\gamma}_{23}X_C + \hat{\gamma}_{24}X_AX_B + \hat{\gamma}_{25}X_AX_C + \hat{\gamma}_{26}X_BX_C + \hat{\gamma}_{27}X_AX_BX_C \quad (2.17)$$

當得到上述三個模型後, 我們可以分別

1. 由平均模型 (2.16) 式, 我們可以藉由調整總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 的水準, 使得平均反應值達到目標;
2. 由總區區塊因子的變異模型 (2.11) 式, 我們可以藉由調整總區控制因子 A, B 的水準, 達到降低總區區塊因子所造成的變異;
3. 由子區區塊因子的變異模型 (2.17) 式, 我們可以藉由調整總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 的水準, 達到降低子區區塊因子所造成的變異。

2.2 一般情況

由前三小節中, 我們已經了解針對圖 2.1 與圖 2.4 的實驗, 即具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 該如何正確地使用新版本的平均-變異法, 得到在不同控制因子水準組合時, 平均以及各個區塊因子所造成的變異之估計, 並由上述估計值, 進而建立平均模型, 總區區塊因子的變異模型, 以及子區區塊因子的變異模型。現在, 我們考慮將此方法推廣至一般具有巢狀區塊結構的多階層實驗中, 不論實驗的巢狀區塊結構有多少層, 我們皆可由以下四個步驟, 建立平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型。

1. 將實驗處理結構中的控制因子, 視爲固定效應因子, 並將實驗區塊結構中的區塊因子, 視爲隨機效應因子。

2. 在不同控制因子水準組合下, 建立巢狀隨機效應模型來描述在此種控制因子水準組合下, 區塊因子與反應值之關聯性, 並假設模型中隨機效應因子皆來自於常態分配。

3. 利用最大概似估計式, 計算出在不同控制因子水準組合下, 平均反應值, 以及各個區塊因子所造成的變異。

4. 將控制因子視爲獨立變數, 由不同控制因子水準組合下的平均反應值, 對控制因子配適一個平均模型; 由總區控制因子不同水準組合下, 總區區塊因子所造成的變異取 log , 對總區控制因子配適一個總區區塊因子的變異模型; 由總區與子區控制因子不同水準組合下, 子區區塊因子所造成的變異取 log, 對總區與子區控制因子配適一個子區區塊因子的變異模型; 由總區與子區與次子區控制因子不同水準組合下, 次子區區塊因子所造成的變異取 log , 對總區與子區與次子區控制因子配適一個次子區區塊因子變異模型, 更下層之區塊因子的變異模型, 可以以此類推。

2.3 實例分析

本節以表1.1的長晶實驗爲例子, 利用平均-變異法建立長晶實驗的平均模型, 總區區塊因子的變異模型, 以及子區區塊因子的變異模型, 並分析其結果, 找出適當的控制因子水準組合。

如表2.5, 長晶實驗的處理結構中有總區控制因子 A, B , 子區控制因子 C , 而區塊結構中的十六間工廠, 可以用四個兩水準因子 $F_1 \sim F_4$ 的十六種水準組合來表示, 每間工廠底下有四台機器, 可以用兩個兩水準因子 $M_1 \sim M_2$ 的四種水準組合來表示, 每台機器上皆做兩次重複實驗, 可以用一個兩水準因子 R 來表示。其中, 總區區塊因子 F_3, F_4 分別與總區控制因子 A, B 混淆在一起, 子區區塊因子 M_2 與子區控制因子 C 混淆在一起。

長晶實驗的處理結構與區塊結構, 皆與2.1.3節所介紹的具有子區控制因子之實驗相同, 首先, 可以算出在不同控制因子水準組合下, 重複點實驗點的平均數,

並且可以由 (2.6) 式與 (2.7) 式, 估計出在不同總區控制因子水準組合下, 總區區塊因子 (機器) 所造成的變異大小, 以及由 (2.13) 式與 (2.14) 式, 估計出在總區與子區控制因子水準組合下, 子區區塊因子 (機器) 所造成的變異大小, 上述平均數與各個區塊因子變異數的估計值皆列在表2.6。

表 2.5: 長晶實驗資料與其區塊結構

處理結構			區塊結構								
控制因子			區塊因子								
			F_1	+	+	+	+	−	−	−	−
			F_2	+	+	−	−	+	+	−	−
			M_1	+	−	+	−	+	−	+	−
$A(F_3)$	$B(F_4)$	$C(M_2)$	R								
+	+	+	+	14.29	14.80	14.27	14.70	15.32	15.93	15.27	14.92
+	+	+	−	14.19	14.72	14.19	14.76	14.43	14.90	15.41	15.13
+	+	−	+	13.88	13.41	13.85	13.59	14.01	14.24	14.21	14.40
+	+	−	−	13.92	13.48	14.08	13.52	13.94	14.26	14.08	14.37
+	−	+	+	14.17	13.25	14.14	13.19	14.15	14.22	14.15	14.27
+	−	+	−	14.03	13.33	14.08	13.44	14.17	14.30	14.28	14.41
+	−	−	+	14.06	14.31	14.18	14.68	15.30	15.01	15.42	15.57
+	−	−	−	14.09	14.41	14.05	14.58	15.52	15.06	15.21	15.47
−	+	+	+	13.73	13.90	12.65	14.45	14.90	13.75	14.19	14.22
−	+	+	−	13.29	14.56	13.27	13.71	14.80	14.32	14.63	13.82
−	+	−	+	14.22	13.52	15.28	14.28	14.19	14.56	15.55	15.23
−	+	−	−	14.40	13.58	15.04	13.84	14.43	14.47	15.22	15.11
−	−	+	+	14.53	14.57	14.67	13.71	14.74	15.87	14.97	14.97
−	−	+	−	14.25	14.03	15.28	14.64	14.18	15.22	15.55	16.00
−	−	−	+	12.90	13.95	13.15	14.11	14.25	13.81	14.13	14.43
−	−	−	−	12.71	14.08	13.89	13.60	13.84	14.07	15.17	13.69

* 原始長晶實驗資料數據的精確度達到小數點後四位, 在此因爲版面有限, 只列出四捨五入至小數點後第二位的值。
* 爲了計算上方便, 我們對調了原始長晶實驗中, 一些控制因子水準組合下的觀測值。

表 2.6: 長晶實驗的控制因子與平均、變異之關聯性

總區控制因子		子區控制因子	平均	總區區塊因子變異	子區區塊因子變異
A	B	C	$\bar{y}$	σ_τ^2	σ_β^2
$+$	$+$	$+$	14.8567	0.0314	0.0878
$+$	$+$	$-$	13.9524		0.0617
$+$	$-$	$+$	13.9743	0.0920	0.1592
$+$	$-$	$-$	14.8068		0.0612
$-$	$+$	$+$	14.0113	0.0349	0.2516
$-$	$+$	$-$	14.5581		0.2169
$-$	$-$	$+$	14.8388	0.0355	0.2505
$-$	$-$	$-$	13.8620		0.1574

1. 由表2.6, 我們可以建立一個平均模型:

$$\begin{aligned}\hat{y}_{(A,B,C)} =& 14.3576 + 0.0400X_A - 0.0129X_B + 0.0627X_C + 0.0199X_AX_B \\ & - 0.0448X_AX_C + 0.0267X_BX_C + 0.4076X_AX_BX_C \qquad (2.18)\end{aligned}$$

2. 亦可建立一個總區區塊因子的變異模型:

$$\ln\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} = -3.1360 + 0.2117X_A - 0.2734X_B - 0.2645X_AX_B \quad (2.19)$$

3. 以及建立一個子區區塊因子的變異模型:

$$\begin{aligned}\ln\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} =& -1.9989 - 0.4634X_A - 0.0325X_B + 0.2402X_C - 0.1138X_AX_B \\ & + 0.0870X_AX_C - 0.1151X_BX_C - 0.0360X_AX_BX_C \\ & \qquad (2.20)\end{aligned}$$

由 (2.18)−(2.20) 式, 我們可以做以下的分析。因長晶實驗爲反應值有目標值的實驗, 可以使用 Wu 和 Hamada (2000) 提出平均-變異法的兩步驟分析策略。

1. 利用變異模型, 調整變異因子的水準, 使產品或製程的變異最小化。
2. 利用平均模型, 調整不是變異因子的平均因子的設定, 使反應值盡可能的達到目標值。

首先, 由平均模型 (2.18) 式知, 如果將控制因子的水準定在 $(A, B, C) = (+, +, +)$, $(+, -, -), (-, +, +), (-, +, -), (-, -, +)$, 其反應值的平均厚度皆可維持在 14.5 $\pm$ 0.5 μm , 因此, 我們可以在這幾組控制因子的水準中, 尋找適當地控制因子水準, 使得各個區塊因子所造成的變異最小化, 舉例來說, 針對總區區塊因子 (工廠) 所造成的變異, 由 (2.19) 式知, 可以將總區控制因子的水準定在 $(A, B) = (+, +)$, 使得總區區塊因子所造成的變異最小; 針對子區區塊因子 (機器) 所造成的變異, 由 (2.20) 式知, 可以將總區與子區控制因子水準定在 $(A, B, C) = (+, -, -)$, 使得子區區塊因子所造成的變異最小。由上述的分析, 我們可以發現, 要使得不同造成實驗變異的因子, 其實驗變異達到最小, 其最佳控制因子水準可能不同, 也就是說, 使用傳統的穩健參數設計法, 只能針對總變異找出一組最佳的控制因子水準, 但如果實驗者想要針對不同造成實驗變異的區塊因子做改進, 傳統的穩健參數設計則無法提供這樣的資訊。

第 3 章 分析方法二: 反應建模法

傳統的穩健參數設計中, 反應建模法並不是利用先計算在不同控制因子的水準組合下, 所有重複實驗點的平均與變異, 進而建立平均模型與變異模型, 而是先將所有因子 (包含處理因子與區塊因子) 皆視爲獨立變數, 對反應值建立迴歸模型, 並稱此模型 $\hat{y}$ 爲反應模型(response model), 接著將反應模型中的區塊因子視爲獨立隨機變數, 藉由對反應模型中所有區塊隨機變數取平均 $E(\hat{y})$, 得到一個平均反應值與控制因子相關的平均模型; 也可以藉由對反應模型中所有區塊隨機變數取變異 $Var(\hat{y})$, 得到一個所有區塊因子所造成的變異與控制因子相關的變異模型, 關於反應建模法的細節, 請參考 Wu 和 Hamada (2000, Chapter 10)。在具有巢狀區塊結構的多階層實驗中, 使用傳統的反應建模法, 一樣會遇到本論文第二章平均-變異法所面臨的問題: 只能對所有區塊因子所造成的總變異建立一個變異模型, 無法區分不同區塊因子所造成的變異, 亦無法了解這些變異是如何受控制因子的影響。本章節中, 我們提出新版本的反應建模法, 其適當地對反應模型中的不同層級區塊隨機變數 (如: 總區區塊隨機變數, 子區區塊隨機變數, 以及隨機誤差隨機變數) 做運算 (取變異或平均), 以得到不同區塊因子所造成的平方和模型, 並利用1.3節所介紹的巢狀隨機效應模型, 得到各個區塊因子所造成的變異之估計, 並建立各個區塊因子的變異模型, 來描述不同區塊因子所造成的變異, 是如何受到控制因子的影響。

反應建模法的第一步是對反應值建立反應模型, 此時要將所有因子皆視爲獨立變數, 我們必須給予每個獨立變數的效應一個編碼 (coding)。以表3.1的實驗爲例子, 實驗的處理結構中有一個兩水準控制因子 A , 在控制因子 A 的不同水準下, 皆有四個重複實驗點, 而這四個重複實驗點, 是分佈在一個 2/2 的巢狀區塊結構上, 也就是以整個實驗來看, 是一個 4/2 的巢狀區塊結構, 可以想像成表3.1實驗中的

八個觀測值, 分別是在四間不同的工廠裡, 且每間工廠底下有兩台不同的機器上做實驗觀測而得。此時, 我們可以用 y_{ij} 的下標 i 表示此觀測值是在第幾間工廠中做實驗, 下標 j 表示此觀測值是在第幾台機器上做實驗, 在此要特別注意, 不同工廠中的機器, 雖然其編號可能相同, 但兩台機器是不同的。舉例來說, 其中 y_{11}, y_{12} 爲在第一間工廠中, 第一台機器與第二台機器上做實驗的兩個觀測值, 而 y_{21}, y_{22} 爲在第二間工廠中, 第一台與第兩台機器上的兩個觀測值, 其它觀測值可以依此類推。

表 3.1: 具有巢狀區塊結構之實驗

控制因子 A	重複實驗點			
+	y_{11}	y_{12}	y_{21}	y_{22}
−	y_{31}	y_{32}	y_{41}	y_{42}

在這樣的實驗中, 我們可以說機器是套層於工廠之下。針對這樣具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 嚴格來說我們應當使用巢狀編碼 (nesting coding) 來描述區塊因子的效應, 但我們發現, 若目的爲建立平均模型與各個區塊因子的變異模型, 其實也可以忽略區塊因子內的巢狀結構, 直接使用交叉編碼 (crossing coding) 來描述區塊因子的效應。因爲, 在所有獨立變數 (包含控制因子與區塊因子) 皆爲正交 (orthogonal) 的情形下, 使用不同的編碼方式描述區塊因子的效應, 其實是不會影響反應模型中控制因子效應的估計, 故可以得到相同的平均模型; 但會影響反應模型中區塊因子效應的估計, 也就是使用不同的編碼方式, 會得到不一樣的反應模型, 然而, 反應建模法中的第二步, 我們將描述區塊因子的獨立變數視爲獨立隨機變數, 在建立各個區塊因子的變異模型之過程中, 可以對使用不同編碼方式描述區塊因子所建立的反應模型, 適當地對其做運算, 使得我們依然可以得到相同之各個區塊因子的變異模型。在接下來的兩小節中, 分別探討當使用巢狀編碼描述區塊因子, 或忽略巢狀區塊結構使用交叉編碼描述區塊因子時, 該如何藉由反應模型法, 建立平均模型, 各個區塊因子的變異模型, 以及各個區塊因子所造成的變異之估計。

以下用表3.1具有巢狀區塊結構的實驗爲例子, 針對實驗中的八個觀測值, 介紹兩種不同的編碼方式, 詳見表3.2。其中, 如果使用獨立變數 X_F 與 X_M 來表示兩種區塊因子 (工廠與機器), 此方式爲交叉編碼; 而如果使用獨立變數 X_{F_1}, X_{F_2} 與 $X_{M_{11}}, X_{M_{12}}, X_{M_{21}}, X_{M_{22}}$ 來表示兩種區塊因子 (工廠與機器), 此方式爲巢狀編碼。

表 3.2: 編碼方式介紹

反應值	控制因子	區塊因子		交叉編碼		巢狀編碼					
	X_A	F	M	X_F	X_M	X_{F_1}	X_{F_2}	$X_{M_{11}}$	$X_{M_{12}}$	$X_{M_{21}}$	$X_{M_{22}}$
y_{11}	1	1	1	1	1	1	0	1	0	0	0
y_{12}	1	1	2	1	-1	1	0	-1	0	0	0
y_{21}	1	2	1	-1	1	-1	0	0	1	0	0
y_{22}	1	2	2	-1	-1	-1	0	0	-1	0	0
y_{31}	-1	3	1	1	1	0	1	0	0	1	0
y_{32}	-1	3	2	1	-1	0	1	0	0	-1	0
y_{41}	-1	4	1	-1	1	0	-1	0	0	0	1
y_{42}	-1	4	2	-1	-1	0	-1	0	0	0	-1

3.1 巢狀編碼

本節中, 我們延續本論文第二章所討論的實驗, 並在接下來的兩小節中, 分別探討無子區控制因子與具有子區控制因子之實驗, 當使用巢狀編碼描述區塊因子時, 該如何正確地使用反應建模法, 建立平均模型, 並計算各個區塊因子所造成的變異, 以及建立各個區塊因子的變異模型。

3.1.1 無子區控制因子之實驗

首先, 我們考慮圖2.3的無子區控制因子之實驗, 在其處理結構中, 有 A, B 兩個兩水準總區控制因子, 且具有交叉結構; 而在每個總區控制因子 A, B 的不同水準組合下, 共有32個重複實驗點, 分別是在不同的四間工廠中, 且每間工廠裡有四

台機器, 並在每台機器上皆做兩次重複實驗, 因此, 在區塊結構中, 重複實驗點套層於機器下, 且機器套層於工廠下, 而工廠套層於總區控制因子 A, B 的不同水準下。所以在配適反應模型時, 必須將所有因子皆視爲獨立變數時, 可以使用交叉編碼來描述總區控制因子, 以及使用巢狀編碼來描述區塊因子。其中, 在總區控制因子 A, B 四個不同的水準下, 總區區塊因子包含四間工廠的效應, 因此我們可以利用三個正交對比 (orthogonal contrasts) 來表示工廠的主效應:

$$F_{i(1)} = (F_{i1} + F_{i2}) - (F_{i3} + F_{i4})$$

$$F_{i(2)} = (F_{i1} + F_{i4}) - (F_{i2} + F_{i3})$$

$$F_{i(3)} = (F_{i1} + F_{i3}) - (F_{i2} + F_{i4})$$

其中 $F_{i(n)},\ n = 1, 2, 3$ 的下標 $i = 1, 2, 3, 4$ 分別表示給定在總區控制因子的水準爲 $(A, B) = (+, +), (+, -), (-, +), (-, -)$ 的情況下, 而 $F_{ij},\ i, j = 1, 2, 3, 4$ 表示在第 i 種總區控制因子水準組合下, 第 j 間工廠的效應, 每一個 $F_{i(1)}$, $F_{i(2)}$, $F_{i_{(3)}}$ 皆可以視爲一個兩水準因子, 其中在兩間工廠上的水準爲 $(+)$, 在另外兩間工廠上的水準爲 $(-)$; 同理, 每間工廠中皆有四台機器, 也可用三個正交對比來表示機器的主效應, 分別爲 $M_{ij(n)},\ n = 1, 2, 3,\ i, j = 1, 2, 3, 4$, 其中下標 i, j 分別表示在第 i 種總區控制因子 A, B 水準組合中, 第 j 間工廠裡的機器; 另外在每台機器上皆做兩次重複實驗, 可以用一個兩水準隨機誤差因子 R_{ijk} 來表示, 其中 $i, j, k = 1, 2, 3, 4$ 分別表示在第 i 種總區控制因子 A, B 水準組合下, 第 j 間工廠中, 第 k 台機器上所做的重複實驗。。

反應建模法中的第一步, 是要將所有因子皆視爲獨立變數, 也就是將上述的總區控制因子 A, B , 總區區塊因子 $F_{i(n)}$, 子區區塊因子 $M_{ij(n)}$ 與隨機誤差因子 R_{ijk} , 全部視爲反應模型中的獨立變數 $X_A, X_B, X_{F_{i(n)}}, X_{M_{ij(n)}}, X_{R_{ijk}}$, 其中 $i, j, k = 1, 2, 3, 4,\ n = 1, 2, 3$, 並對反應值建立反應模型 $\hat{y}$ 。

舉例來說, 在反應模型中, 獨立變數 $X_{F_{i(1)}}$ 爲 $+1$ 時, 代表在第 F_{i1} 或 F_{i2} 間工廠內做實驗; 而變數 $X_{F_{i(1)}}$ 爲 -1 時, 代表在第 F_{i3} 或 F_{i4} 間工廠內做實驗; 同理, 獨立變數 $X_{F_{i(2)}}$ 爲 $+1$ 時, 代表在第 F_{i1} 或 F_{i4} 間工廠內做實驗; 而獨立變

表 3.3: 在控制因子 $(A,B)=(+,+)$ 的情況下, 使用巢狀編碼描述區塊結構的部分獨立變數

控制因子		區塊因子		獨立變數										
A	B	F	M	X_A	X_B	$X_{F_{1(1)}}$	$X_{F_{1(2)}}$	$X_{F_{1(3)}}$	$X_{M_{11(1)}}$	$X_{M_{11(2)}}$	$X_{M_{11(3)}}$	$X_{M_{12(1)}}$	$X_{M_{12(2)}}$	$X_{M_{12(3)}}$
+	+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
+	+	1	2	1	1	1	1	1	1	−1	−1	0	0	0
+	+	1	3	1	1	1	1	1	−1	−1	1	0	0	0
+	+	1	4	1	1	1	1	1	−1	1	−1	0	0	0
+	+	2	1	1	1	1	−1	−1	0	0	0	1	1	1
+	+	2	2	1	1	1	−1	−1	0	0	0	1	−1	−1
+	+	2	3	1	1	1	−1	−1	0	0	0	−1	−1	1
+	+	2	4	1	1	1	−1	−1	0	0	0	−1	1	−1
+	+	3	1	1	1	−1	−1	1	0	0	0	0	0	0
+	+	3	2	1	1	−1	−1	1	0	0	0	0	0	0
+	+	3	3	1	1	−1	−1	1	0	0	0	0	0	0
+	+	3	4	1	1	−1	−1	1	0	0	0	0	0	0
+	+	4	1	1	1	−1	1	−1	0	0	0	0	0	0
+	+	4	2	1	1	−1	1	−1	0	0	0	0	0	0
+	+	4	3	1	1	−1	1	−1	0	0	0	0	0	0
+	+	4	4	1	1	−1	1	−1	0	0	0	0	0	0

數 $X_{F_{i(2)}}$ 爲 -1 時, 代表在第 F_{i2} 或 F_{i3} 間工廠內做實驗。以表3.3呈現, 總區控制因子 $(A, B) = (+, +)$ 的情況下, 使用巢狀編碼描述區塊結構的情形。因版面有限, 只列出部分獨立變數的編碼情形, 其它獨立變數可以以此類推。

反應模型

$$
\begin{aligned}
\hat{y} =& \hat{\gamma}_0 + \hat{\gamma}_1 X_A + \hat{\gamma}_2 X_B + \hat{\gamma}_3 X_A X_B \\
&+ \hat{\gamma}_4 X_{F_{1(1)}} + \hat{\gamma}_5 X_{F_{1(2)}} + \hat{\gamma}_6 X_{F_{1(3)}} + \hat{\gamma}_7 X_{F_{2(1)}} + \ldots + \hat{\gamma}_9 X_{F_{2(3)}} \\
&+ \hat{\gamma}_{10} X_{F_{3(1)}} + \ldots + \hat{\gamma}_{12} X_{F_{3(3)}} + \hat{\gamma}_{13} X_{F_{4(1)}} + \ldots + \hat{\gamma}_{15} X_{F_{4(3)}} \\
&+ \hat{\gamma}_{16} X_{M_{11(1)}} + \hat{\gamma}_{17} X_{M_{11(2)}} + \hat{\gamma}_{18} X_{M_{11(3)}} + \hat{\gamma}_{19} X_{M_{12(1)}} + \ldots + \hat{\gamma}_{21} X_{M_{12(3)}} \\
&+ \hat{\gamma}_{22} X_{M_{13(1)}} + \ldots + \hat{\gamma}_{63} X_{M_{44(3)}} \\
&+ \hat{\gamma}_{64} X_{R_{111}} + \ldots + \hat{\gamma}_{127} X_{R_{444}}
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

反應建模法中的第二步, 是將反應模型中所有描述區塊因子的獨立變數, 皆視爲獨立隨機變數, 使得我們可以計算由各個區塊因子所造成的平方和, 進而可以計算各個區塊因子所造成的變異。其中, 把區塊因子視爲隨機變數的精神是: 如同本論文第二章所介紹的, 我們假設實驗中的區塊因子 (工廠、機器), 其實是從一個較大的母體中, 隨機抽取出來的, 如今, 我們更進一步的假設, 每一間工廠被抽中的機率是相同的, 以及每間工廠中的每一台機器被抽中的機率也是相同的, 可以想像成工廠與每一間工廠中的機器, 是來自於離散型均勻分配 (discrete uniform distribution)。因此, 當我們決定選取四間工廠來做實驗時, 可以使用三個獨立隨機變數來描述工廠的主效應, 而每一個獨立隨機變數皆爲離散型均勻分配的函數, 所以我們可以求得此獨立隨機變數的分配; 同理可知, 我們也可以算出代表機器與隨機誤差項的獨立隨機變數, 其分配的情形。以下我們列出使用巢狀編碼描述區塊因子時, 各個獨立隨機變數的分配:

$$
P(X_{F_{i(n)}}) = \begin{cases} \frac{1}{8} & \texttt{if } X_{F_{i(n)}} = 1 \\ \frac{3}{4} & \texttt{if } X_{F_{i(n)}} = 0 \\ \frac{1}{8} & \texttt{if } X_{F_{i(n)}} = -1 \end{cases}
\tag{3.2}
$$

$$P(X_{M_{ij(n)}}) = \begin{cases} \frac{1}{32} & \texttt{if } X_{M_{ij(n)}} = 1 \\ \frac{15}{16} & \texttt{if } X_{M_{ij(n)}} = 0 \\ \frac{1}{32} & \texttt{if } X_{M_{ij(n)}} = -1 \end{cases} \tag{3.3}$$

$$P(X_{R_{ijk}}) = \begin{cases} \frac{1}{128} & \texttt{if } X_{R_{ijk}} = 1 \\ \frac{63}{64} & \texttt{if } X_{R_{ijk}} = 0 \\ \frac{1}{128} & \texttt{if } X_{R_{ijk}} = -1 \end{cases} \tag{3.4}$$

$$\texttt{for} \quad i, j, k = 1, 2, 3, 4, \quad n = 1, 2, 3$$

由各個獨立隨機變數的分配 (3.2)–(3.4) 式, 可以求得下列各個獨立隨機變數的期望值、變異數、以及共變異數。

$$\begin{aligned} E(X_{F_{i(n)}}) = E(X_{M_{ij(n)}}) = E(X_{R_{ijk}}) = 0, \\ Var(X_{F_{i(n)}}) = \frac{1}{4}, \quad Var(X_{M_{ij(n)}}) = \frac{1}{16}, \quad Var(X_{R_{ijk}}) = \frac{1}{64}, \\ Cov(X_{F_{i(n)}}, X_{M_{ij(n)}}) = Cov(X_{F_{i(n)}}, X_{R_{ijk}}) = Cov(X_{M_{ij(n)}}, R_{ijk}) = 0 \\ \texttt{for } i, j, k = 1, 2, 3, 4, \texttt{ and } n = 1, 2, 3 \end{aligned} \tag{3.5}$$

在傳統的反應建模法中, 都只使用交叉編碼描述區塊因子, 此時每個隨機變數出現 1 與 -1 的機率爲 $\frac{1}{2}$, 其平均數皆爲 0 , 變異數皆爲 1 ; 然而, 本實驗中, 當我們使用巢狀編碼描述區塊因子時, 各個區塊隨機變數的值當中, 不再只有 1 與 -1 , 也會有 0 的出現, 而且出現 1 與 -1 的機率也不再是 $\frac{1}{2}$, 最重要的是屬於不同層的獨立隨機變數, 會有不同的機率分配, 且這些獨立隨機變數的變異數也不再皆等於 1 , 參見 (3.2)–(3.4) 式。

爲了接下來的計算方便, 我們可以依每個獨立隨機變數所代表不同層的區塊因子, 將所有獨立隨機變數分成三個集合, 並給每個集合一個總稱。

1. 總區區塊隨機變數: $X_F = \{X_{F_{i(n)}},\ i = 1, 2, 3, 4,\ n = 1, 2, 3\}$;
2. 子區區塊隨機變數: $X_M = \{X_{M_{ij(n)}},\ i, j = 1, 2, 3, 4,\ n = 1, 2, 3\}$;
3. 隨機誤差隨機變數: $X_R = \{X_{R_{ijk}},\ i, j, k = 1, 2, 3, 4\}$。

反應建模法中的第三步, 是對反應模型中不同的獨立隨機變數, 做適當的運算, 以得到平均模型, 各個區塊因子所造成的變異之估計, 以及各個區塊因子的變異模型。首先, 我們可以由反應模型 (3.1) 式中, 對所有區塊隨機變數 X_F, X_M, X_R 取平均, 即可得到平均模型, 且由 (3.5) 式知, 所有區塊隨機變數的平均數皆爲 0 , 因此, 平均模型中只剩下控制因子描述其與平均反應值之關係。

$$E_{X_F,X_M,X_R}[\hat{y}_{(A,B)}] = \hat{\gamma}_0 + \hat{\gamma}_1 X_A + \hat{\gamma}_2 X_B + \hat{\gamma}_3 X_A X_B \tag{3.6}$$

由平均模型 (3.6) 式, 我們可以藉由調整控制因子 A, B 的水準, 使反應值達到目標值。

接著我們可以由反應模型 (3.1) 式中, 適當地對各層區塊隨機變數取平均或變異, 得到各個區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係式。對上述區塊隨機變數做運算之前, 因爲在反應模型 (3.1) 式中, 區塊因子是套層於總區控制因子之下, 我們可以利用一個總區控制因子 A, B 的多項式, 表示在給定總區控制因子 A, B 不同的水準組合時, 各個區塊因子對反應值的影響。舉例來說, 隨機變數 $X_{F_{1(n)}}$, $n = 1,2,3$ 是代表在總區控制因子 $(A, B) = (+,+)$ 時, 反應值與總區區塊因子之關聯性, 因此, 我們可以將總區區塊隨機變數 $X_{F_{1(n)}}$, $n = 1,2,3$, 乘上一個代表控制因子水準的多項式 $\frac{1}{4}(1+X_A+X_B+X_A X_B)$, 如果當我們想探討總區控制因子 $(A, B) = (+,+)$ 時, 總區區塊因子所造成的平方和, 可以將 $(X_A, X_B) = (1,1)$ 代入此多項式, 其値會等於 1 , 如果是在總區控制因子 $(A, B) \neq (+,+)$ 的水準時, 可以將 $(X_A, X_B) = (1,-1)$, $(-1,1)$, 或 $(-1,-1)$ 代入此方程式, 其値會等於 0 ; 同理, 我們可以將隨機變數 $X_{F_{2(n)}}$, $n = 1,2,3$ 乘上多項式 $\frac{1}{4}(1+X_A-X_B-X_A X_B)$; 針對其它區塊隨機變數 (包含其它總區區塊隨機變數, 子區區塊隨機變數, 以及隨機誤差隨機變數), 我們皆可以利用此方法, 使得我們可以直接計算出, 在總區控制因子不同水準組合的情況下, 各個區塊因子所造成的平方和。以下我們分成: 總區區塊因子、子區區塊因子與隨機誤差因子, 共三個部分討論。

1. 總區區塊因子平方和與總區控制因子之關係式: 可由反應模型 (3.1) 式, 乘上代表總區控制因子不同水準組合的多項式後, 先對子區區塊隨機變數 X_M, 以及隨機誤差隨機變數 X_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 X_F 取變異而得。

$$
\begin{aligned}
Var_{X_F}\{E_{X_M,X_R}[\hat{y}_{(A,B)}]\} =& \frac{1}{16}(1+X_A+X_B+X_AX_B)(\hat{\gamma}_4^2+\hat{\gamma}_5^2+\hat{\gamma}_6^2) \\
&+\frac{1}{16}(1+X_A-X_B-X_AX_B)(\hat{\gamma}_7^2+\hat{\gamma}_8^2+\hat{\gamma}_9^2) \\
&+\frac{1}{16}(1-X_A+X_B-X_AX_B)(\hat{\gamma}_{10}^2+\hat{\gamma}_{11}^2+\hat{\gamma}_{12}^2) \\
&+\frac{1}{16}(1-X_A-X_B+X_AX_B)(\hat{\gamma}_{13}^2+\hat{\gamma}_{14}^2+\hat{\gamma}_{15}^2)
\end{aligned} \tag{3.7}
$$

2. 子區區塊因子平方和與總區控制因子之關係式: 可由反應模型 (3.1) 式, 乘上代表總區控制因子不同水準組合的多項式後, 先對總區區塊隨機變數 X_F, 以及隨機誤差隨機變數 X_R 取平均, 再對子區區塊隨機變數 X_M 取變異而得。

$$
\begin{aligned}
Var_{X_M}\{E_{X_F,X_R}[\hat{y}_{(A,B)}]\} =& \frac{1}{64}(1+X_A+X_B+X_AX_B)(\hat{\gamma}_{16}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{27}^2) \\
&+\frac{1}{64}(1+X_A-X_B-X_AX_B)(\hat{\gamma}_{28}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{39}^2) \\
&+\frac{1}{64}(1-X_A+X_B-X_AX_B)(\hat{\gamma}_{40}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{51}^2) \\
&+\frac{1}{64}(1-X_A-X_B+X_AX_B)(\hat{\gamma}_{52}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{63}^2)
\end{aligned} \tag{3.8}
$$

3. 隨機誤差因子平方和與總區控制因子之關係式: 可由反應模型 (3.1) 式, 乘上代表總區控制因子不同水準組合的多項式後, 先對總區區塊隨機變數 X_F, 以及子區區塊隨機變數 X_M 取平均, 再對隨機誤差隨機變數 X_R 取變異而得。

$$
\begin{aligned}
Var_{X_R}\{E_{X_F,X_M}[\hat{y}_{(A,B)}]\} =& \frac{1}{256}(1+X_A+X_B+X_AX_B)(\hat{\gamma}_{64}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{79}^2) \\
&+\frac{1}{256}(1+X_A-X_B-X_AX_B)(\hat{\gamma}_{80}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{95}^2) \\
&+\frac{1}{256}(1-X_A+X_B-X_AX_B)(\hat{\gamma}_{96}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{111}^2) \\
&+\frac{1}{256}(1-X_A-X_B+X_AX_B)(\hat{\gamma}_{112}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{127}^2)
\end{aligned} \tag{3.9}
$$

當我們有上述三個區塊因子平方和與總區控制因子之關係式時，我們可以給定在總區控制因子 (A, B) 不同的水準組合，計算出2.1.2小節 (2.9) 式中，各個區塊因子所造成的平方和 $(SS_\tau, SS_{\beta:\tau}, SS_E)$ 。舉例來說，在給定總區控制因子 $(A, B) = (+, +)$ 時，將 $(X_A, X_B) = (1, 1)$ 代入 (3.7)−(3.9) 式，可得

$$Var_{X_F}\{E_{X_M,X_R}[\hat{y}|_{(X_A,X_B)=(1,1)}]\} = \frac{1}{4}(\hat{\gamma}_4^2 + \hat{\gamma}_5^2 + \hat{\gamma}_6^2) \propto SS_{\tau,(A,B)} \tag{3.10}$$

$$Var_{X_M}\{E_{X_F,X_R}[\hat{y}|_{(X_A,X_B)=(1,1)}]\} = \frac{1}{16}(\hat{\gamma}_{16}^2 + \hat{\gamma}_{17}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{27}^2) \propto SS_{\beta:\tau,(A,B)} \tag{3.11}$$

$$Var_{X_R}\{E_{X_F,X_M}[\hat{y}|_{(X_A,X_B)=(1,1)}]\} = \frac{1}{64}(\hat{\gamma}_{64}^2 + \hat{\gamma}_{65}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{79}^2) \propto SS_{E,(A,B)} \tag{3.12}$$

要由區塊因子平方和與總區控制因子之關係式，算出區塊因子平方和時，會差一個常數倍 c ，此常數是所有實驗點的個數，因此，在本例子中 $c = 32$ ，所以，我們可以利用 (3.7)−(3.9) 式，得到各個區塊因子所造成的平方和，並利用2.1.2小節 (2.7)−(2.8) 式，得到各個區塊因子所造成的變異數 $(\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)}$、$\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)}$、$\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(A,B)})$ 之估計；而傳統反應建模法只能得到所有區塊因子所造成的總變異之估計，無法得到各個區塊因子所造成的變異之估計。此外，於3.3節我們會詳細的說明，為何透過 (3.7)−(3.9) 式的運算，可以得到各個區塊因子所造成的平方和。

另一方面，我們也可以由各個區塊因子平方和與總區控制因子之關係式，配合2.1.2小節 (2.7)−(2.8) 式，以下我們列出當 $\dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} \geq 0$，$\dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} \geq 0$ ，所得到各個區塊因子的變異模型；另一方面，如果當 $\dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} < 0$，或 $\dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} < 0$ 時，亦可以依據 (2.7)−(2.8) 式做修正，得到各個區塊因子的變異模型。

1. 總區區塊因子的變異模型

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)} =& \frac{1}{8}\{(\frac{3\times 32}{4})Var_{X_F}[E_{X_M,X_R}(\hat{y}_{(A,B)})] \\ & - (\frac{32}{12})Var_{X_M}[E_{X_F,X_R}(\hat{y}_{(A,B)})]\}\end{aligned} \tag{3.13}$$

由 (3.13) 式，我們可以藉由調整控制因子 A, B 的水準，降低總區區塊因子 (工廠) 的變異。

2. 子區區塊因子的變異模型

$$
\begin{aligned}
\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)} =& \frac{1}{8}\{(\frac{32}{12})Var_{X_M}[E_{X_F,X_R}(\hat{y}_{(A,B)})] \\
& - (\frac{32}{16})Var_{X_R}[E_{X_F,X_M}(\hat{y}_{(A,B)})]\}
\end{aligned} \tag{3.14}
$$

由 (3.14) 式, 我們可以藉由調整控制因子 A, B 的水準, 降低子區區塊因子 (機器) 的變異。

反應建模法中, 是直接針對各個區塊因子所造成的變異數, 建立變異模型, 如 (3.13)−(3.14) 式; 而在第二章所介紹的平均-變異法中, 是先估計出各個區塊因子所造成的變異後, 並對變異數取 ln 後, 再去建立各個區塊因子的變異模型, 如 (2.11)−(2.12) 式。

針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, Chen (2008) 年提出類似的反應建模法, 但其在建立反應模型時, 忽略實驗中的巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子, 然而, 她所提出對反應模型中的獨立隨機變數之運算方式有些許的錯誤, 其作法主要的精神是: 得到反應模型後, 對比所要探討之區塊下層的區塊隨機變數取平均, 再對所要探討之區塊隨機變數取變異, 進而建立各個區塊因子與控制因子之關係式。在她所提出的反應建模法中, 主要有以下兩個問題:

1. 因爲在她的反應建模法中, 只對比所要探討之區塊下層的區塊因子取平均, 會造成她所估計出來的平方和, 並不是眞正各個區塊因子的平方和, 而是由最上層的區塊因子之平方和累加到所關心的區塊, 用符號表示即爲

   $(SS_{\tau,(A,B)})$, $(SS_{\tau,(A,B)} + SS_{\beta:\tau,(A,B)})$, $(SS_{\tau,(A,B)} + SS_{\beta:\tau,(A,B)} + SS_{E,(A,B)})$,

   因此, 如果使用她所提出的反應建模法, 估計不同區塊因子所造成的變異時, 會得到一個不合理的結果: 越下層的區塊因子所造成的變異, 一定比上層區塊因子所造成的變異大 (可以想像成, 子區區塊因子 (機器) 是套層於總區區塊因子 (工廠) 之下, 此時, 機器所造成的變異一定大於工廠所造成的變異)。在我們所提的新版本反應建模法中, 我們可以正確地估計出各個區塊因子所造成的變異大小, 也就是眞正實驗中, 工廠所造成的變異大小, 與機器所造成的變異大小, 沒有一定的大小關係;

2. 此外, 如同本論文第二章所說明, 在她的論文中, 是直接使用各個區塊因子所造成的平方和, 來估計各個區塊因子所造成的變異, 然而由巢狀隨機效應模型的最大概似估計式可知, 各個區塊因子所造成的變異爲各個區塊因子所造成的平方和之函數。

3.1.2 具有子區控制因子之實驗

本小節探討2.1.3小節中, 圖2.5所介紹的具有子區控制因子之實驗。於2.1節中我們已經了解總區區塊因子所造成的變異, 只會受到總區控制因子之影響, 不會受到子區控制因子之影響, 也就是說, 不論有無子區控制因子 C 之存在, 總區區塊因子的變異模型並不會改變, 因此, 對於具有子區區塊因子之實驗, 該如何利用反應建模法, 建立總區區塊因子的變異模型, 請參考3.1.1小節所介紹無子區控制因子之實驗的反應建模法; 而本小節主要探討, 在具有子區控制因子之實驗, 要如何利用反應建模法, 估計子區區塊因子所造成的變異, 以及如何建立子區區塊因子的變異模型。

現在, 我們簡單再次介紹圖2.5具有子區區塊因子之實驗, 此實驗的處理結構中, 有兩個兩水準的總區控制因子 A, B , 以及一個兩水準的子區控制因子 C , 且其爲交叉結構; 而此實驗的區塊結構中, 我們可以發現在總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 的不同水準組合下, 區塊結構中包含了四間工廠, 每間工廠底下有兩台機器, 以及每台機器上兩次的重複實驗點, 也就是在巢狀區塊結構中, 重複實驗點套層於機器下, 機器套層於工廠下, 而工廠套層於總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 不同的水準下。所以建立反應模型時, 我們可以使用交叉編碼描述總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C ; 另一方面, 使用巢狀編碼描述區塊因子, 總區區塊因子包含四間工廠的效應, 我們可以用三個正交對比來表示工廠的主效應, 分別爲 $F_{i(n)}$, $i = 1, 2, \ldots, 8$, $n = 1, 2, 3$, 其中 i 表示在總區控制因子與子區控制因子 $(A, B, C) = (+, +, +), (+, +, -), (+, -, +), (+, -, -), (-, +, +), (-, +, -), (-, -, +), (-, -, -)$ 不同的水準組合的情況下; 同理, 一間工廠內的兩台機器, 也可以用一個兩水準子區區塊因子 M_{ij}, $j = 1, 2, 3, 4$ 來表示在第 i 種控制因子水準組合下, 第 j 間工廠下機器而在一台機器上重複做兩次實

驗, 可以用一個兩水準隨機誤差因子 $R_{ijk},\ k=1,2$ 來表示在第 i 種控制因子水準組合下, 第 j 間工廠中, 第 k 機器上所做的重複實驗。

由上述對於圖 2.5 具有子區控制因子之實驗的介紹可知, 此實驗與 3.1.1 節圖 2.3 無子區控制因子之實驗的差異在於, 兩個實驗的處理結構並不相同, 但其區塊結構是一樣的。然而, 在具有子區控制因子 C 的實驗中, 子區控制因子 C 的效應與子區區塊因子 M_2 混淆在一起時, 我們會把此效應完全歸因於子區控制因子水準改變所造成的, 因此, 此混淆的效應會被視爲固定效應; 另一方面, 在無子區控制因子 C 的實驗中, 如3.1.1節的介紹, 此效應是由子區區塊因子水準改變所造成的, 會被視爲隨機效應。

反應建模法中的第一步, 是要將所有因子皆視爲獨立變數, 也就是將上述的總區控制因子 A, B 、子區控制因子 C 、總區區塊因子 $F_{i(n)}$ 、子區區塊因子 M_{ij} 與隨機誤差因子 R_{ijk} , 全部視爲反應模型中的獨立變數 $X_A, X_B, X_C, X_{F_{i(n)}}, X_{M_{ij}}, X_{R_{ijk}}$, 其中 $i=1,\ldots,8,\ j=1,\ldots,4,\ k=1,2,\ n=1,2,3$, 並對反應值建立反應模型。每個獨立變數的編碼方式, 其精神與3.1.1節相同, 詳請參考表3.3。

反應模型

$$\begin{aligned}\hat{y} =& \hat{\gamma}_0 + \hat{\gamma}_1 X_A + \hat{\gamma}_2 X_B + \hat{\gamma}_3 X_C + \hat{\gamma}_4 X_A X_B \\ &+ \hat{\gamma}_5 X_A X_C + \hat{\gamma}_6 X_B X_C + \hat{\gamma}_7 X_A X_B X_C \\ &+ \hat{\gamma}_8 X_{F_{1(1)}} + \ldots + \hat{\gamma}_{31} X_{F_{8(3)}} \\ &+ \hat{\gamma}_{32} X_{M_{11}} + \ldots + \hat{\gamma}_{63} X_{M_{84}} \\ &+ \hat{\gamma}_{64} X_{R_{111}} + \ldots + \hat{\gamma}_{127} X_{R_{842}} \end{aligned} \tag{3.15}$$

反應建模法中的第二步, 是將反應模型中所有描述區塊因子的獨立變數, 皆視爲獨立隨機變數, 使得我們可以計算由區塊因子所造成的變異。以下我們列出使用巢狀編碼描述區塊因子時, 各個獨立隨機變數的分配, 其詳細的算法以及概念, 請參考3.1.1節。

$$P(X_{F_{i(n)}}) = \begin{cases} \frac{1}{16} & \texttt{if } X_{F_{i(n)}} = 1 \\ \frac{7}{8} & \texttt{if } X_{F_{i(n)}} = 0 \\ \frac{1}{16} & \texttt{if } X_{F_{i(n)}} = -1 \end{cases} \tag{3.16}$$

$$P(X_{M_{ij}}) = \begin{cases} \frac{1}{64} & \texttt{if } X_{M_{ij}} = 1 \\ \frac{31}{32} & \texttt{if } X_{M_{ij}} = 0 \\ \frac{1}{64} & \texttt{if } X_{M_{ij}} = -1 \end{cases} \tag{3.17}$$

$$P(X_{R_{ijk}}) = \begin{cases} \frac{1}{128} & \texttt{if } X_{R_{ijk}} = 1 \\ \frac{63}{64} & \texttt{if } X_{R_{ijk}} = 0 \\ \frac{1}{128} & \texttt{if } X_{R_{ijk}} = -1 \end{cases} \tag{3.18}$$

$$\texttt{for } i = 1, 2, \ldots, 8,\ j = 1, 2, 3, 4,\ k = 1, 2,\ \texttt{and } n = 1, 2, 3$$

由各個獨立隨機變數的分配 (3.16)–(3.18) 式, 可以得到下列各個獨立隨機變數的期望值、變異數、以及共變異數。

$$\begin{aligned} E(X_{F_{i(n)}}) &= E(X_{M_{ij}}) = E(X_{R_{ijk}}) = 0 \\ Var(X_{F_{i(n)}}) &= \frac{1}{8}, \quad Var(X_{M_{ij}}) = \frac{1}{32}, \quad Var(X_{R_{ijk}}) = \frac{1}{64} \\ Cov(X_{F_{i(n)}}, X_{M_{ij(n)}}) &= Cov(X_{F_{i(n)}}, X_{R_{ijk}}) = Cov(X_{M_{ij(n)}}, R_{ijk}) = 0 \\ &\texttt{for } i = 1, 2, \ldots, 8,\ j = 1, 2, 3, 4,\ k = 1, 2,\ \texttt{and } n = 1, 2, 3 \end{aligned} \tag{3.19}$$

爲了接下來計算的方便, 我們可以依每個獨立隨機變數所代表不同層的區塊因子, 將所有獨立隨機變數分成三個集合, 並給每個集合一個總稱。

1. 總區區塊隨機變數: $X_F = \{X_{F_{i(n)}},\ i = 1, \ldots, 8,\ n = 1, 2, 3\}$;
2. 子區區塊隨機變數: $X_M = \{X_{M_{ij}},\ i = 1, \ldots, 8,\ j = 1, \ldots, 4\}$;
3. 隨機誤差隨機變數: $X_R = \{X_{R_{ijk}},\ i = 1, \ldots, 8,\ j = 1, \ldots, 4,\ k = 1, 2\}$。

首先, 我們可以由反應模型 (3.15) 式中, 對所有區塊隨機變數 X_F, X_M, X_R 取平均, 即可得到一個平均模型。

$$\begin{aligned} E_{X_F,X_M,X_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}] =& \hat{\gamma}_0 + \hat{\gamma}_1 X_A + \hat{\gamma}_2 X_B + \hat{\gamma}_3 X_C + \hat{\gamma}_4 X_A X_B \\ &+ \hat{\gamma}_5 X_A X_C + \hat{\gamma}_6 X_B X_C + \hat{\gamma}_7 X_A X_B X_C \end{aligned} \tag{3.20}$$

由平均模型 (3.20) 式, 可以藉由調整控制因子 A, B, C 的水準, 使反應值達到目標值。

接著我們可以由反應模型 (3.15) 式中, 適當的對各層區塊隨機變數取平均或變異, 得到子區區塊因子平方和與控制因子之關係式, 以及隨機誤差因子方和與控制因子之關係式。

1. 子區區塊因子平方和與控制因子之關係式, 可由反應模型 (3.15) 式, 乘上代表所有控制因子不同水準的多項式後, 先對總區區塊隨機變數 X_F , 以及隨機誤差隨機變數 X_R 取平均, 再對子區區塊隨機變數 X_M 取變異而得。

$$\begin{aligned} &Var_{X_M}\{E_{X_F,X_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}]\} \\ =&\frac{1}{256}(1 + X_A + X_B + X_C + X_A X_B + X_A X_C + X_B X_C + X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{32}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{35}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 + X_A + X_B - X_C + X_A X_B - X_A X_C - X_B X_C - X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{36}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{39}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 + X_A - X_B + X_C - X_A X_B + X_A X_C - X_B X_C - X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{40}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{43}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 + X_A - X_B - X_C - X_A X_B - X_A X_C + X_B X_C + X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{44}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{47}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 - X_A + X_B + X_C - X_A X_B - X_A X_C + X_B X_C - X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{48}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{51}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 - X_A + X_B - X_C - X_A X_B + X_A X_C - X_B X_C + X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{52}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{55}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 - X_A - X_B + X_C + X_A X_B - X_A X_C - X_B X_C + X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{56}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{59}^2) \\ =&\frac{1}{256}(1 - X_A - X_B - X_C + X_A X_B + X_A X_C + X_B X_C - X_A X_B X_C)(\hat{\gamma}_{60}^2 + \ldots + \hat{\gamma}_{63}^2) \end{aligned} \tag{3.21}$$

2. 隨機誤差因子平方和與控制因子之關係式, 可由反應模型 (3.15) 式, 乘上代表所有控制因子不同水準的多項式後, 先對總區區塊隨機變數 X_F , 以及子

區區塊隨機變數 X_M 取平均, 再對隨機誤差隨機變數 X_R 取變異而得。

$$\begin{aligned}
&Var_{X_R}\{E_{X_F,X_M}[\hat{y}_{(A,B,C)}]\}\\
=&\frac{1}{512}(1+X_A+X_B+X_C+X_AX_B+X_AX_C+X_BX_C+X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{64}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{71}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1+X_A+X_B-X_C+X_AX_B-X_AX_C-X_BX_C-X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{72}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{79}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1+X_A-X_B+X_C-X_AX_B+X_AX_C-X_BX_C-X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{80}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{87}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1+X_A-X_B-X_C-X_AX_B-X_AX_C+X_BX_C+X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{88}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{95}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1-X_A+X_B+X_C-X_AX_B-X_AX_C+X_BX_C-X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{96}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{103}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1-X_A+X_B-X_C-X_AX_B+X_AX_C-X_BX_C+X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{104}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{111}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1-X_A-X_B+X_C+X_AX_B-X_AX_C-X_BX_C+X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{112}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{119}^2)\\
=&\frac{1}{512}(1-X_A-X_B-X_C+X_AX_B+X_AX_C+X_BX_C-X_AX_BX_C)(\hat{\gamma}_{120}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{127}^2)
\end{aligned} \tag{3.22}$$

當我們有上述兩個區塊因子平方和與控制因子之關係式時, 我們可以給定在總區控制因子與子區控制因子 A,B,C 不同的水準下, 計算出2.1.3小節 (2.15) 式中, 各個區塊因子所造成的平方和。舉例來說, 給定在總區控制因子與子區控制因子 $(A,B,C)=(+,+,+)$ 時, 將 $(X_A,X_B,X_C)=(1,1,1)$ 代入 (3.21) 式與 (3.22) 式, 可得

$$Var_{X_M}[E_{X_F,X_R}(\hat{y}|_{(X_A,X_B,X_C)=(1,1,1)})]=\frac{1}{32}(\hat{\gamma}_{32}^2+\hat{\gamma}_{33}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{35}^2)\propto SS_{\beta:\tau,(A,B,C)} \tag{3.23}$$

$$Var_{X_R}[E_{X_F,X_M}(\hat{y}|_{(X_A,X_B,X_C)=(1,1,1)})]=\frac{1}{64}(\hat{\gamma}_{64}^2+\hat{\gamma}_{65}^2+\ldots+\hat{\gamma}_{71}^2)\propto SS_{E,(A,B,C)} \tag{3.24}$$

要由區塊因子平方和與總區控制因子之關係式, 算出區塊因子平方和時, 會差一個常數倍 c , 此常數是所有實驗點的個數, 因此, 在本例子中 $c=16$, 於3.3節我們會詳細的說明, 為何透過 (3.21)–(3.22) 式的運算, 可以得到各個區塊因子所造成的平方和。所以, 我們可以利用 (3.21)–(3.22) 式, 得到各個區塊因子所

造成的平方和, 並利用2.1.2小節 (2.14) 式, 得到各個區塊因子所造成的變異數 ($\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B,C)}$, $\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)}$, $\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(A,B,C)}$) 之估計; 而傳統反應建模法只能得到所有區塊因子所造成的總變異之估計, 無法得到各個區塊因子所造成的變異之估計。

另一方面, 我們也可以由子區區塊因子平方和與控制因子之關係式, 以及隨機誤差因子平方和與控制因子之關係式, 配合2.1.2小節 (2.14) 式, 以下我們列出, 當 $\dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B,C)} \geq 0$, $\dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} \geq 0$, 所得子區區塊因子的變異模型; 此外, 如果當 $\dot{\sigma}^2_{\tau,(A,B,C)} < 0$, $\dot{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} > 0$ 時, 亦可以依據 (2.14) 式做些修正, 得到子區區塊因子的變異模型。

1. 子區區塊因子的變異模型

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)} =& \frac{1}{2}\{(\frac{16}{4})Var_{X_M}[E_{X_F,X_R}(\hat{y}_{(A,B,C)})] \\ &- (\frac{16}{8})Var_{X_R}[E_{X_F,X_M}(\hat{y}_{(A,B,C)})]\}\end{aligned} \tag{3.25}$$

由 (3.25) 式, 我們可以藉由調整控制因子 A, B, C 的水準, 降低子區區塊因子 (機器) 所造成的變異。

3.1.3 巢狀編碼之一般化概念

由前兩小節中的討論, 我們已經了解針對圖2.3與圖2.5, 兩種具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 當使用巢狀編碼描述區塊結構時, 該如何正確地使用新版本的反應建模法, 建立平均模型, 各個區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係式, 並得到各個區塊因子所造成的變異之估計, 以及建立各個區塊因子的變異模型。現在, 我們考慮將使用此方法的概念, 推廣至一般具有巢狀區塊結構的多階層實驗中。不論實驗的巢狀區塊結構有多少層, 我們皆可由以下四個步驟, 建立平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型。

1. 將所有因子 (包含控制因子與區塊因子) 視為獨立變數, 對反應值配適一個反應模型;

2. 將描述區塊因子的獨立變數視為獨立隨機變數, 並求得各層區塊隨機變數的分配, 此分配會隨著不同的實驗而改變;

3. 對反應模型中的獨立隨機變數作適當的運算 (取平均或變異), 得到平均模型, 以及各區塊因子平方和與控制因子之關係式:

   (a) 平均模型: 對反應模型中的所有區塊隨機變數取平均;

   (b) 區塊因子平方和與控制因子之關係式: 先對反應模型中, 非所關心之其它區塊隨機變數取平均, 再對所關心之區塊隨機變數取變異。

4. 得到各個區塊因子平方和與控制因子之關係式後, 給定控制因子的水準組合, 可算出各個區塊因子所造成的平方和, 將此平方和代入巢狀隨機模型中, 變異數之最大概似估計式, 可得到各個區塊因子所造成的變異之估計; 也可直接將各個區塊因子平方和與控制因子之關係式, 代入巢狀隨機效應模型中變異數之最大概似估計式, 得到各個區塊因子的變異模型。

3.2 交叉編碼

本論文中探討具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 嚴格來說, 此多階層實驗是具有交叉處理結構, 以及巢狀區塊結構, 也就是說在處理結構與區塊結構上, 有著完全不同的結構。在反應建模法中的第一步, 是要將所有因子 (包含處理因子與區塊因子), 皆視爲獨立變數, 對反應值配適反應模型, 此時, 我們可以使用交叉編碼描述處理結構, 以及使用巢狀編碼描述區塊結構, 如同3.1節所介紹的; 然而, 當我們的目的是建立平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型時, 其實我們也可以忽略區塊因子的巢狀結構, 使用交叉編碼來描述區塊結構, 當然, 使用不同的編碼方式描述區塊結構, 會得到不一樣的反應模型, 但我們可藉由適當地對反應模型做運算, 得到與使用巢狀編碼描述區塊結構時, 相同的各個區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係式, 進而得到相同的各個區塊因子的變異模型, 以及各個區塊因子所造成的變異之估計。於3.2.1節與3.2.2節, 分別介紹無子區控制因子之實驗, 與具有子區控制因子之實驗。

從幾何的觀點來看, 各個區塊因子所造成的平方和, 可以想像成觀測值向量投影在不同區塊因子所生成平面上的長度, 而使用不同的編碼方式描述區塊因子所生成的空間, 就像是使用不同的基底生成同一個向量空間; 另一方面, 使用不同編

碼方式所配適的反應模型, 可以想像成是使用不同基底時, 利用不同的線性組合來生成相同的空間。因此, 使用不同的編碼方式來描述區塊結構, 會使得拆解所有區塊因子所造成的總平方和之方式有所不同, 但是並不會改變所有區塊因子所造成的總平方和, 亦不會改變各個區塊因子所造成的平方和, 所以, 當我們忽略區塊因子的巢狀結構, 使用交叉編碼來描述區塊結構時, 我們依然可以利用適當的對反應模型做運算, 得到正確的各個區塊因子所造成平方和。此概念與 Nelder (1965) 提出的隨機化理論 (randomization theory) 中, 區塊結構的自由度性質 (degrees-of-freedom identity) 雷同, 詳見1.3.1節。

3.2.1 無子區控制因子之實驗

本小節針對圖2.3無子區控制因子之實驗探討, 當使用交叉編碼描述其區塊結構時, 該如何正確地使用新版本的反應建模法, 建立平均模型, 與各個區塊因子的變異模型。圖2.3實驗的處理結構中只有總區控制因子 A, B , 沒有子區控制因子, 在總區控制因子 A, B 的不同水準組合下, 具有一個 4/4/2 的巢狀區塊結構, 也就是此巢狀區塊結構中包含了四間工廠, 每間工廠底下有四台機器, 並在每台機器上做兩次重複實驗。此時, 我們忽略區塊結構中的巢狀結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子, 也就是在總區控制因子 A, B 的不同水準組合下, 區塊結構中包含四間工廠、四台機器、以及兩個重複實驗點。現在我們介紹如何使用交叉編碼描述圖2.3實驗的區塊結構, 舉例來說, 四間工廠的主效應, 可以利用三個正交對比 (orthogonal contrasts) 來表示:

$$F_1 = (F_{(1)} + F_{(2)}) - (F_{(3)} + F_{(4)})$$

$$F_2 = (F_{(1)} + F_{(4)}) - (F_{(2)} + F_{(3)})$$

$$F_3 = (F_{(1)} + F_{(3)}) - (F_{(2)} + F_{(4)})$$

其中 $F_{(i)}$, $i = 1, 2, 3, 4$ 表示第 i 間工廠的效應, 每一個 F_1, F_2, F_3 皆可以視爲一個兩水準因子, 在兩間工廠上的水準爲 $(+)$, 在另外兩間工廠上的水準爲 $(-)$; 同理, 四台機器的主效應, 也可用三個正交對比來表示, 分別爲 M_n, $n = 1, 2, 3$; 最後, 兩次重複實驗的主效應, 可以用一個兩水準因子 R 來表示。

反應建模法中的第一步, 是要將所有因子皆視爲獨立變數, 也就是將上述的總區控制因子 A, B , 總區區塊因子 F_n , 子區區塊因子 M_n 與隨機誤差因子 R , 全部視爲反應模型中的獨立變數 $Z_A, Z_B, Z_{F_n}, Z_{M_n}, Z_R$, 其中 $n = 1, 2, 3$, 並對反應值建立反應模型。舉例來說, 獨立變數 Z_{F_1} 爲 $+1$ 時, 代表在第 $F_{(1)}$ 或 $F_{(2)}$ 間工廠內做實驗; 而獨立變數 Z_{F_1} 爲 -1 時, 代表在第 $F_{(3)}$ 或 $F_{(4)}$ 間工廠內做實驗; 同理, 獨立變數 Z_{F_2} 爲 $+1$ 時, 代表在第 $F_{(1)}$ 或 $F_{(4)}$ 間工廠內做實驗; 而獨立變數 Z_{F_2} 爲 -1 時, 代表在第 $F_{(2)}$ 或 $F_{(3)}$ 間工廠內做實驗, 其它獨立變數可以此類推。接著我們以表3.4呈現, 在總區控制因子 $(A, B) = (+, +)$ 的情況下, 使用交叉編碼描述區塊結構的情形。

首先, 將上述所有因子皆視爲獨立變數, 並對反應值建立反應模型, 且反應模型內包含所有因子的主效應, 以及交互作用。反應模型爲

$$
\begin{aligned}
\hat{y} =& f_1(Z_A, Z_B) + f_2(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} + f_3(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} + f_4(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} \\
&+ f_5(Z_A, Z_B) \times Z_{M_1} + f_6(Z_A, Z_B) \times Z_{M_2} + f_7(Z_A, Z_B) \times Z_{M_3} + f_8(Z_A, Z_B) \times Z_R \\
&+ f_9(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_{M_1} + f_{10}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_{M_2} + f_{11}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_{M_3} \\
&+ f_{12}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_R + f_{13}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_{M_1} + f_{14}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_{M_2} \\
&+ f_{15}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_{M_3} + f_{16}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_R + f_{17}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} Z_{M_1} \\
&+ f_{18}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} Z_{M_2} + f_{19}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} Z_{M_3} + f_{20}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} Z_R \\
&+ f_{21}(Z_A, Z_B) \times Z_{M_1} Z_R + f_{22}(Z_A, Z_B) \times Z_{M_2} Z_R + f_{23}(Z_A, Z_B) \times Z_{M_3} Z_R \\
&+ f_{24}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_{M_1} Z_R + f_{25}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_{M_2} Z_R + f_{26}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_1} Z_{M_3} Z_R \\
&+ f_{27}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_{M_1} Z_R + f_{28}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_{M_2} Z_R + f_{29}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_2} Z_{M_3} Z_R \\
&+ f_{30}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} Z_{M_1} Z_R + f_{31}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} M_2 Z_R + f_{32}(Z_A, Z_B) \times Z_{F_3} Z_{M_3} Z_R
\end{aligned}
\tag{3.26}
$$

其中

$$
f_i(Z_A, Z_B) = \hat{\gamma}_{(i)0} + \hat{\gamma}_{(i)1} Z_A + \hat{\gamma}_{(i)2} Z_B + \hat{\gamma}_{(i)3} Z_A Z_B, \ \texttt{for } i = 1, 2, \ldots, 32 \tag{3.27}
$$

表 3.4: 在 $(A,B)=(+,+)$ 的情況下, 使用交叉編碼描述區塊結構的獨立變數

控制因子		區塊因子			獨立變數								
A	B	F	M	R	Z_A	Z_B	Z_{F_1}	Z_{F_2}	Z_{F_3}	Z_{M_1}	Z_{M_2}	Z_{M_3}	Z_R
+	+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
+	+	1	1	2	1	1	1	1	1	1	1	1	−1
+	+	1	2	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	1
+	+	1	2	2	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1
+	+	1	3	1	1	1	1	1	1	−1	1	−1	1
+	+	1	3	2	1	1	1	1	1	−1	1	−1	−1
+	+	1	4	1	1	1	1	1	1	−1	−1	1	1
+	+	1	4	2	1	1	1	1	1	−1	−1	1	−1
+	+	2	1	1	1	1	1	−1	−1	1	1	1	1
+	+	2	1	2	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1
+	+	2	2	1	1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1
+	+	2	2	2	1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	−1
+	+	2	3	1	1	1	1	−1	−1	−1	1	−1	1
+	+	2	3	2	1	1	1	−1	−1	−1	1	−1	−1
+	+	2	4	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1
+	+	2	4	2	1	1	1	−1	−1	−1	−1	1	−1
+	+	3	1	1	1	1	−1	1	−1	1	1	1	1
+	+	3	1	2	1	1	−1	1	−1	1	1	1	−1
+	+	3	2	1	1	1	−1	1	−1	1	−1	−1	1
+	+	3	2	2	1	1	−1	1	−1	1	−1	−1	−1
+	+	3	3	1	1	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1
+	+	3	3	2	1	1	−1	1	−1	−1	1	−1	−1
+	+	3	4	1	1	1	−1	1	−1	−1	−1	1	1
+	+	3	4	2	1	1	−1	1	−1	−1	−1	1	−1
+	+	4	1	1	1	1	−1	−1	1	1	1	1	1
+	+	4	1	2	1	1	−1	−1	1	1	1	1	−1
+	+	4	2	1	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1
+	+	4	2	2	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	−1
+	+	4	3	1	1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	1
+	+	4	3	2	1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	−1
+	+	4	4	1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1
+	+	4	4	2	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	−1

反應建模法中的第二步, 是將反應模型中所有描述區塊因子的獨立變數, 皆視爲獨立隨機變數, 使得我們可以計算各個區塊因子所造成的平方和, 3.1 節中已介紹此步驟的概念與精神, 在此不再重複敍述。此外,3.1.1 節與3.1.2 節中介紹, 當使用巢狀編碼時, 所有獨立隨機變數的變異數, 並不會相同; 然而, 本節中當使用交叉編碼時, 每個隨機變數出現 1 與 -1 的機率爲 $\frac{1}{2}$, 也就是所有獨立隨機變數的分配爲

$$P(Z) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \texttt{if } Z = 1 \\ \frac{1}{2} & \texttt{if } Z = -1 \end{cases} \tag{3.28}$$

由 (3.28) 式可以得到下列各個獨立隨機變數的期望值、變異數:

$$\begin{aligned} E(Z_{F_n}) = E(Z_{M_n}) = E(Z_R) = 0, \\ Var(Z_{F_n}) = Var(Z_{M_n}) = Var(Z_R) = 1, \\ Cov(Z_{F_n}, Z_{M_n}) = Cov(Z_{F_n}, Z_R) = Cov(Z_{M_n}, Z_R) = 0 \\ \texttt{for } n = 1, 2, 3 \end{aligned} \tag{3.29}$$

爲了接下來計算的方便, 我們可以依每個獨立隨機變數所代表不同層的區塊因子, 將所有獨立隨機變數分成三個集合, 並給每個集合一個總稱:

1. 總區區塊隨機變數: $Z_W = \{Z_{F_n},\ n = 1, 2, 3\}$;

2. 子區區塊隨機變數: $Z_S = \{Z_{M_n},\ n = 1, 2, 3\}$;

3. 隨機誤差隨機變數: $Z_R = \{Z_R\}$ 。

反應建模法中的第三步, 是對反應模型中不同的獨立隨機變數, 做適當的運算, 以得到平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型與所造成的變異之估計。首先, 在平均模型中, 只考慮處理結構對反應值造成的影響, 並會忽略所有區塊因子對反應值的影響, 因此, 當忽略巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子時, 完全不會影響平均模型, 所以, 雖然現在我們使用交叉編碼描述區塊因子, 我們依然可以使用3.1.1 節所介紹的運算方式, 得到相同的平均模型。其運算方式爲對反應模型 (3.26) 式中, 所有區塊隨機變數 Z_W, Z_S, Z_R 取平均, 得到一個平均模型, 且由

(3.29) 式知, 所有區塊隨機變數的平均數皆爲 0 , 因此, 平均模型中, 只剩下控制因子描述其與反應值之關聯性。

$$E_{Z_W,Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B)}] = \hat{\gamma}_{(1)0} + \hat{\gamma}_{(1)1}Z_A + \hat{\gamma}_{(1)2}Z_B + \hat{\gamma}_{(1)3}Z_AZ_B \tag{3.30}$$

由平均模型 (3.30) 式知, 我們可以藉由調整控制因子 A, B 的水準, 使平均反應值達到目標值。

當忽略巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子時, 套層於其它區塊因子之下的區塊因子, 其主效應加上其與比其上層之區塊因子的交互作用所生成的向量空間, 會與使用巢狀編碼描述巢狀區塊結構時, 其巢狀區塊因子主效應所生成的空間相同, 因此, 當區塊因子生成的向量空間相同時, 區塊因子所造成的平方和, 其實就是觀測值向量投影在區塊因子所生成空間上的長度, 也會相同。所以, 當忽略實驗中的巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊結構時, 要計算各個區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係式, 如果直接套用, 當使用巢狀編碼描述巢狀區塊結構, 所發展的對於反應模型之運算方式 (3.1 節), 會忽略反應模型中不同區塊因子間交互作用的效應, 也就是會忽略一些巢狀區塊因子的主效應, 造成區塊因子的變異模型與所造成的變異估計錯誤。本節中, 提出一個新的方法, 適當地對反應模型做運算, 得到各個區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係式。以下分總區區塊因子、子區區塊因子、以及隨機誤差因子所造成的平方和做介紹:

1. 因爲總區區塊因子沒有套層於其它區塊因子之下, 因此, 不論使用哪種編碼方式, 皆可由3.1節所介紹的運算方式, 先對反應模型 (3.26) 式中的子區區塊隨機變數 Z_S 與隨機誤差隨機變數 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 取變異, 得到總區區塊因子平方和與控制因子之關係式:

$$\begin{aligned}
&Var_{Z_W}\{E_{Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B)}]\} \\
&\quad =Var_{Z_W}[f_1(Z_A,Z_B) + f_2(Z_A,Z_B)\times Z_{F_1} + f_3(Z_A,Z_B)\times Z_{F_2} + f_4(Z_A,Z_B)\times Z_{F_3}] \\
&\quad =f_2(Z_A,Z_B)^2 + f_3(Z_A,Z_B)^2 + f_4(Z_A,Z_B)^2 \\
&\quad =(\hat{\gamma}_{(2)0} + \hat{\gamma}_{(2)1}Z_A + \hat{\gamma}_{(2)2}Z_B + \hat{\gamma}_{(2)3}Z_AZ_B)^2 \\
&\qquad + (\hat{\gamma}_{(3)0} + \hat{\gamma}_{(3)1}Z_A + \hat{\gamma}_{(3)2}Z_B + \hat{\gamma}_{(3)3}Z_AZ_B)^2 \\
&\qquad + (\hat{\gamma}_{(4)0} + \hat{\gamma}_{(4)1}Z_A + \hat{\gamma}_{(4)2}Z_B + \hat{\gamma}_{(4)3}Z_AZ_B)^2
\end{aligned} \tag{3.31}$$

2. 因爲子區區塊因子套層於總區區塊因子之下, 因此, 當忽略巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子時, 眞正子區區塊因子主效應, 包含了反應模型 (3.26) 式中, 子區區塊因子的主效應, 以及子區區塊因子與總區區塊因子之交互作用, 所以, 我們可由反應模型 (3.26) 式, 先對隨機誤差隨機變數 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 與子區區塊隨機變數 Z_S 取變異, 並減去先對反應模型 (3.26) 式的子區區塊隨機變數 Z_S 與 隨機誤差隨機變數 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 取變異, 得到子區區塊因子平方和與控制因子之關係式:

$$
\begin{aligned}
&Var_{Z_W,Z_S}\{E_{Z_R}[\hat{y}_{(A,B)})]\} - Var_{Z_W}\{E_{Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B)}]\} \\
&\quad = f_5(Z_A,Z_B)^2 + f_6(Z_A,Z_B)^2 + f_7(Z_A,Z_B)^2 + f_9(Z_A,Z_B)^2 \\
&\qquad + f_{10}(Z_A,Z_B)^2 + f_{11}(Z_A,Z_B)^2 + f_{13}(Z_A,Z_B)^2 + f_{14}(Z_A,Z_B)^2 \\
&\qquad + f_{15}(Z_A,Z_B)^2 + f_{17}(Z_A,Z_B)^2 + f_{18}(Z_A,Z_B)^2 + f_{19}(Z_A,Z_B)^2
\end{aligned} \tag{3.32}
$$

上述運算方法中, 相減的概念其實是來自於, 子區區塊因子所造成的平方和, 等於扣掉隨機誤差因子所造成的平方和, 減去扣掉隨機誤差因子與子區區塊因子所造成的平方和, 以符號表示 (3.23) 式, 其實就是計算

$$[(SS_{\tau,(A,B)} + SS_{\beta:\tau,(A,B)}) - SS_{\tau,(A,B)}] = SS_{\beta:\tau,(A,B)},$$

3. 因爲隨機誤差因子套層於子區區塊因子之下, 因此, 當忽略巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子時, 眞正隨機誤差因子的主效應, 包含了反應模型 (3.26) 式中, 隨機誤差因子的主效應, 隨機誤差因子與總區區塊因子之交互作用, 隨機誤差因子與子區區塊因子之交互作用, 隨機誤差因子與子區區塊因子與總區區塊因子之交互作用, 所以, 我們可由反應模型 (3.26) 式, 對所有區塊隨機變數 Z_W, Z_S, Z_R 取變異, 並減去先對反應模型 (3.26) 式的隨機誤差隨機變數 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 與子區區塊隨

機變數 Z_S 取變異, 得到隨機誤差因子平方和與控制因子之關係式:

$$\begin{aligned}
&Var_{Z_W,Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B)}] - Var_{Z_W,Z_S}\{E_{Z_R}[y_{(\hat{A},B)}]\} \\
&\quad = f_8(Z_A,Z_B)^2 + f_{12}(Z_A,Z_B)^2 + f_{16}(Z_A,Z_B)^2 + f_{20}(Z_A,Z_B)^2 \\
&\qquad + f_{21}(Z_A,Z_B)^2 + f_{22}(Z_A,Z_B)^2 + f_{23}(Z_A,Z_B)^2 + f_{24}(Z_A,Z_B)^2 \\
&\qquad + f_{25}(Z_A,Z_B)^2 + f_{26}(Z_A,Z_B)^2 + f_{27}(Z_A,Z_B)^2 + f_{28}(Z_A,Z_B)^2 \\
&\qquad + f_{29}(Z_A,Z_B)^2 + f_{30}(Z_A,Z_B)^2 + f_{31}(Z_A,Z_B)^2 + f_{32}(Z_A,Z_B)^2
\end{aligned} \tag{3.33}$$

上述運算方法中, 相減的概念其實是來自於, 隨機誤差因子所造成的平方和, 等於所有區塊因子所造成的平方和, 減去扣掉隨機誤差因子所造成的平方和, 以符號表示 (3.33) 式, 其是就是計算

$$[(SS_{\tau,(A,B)} + SS_{\beta:\tau,(A,B)} + SS_{E,(A,B)}) - (SS_{\tau,(A,B)} + SS_{\beta:\tau,(A,B)})] = SS_{E,(A,B)}$$

得到各個區塊因子平方和與控制因子關係式後, 我們考慮同3.1.1小節中, 先給定在總區控制因子 $(A,B) = (+,+)$ 的情況下, 將 $(Z_A,Z_B) = (1,1)$ 代入 (3.31)–(3.33) 式中, 並由上述的區塊因子平方和與控制因子之關係式, 算出 (2.9) 式中各個區塊因子的平方和

$$Var_{Z_W}[E_{Z_S,Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B)=(1,1)})] \propto SS_{\tau,(A,B)} \tag{3.34}$$

$$Var_{Z_W,Z_S}[E_{Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B)=(1,1)})] - Var_{Z_W}[E_{Z_S,Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B)=(1,1)})] \propto SS_{\beta:\tau,(A,B)} \tag{3.35}$$

$$Var_{Z_W,Z_S,Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B)=(1,1)}) - Var_{Z_W,Z_S}[E_{Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B)=(1,1)})] \propto SS_{E,(A,B)} \tag{3.36}$$

由區塊因子平方和與控制因子之關係式, 算出區塊因子平方和時, 會差一個常數倍 c , 此常數是在總區控制因子 A,B 每一個水準組合下所有實驗點的個數, 因此, 在本例子中 $c = 32$, 於3.3節我們會詳細的說明, 爲何透過 (3.31)–(3.33) 式的運算, 可以得到各個區塊因子所造成的平方和。所以, 我們可以利用 (3.31)–(3.33) 式, 得到各個區塊因子平方和, 並利用2.1.2小節 (2.7) 式與 (2.8) 式, 得到各個區

塊因子所造成的變異之估計 $(\hat{\sigma}^2_{\tau,(A,B)}, \hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)}, \hat{\sigma}^2_{\epsilon,(A,B)})$ 之估計, 這是傳統反應建模法無法達成的。

3.2.2 具有子區控制因子之實驗

本小節延續3.1.2小節, 探討具有子區控制因子之實驗。在2.1節中已經了解, 總區區塊因子所造成的變異只會受到總區控制因子之影響, 不會受到子區控制因子之影響, 也就是說, 總區區塊因子所造成的變異之計算與有無子區控制因子無關。於3.1.2節中已經探討針對是否具有子區控制因子之實驗, 使用反應建模法的差異; 另一方面, 當忽略實驗的巢狀區塊結構, 使用交叉編碼描述區塊因子時, 使用反應建模法的做法, 也已於3.2.1節介紹。也就是說, 本小節的方法是結合了3.1.2節與3.2.1節的概念, 因此, 本小節在介紹針對具有子區控制因子之實驗, 忽略實驗的巢狀區塊結構, 使用交叉編碼描述區塊因子, 該如何利用反應建模法, 估計子區區塊因子所造成的變異, 以及如何建立控制因子對子區區塊因子的變異模型。以下我們主要介紹反應模型法的分析過程, 而其做法背後的精神, 請參考3.1.2節與3.2.1節。

針對圖2.1具有子區控制因子之實驗, 其處理結構中有總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C , 在總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 的不同水準組合下, 具有一個 $4/2/2$ 的巢狀區塊結構, 也就是此巢狀區塊結構中包含了四間工廠, 每間工廠底下有兩台機器, 並在每台機器上做兩次重複實驗。此時, 我們忽略區塊結構中的巢狀結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子, 也就是在總區控制因子 A, B 與子區控制因子 C 的不同水準組合下, 區塊結構中包含四間工廠、兩台機器、以及兩個重複實驗點。現在我們介紹如何使用交叉編碼描述圖2.1實驗的區塊結構, 舉例來說, 四間工廠的主效應, 可以利用三個正交對比來表示, 分別為 F_1, F_2, F_3, 而每一個 F_n, $n = 1, 2, 3$ 皆可以視為一個兩水準因子, 在兩間工廠上的水準為 $(+)$, 在另外兩間工廠上的水準為 $(-)$; 同理, 兩台機器的主效應, 可以用一個兩水準子區區塊因子 M 來表示; 而兩次重複實驗, 可以用一個兩水準隨機誤差因子 R 來表示。

反應建模法中的第一步, 是要將所有因子皆視爲獨立變數, 也就是將上述的總區控制因子 A, B , 子區控制因子 C , 總區區塊因子 F_n , 子區區塊因子 M 與隨機誤差因子 R , 全部視爲反應模型中的獨立變數 $Z_A, Z_B, Z_{F_n}, Z_M, Z_R,\ n=1,2,3,$ 並對反應值建立反應模型。其中, 各個獨立變數的編碼情形, 如同表3.4所介紹。

首先, 將上述所有因子皆視爲獨立變數, 並對反應值建立反應模型, 且反應模型內包含所有因子的主效應, 以及交互作用。反應模型爲

$$\begin{aligned}\hat{y} =& f_1(Z_A,Z_B,Z_C) + f_2(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F1} + f_3(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F2}\\ &+ f_4(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F3} + f_5(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_M + f_6(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_R\\ &+ f_7(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F1}Z_M + f_8(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F1}Z_R + f_9(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F2}Z_M\\ &+ f_{10}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F2}Z_R + f_{11}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F3}Z_M\\ &+ f_{12}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F3}Z_R + f_{13}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_M Z_R\\ &+ f_{14}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F1}Z_M Z_R + f_{15}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F2}Z_M Z_R\\ &+ f_{16}(Z_A,Z_B,Z_C)\times Z_{F3}Z_M Z_R \end{aligned}\tag{3.37}$$

其中

$$\begin{aligned}f_i(Z_A,Z_B,Z_C) =& \hat{\gamma}_{(i)0} + \hat{\gamma}_{(i)1}Z_A + \hat{\gamma}_{(i)2}Z_B + \hat{\gamma}_{(i)3}Z_C + \hat{\gamma}_{(i)4}Z_AZ_B\\ &+ \hat{\gamma}_{(i)5}Z_AZ_C + \hat{\gamma}_{(i)6}Z_BZ_C + \hat{\gamma}_{(i)7}Z_AZ_BZ_C, \quad \texttt{for } i=1,2,\ldots,16\end{aligned}\tag{3.38}$$

反應建模法中的第二步, 是將反應模型中所有描述區塊因子的獨立變數, 皆視爲獨立隨機變數, 此時所有獨立隨機變數的分配如同3.2.1節之介紹爲

$$P(Z) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \texttt{if } Z = 1 \\ \frac{1}{2} & \texttt{if } Z = -1 \end{cases}\tag{3.39}$$

也就是說, 當忽略巢狀區塊結構, 使用交叉編碼描述區塊結構時, 所有描述區塊的獨立隨機變數, 其分配不隨著處理結構或區塊結構改變而改變。由 (3.39) 式可以

得到下列各個獨立隨機變數的期望值、變異數:

$$
\begin{aligned}
E(Z_{F_n}) = E(Z_M) = E(Z_R) = 0, \\
Var(Z_{F_n}) = Var(Z_M) = Var(Z_R) = 1, \\
Cov(Z_{F_n}, Z_M) = Cov(Z_{F_n}, Z_R) = Cov(Z_M, Z_R) = 0 \\
\texttt{for}\ n = 1, 2, 3
\end{aligned}
\tag{3.40}
$$

為了接下來計算的方便, 我們可以依每個獨立隨機變數所代表不同層的區塊因子, 將所有獨立隨機變數分成三個集合, 並給每個集合一個總稱:

1. 總區區塊隨機變數: $Z_W = \{Z_{F_n}, n = 1, 2, 3\}$;
2. 子區區塊隨機變數: $Z_S = \{Z_M\}$;
3. 隨機誤差隨機變數: $Z_R = \{Z_R\}$ 。

首先, 我們可以由反應模型 (3.37) 式中, 對所有區塊隨機變數 Z_W, Z_S, Z_R 取平均, 即可得到一個平均模型。

$$
\begin{aligned}
E_{Z_W,Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}] = & \hat{\gamma}_{(1)0} + \hat{\gamma}_{(1)1} Z_A + \hat{\gamma}_{(1)2} Z_B + \hat{\gamma}_{(1)3} Z_C + \hat{\gamma}_{(1)4} Z_A Z_B \\
& + \hat{\gamma}_{(1)5} Z_A Z_C + \hat{\gamma}_{(1)6} Z_B Z_C + \hat{\gamma}_{(1)7} Z_A Z_B Z_C
\end{aligned}
\tag{3.41}
$$

由平均模型 (3.41) 式, 可以藉由調整控制因子 A, B, C 的水準, 使反應值達到目標值。

接著我們可以由反應模型 (3.37) 式中, 適當的對各層區塊隨機變數取平均或變異, 得到子區區塊因子平方和與控制因子之關係式, 以及隨機誤差因子方和與控制因子之關係式。

1. 子區區塊因子平方和與控制因子之關係式, 可由反應模型 (3.37) 式, 先對隨機誤差隨機變數 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 與子區區塊隨機變數 Z_S 取變異, 並減去先對反應模型 (3.37) 式的子區區塊隨機變數 Z_S 與

隨機誤差隨機變數 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 而得。

$$\begin{aligned}&Var_{Z_W,Z_S}\{E_{Z_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}]\} - Var_{Z_W}\{E_{Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}]\}\\ &=f_5(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_7(Z_A,Z_B,Z_C)^2\\ &\quad + f_9(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_{11}(Z_A,Z_B,Z_C)^2\end{aligned} \tag{3.42}$$

2. 誤差隨機項平方和與控制因子之關係式, 可由反應模型 (3.37) 式, 對所有區塊隨機變數 Z_W, Z_S, Z_R 取變異, 並減去先對反應模型 (3.37) 式的隨機誤差隨機便處 Z_R 取平均, 再對總區區塊隨機變數 Z_W 與子區區塊隨機變數 Z_S 取變異而得。

$$\begin{aligned}&Var_{Z_W,Z_S,Z_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}] - Var_{Z_W,Z_S}\{E_{Z_R}[\hat{y}_{(A,B,C)}]\}\\ &=f_6(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_8(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_{10}(Z_A,Z_B,Z_C)^2\\ &\quad + f_{12}(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_{13}(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_{14}(Z_A,Z_B,Z_C)^2\\ &\quad + f_{15}(Z_A,Z_B,Z_C)^2 + f_{16}(Z_A,Z_B,Z_C)^2\end{aligned} \tag{3.43}$$

當我們有上述兩個區塊因子平方和與控制因子之關係式時, 我們可以給定在總區控制因子與子區控制因子 A, B, C 不同的水準下, 計算出2.1.3小節 (2.15) 式中, 各個區塊因子的平方和。舉例來說, 給定在總區控制因子與子區控制因子 $(A,B,C) = (+,+,+)$ 時, 將 $(Z_A, Z_B, Z_C) = (1,1,1)$ 代入 (3.42) 式與 (3.43) 式, 可得

$$Var_{Z_W,Z_S}[E_{Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B,Z_C)=(1,1,1)})] - Var_{Z_W}[E_{Z_S,Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B,Z_C)=(1,1,1)})] \propto SS_{\beta:\tau,(A,B,C)} \tag{3.44}$$

$$Var_{Z_W,Z_S,Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B,Z_C)=(1,1,1)}) - Var_{Z_W,Z_S}[E_{Z_R}(\hat{y}|_{(Z_A,Z_B,Z_C)=(1,1,1)})] \propto SS_{E,(A,B,C)} \tag{3.45}$$

要由區塊因子平方和與控制因子之關係式, 算出區塊因子平方和時, 會差一個常數倍 c , 此常數是所有實驗點的個數, 因此, 在本例子中 $c = 16$ 。因此, 我們可以利用 (3.42) 式與 (3.43) 式, 得到子區區塊因子平方和與隨機誤差的平方和, 並利用 (2.7) 式與 (2.8) 式, 得到其變異數 ($\hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,C)}$, $\hat{\sigma}^2_{\epsilon,(A,B,C)}$) 之估計, 這是傳統反應建模法無法達成的。

3.2.3 交叉編碼之一般化概念

由前兩小節中的討論, 我們已經了解針對圖 2.3 與圖 2.5, 兩種具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 當使用巢狀編碼描述區塊結構時, 該如何正確地使用新版本的反應建模法, 建立平均模型, 各個區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係式, 並得到各個區塊因子所造成的變異之估計, 以及建立各個區塊因子的變異模型。現在, 我們考慮將使用此方法的概念, 推廣至一般具有巢狀區塊結構的多階層實驗中。不論實驗的巢狀區塊結構有多少層, 我們皆可由以下四個步驟, 建立平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型。

1. 將所有因子 (包含控制因子與區塊因子) 視為獨立變數, 對反應值配適一個反應模型;
2. 將描述區塊因子的獨立變數視為獨立隨機變數, 其中所有隨機變數的分配皆相同, 如 (3.28) 式;
3. 對反應模型中的獨立隨機變數作適當的運算 (取平均或變異), 得到平均模型, 以及各區塊因子平方和與控制因子之關係式;
   (a) 平均模型: 對反應模型中的所有區塊隨機變數取平均。
   (b) 區塊因子平方和與控制因子之關係式: 先對反應模型中, 比所關心之下層區塊隨機變數平均, 再對其他區塊隨機變數取變異, 並減去對反應模型中, 比所關心之下層區塊隨機變數與所關心之隨機變數取平均, 再對其它區塊隨機變數取變異而得。
4. 得到各個區塊因子平方和與控制因子之關係式後, 給定控制因子的水準組合, 可算出各個區塊因子所造成的平方和, 將此平方和代入巢狀隨機模型中, 變異數之最大概似估計式, 可得到各個區塊因子所造成的變異之估計; 也可直接將各個區塊因子平方和與控制因子之關係式, 代入巢狀隨機效應模型中變異數之最大概似估計式, 得到各個區塊因子的變異模型。

3.3 巢狀編碼與交叉編碼之比較

3.1 節與 3.2 節分別介紹針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 當正確地使用巢狀編碼描述巢狀區塊結構, 或者忽略巢狀區塊結構使用交叉編碼時 ,如何利用反應建模法, 建立平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型; 另一方面, 我們亦可由3.1.3節與3.2.3節, 巢狀編碼與交叉編碼一般化概念的建模四步驟中發現, 使用兩種不同編碼方式來描述區塊因子時, 反應建模法過程中的差異在於, 針對各個區塊因子所造成的平方和之計算方式不同, 其餘的步驟皆相同。以下我們分兩部分探討, 針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 使用巢狀編碼或交叉編碼, 描述巢狀區塊結構時, 使用反應建模法的優缺點。

首先, 我們先來探討使用巢狀編碼描述巢狀區塊結因子時, 使用反應建模法的優缺點。

其缺點會有以下兩點:

1. 使得控制因子與區塊因子的交互作用, 隱藏在反應模型 (3.1) 式內的巢狀獨立變數中, 因此, 在建立各個區塊因子與控制因子的關係式時, 如 (3.7)−(3.9) 式, 我們需要將反應模型乘上一個代表控制因子不同水準組合的多項式, 例如 $\frac{1}{4}(1 + X_A + X_B + X_A X_B)$, 來連結區塊因子所造成的平方和與控制因子之關係, 達到可以只用一個區塊因子平方和與控制因子之關係式, 描述在不同控制因子的水準組合時, 區塊因子所造成的平方和之變化, 這樣才能直接由各個區塊因子與控制因子的關係式中, 計算出在不同的控制因子水準組合下, 各個區塊因子所造成的平方和大小, 進而計算各個區塊因子所造成的變異;

2. 另一方面, 建立反應模型後, 我們會將反應模型中, 描述區塊因子的獨立變數, 皆視爲隨機變數, 此時, 根據 (3.5) 式顯示, 在同一層的區塊因子, 其獨立隨機變數會有相同的變異數, 但是在不同層的區塊因子, 其獨立隨機變數會有不一樣的變異數, 也就是說, 針對不同層的區塊獨立隨機變數, 我們皆必須計算其變異數大小, 而且, 當實驗的區塊結構改變, 或者處理結構改變,

每層區塊隨機獨立變數的變異數也會隨之改變, 舉例來說, 於3.1節中所介紹的無子區控制因子之實驗, 由 (3.2) 式知, 其總區獨立隨機變數的變異數為 $\frac{1}{4}$, 此總區獨立隨機變數的分配; 而3.2節所介紹的有子區控制因子之實驗, 由 (3.16) 式知, 其總區獨立隨機變數的變異數為 $\frac{1}{8}$, 此總區獨立隨機變數的分配。因此, 使用巢狀編碼描述區塊因子時, 在計算上相對於使用交叉編碼要繁瑣。

其優點為:

1. 由反應模型建立各個區塊因子平方和與控制因子之關係式時, 其運算方式較為直觀, 舉例來說, 以3.1節所介紹的無子區控制因子之實驗為例, 在計算子區區塊因子所造成的平方和, 根據 (3.8) 式可知, 我們可由反應模型中, 先對非子區區塊隨機變數 (總區區塊隨機變數與隨機誤差隨機變數) 取平均, 再對子區區塊隨機變數取變異而得, 不需再經過其它的運算。此種較直觀的計算方式, 可推廣至每個區塊因子, 詳細關於其它區塊因子所造成的平方和之計算方式, 請參見3.1節。

以下探討, 如果在具有巢狀區塊結構的多階層實驗中, 忽略其巢狀區塊結構, 使用交叉編碼來描述區塊因子的優缺點。

其缺點為:

1. 由反應模型建立各個區塊因子平方和與控制因子之關係式時, 其運算方式較不直觀, 舉例來說, 在計算子區區塊因子所造成的平方和時, 根據 (3.31) 式, 我們必須對反應模型做兩次的運算, 第一次為先對反應模型中的隨機誤差隨機變數取平均, 再對總區區塊隨機變數與子區區塊隨機變數取變異, 第二次為先對反應模型中的子區區塊隨機變數與隨機誤差隨機變數取平均, 再對總區區塊隨機變數取平均; 再將第一次所得到的值與第二次所得到的值相減而得。此種較為複雜的計算方式, 亦存在計算其它區塊因子所造成的平方和時 (參見3.2節)。

其優點有以下兩點:

1. 可直接由反應模型中, 了解控制因子與區塊因子的交互作用, 因此, 由反應模型得到區塊因子平方和與控制因子之關係式時, 根據 (3.30) 式, 此時我們不需要在反應模型中乘上一個控制因子的多項式, 可直接代入控制因子不同水準的值, 計算各個區塊因子所造成的平方和;

2. 另一方面, 建立反應模型後, 我們將反應模型中, 描述區塊因子的獨立變數皆視爲隨機變數時, 根據 (3.28) 式, 對於所有區塊因子, 其獨立隨機變數會有相同的變異數, 而且不論實驗中的區塊結構或處理結構如何改變, 其變異數皆爲 1 , 也就是所有描述區塊結構的獨立隨機變數, 皆有相同的分配, 故在計算上會較使用巢狀編碼簡單。

由上述討論可以看出, 針對具有巢狀區塊結構的實驗, 使用反應建模法時, 不論利用巢狀編碼或交叉編碼來描述區塊因子, 皆有其優缺點。

3.4 平均-變異法與反應建模法之關聯性

針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 本論文介紹了兩種不同的建模方式, 分別爲第二章所介紹的新版本平均-變異法, 以及本章前兩節所介紹的新版本反應建模法, 使用此兩種方法, 皆可建立平均模型, 估計各個區塊因子所造成的變異, 以及建立各個區塊因子的變異模型。其中, 兩種方法所建立之區塊因子的變異模型有些差異, 首先, 平均-變異法是先估計出在不同控制水準組合時, 各個區塊因子所造成的變異, 並對其取 log , 再建立區塊因子的變異模型; 而反應建模法是直接對各個區塊因子所造成的變異建立模型, 也就是反應建模法所得到支區塊因子的變異模型, 其反應值爲區塊因子所造成的變異, 並不是區塊因子所造成的變異取 log 。然而, 針對同一組數據, 使用這兩種不同的方法, 是否可以得到相同的區塊因子所造成的變異估計呢? 或者, 使用這兩種不同的方法, 會不會造成區塊因子的變異模型中, 所建議之最佳控制因子水準有所不同呢? 在回答此問題之前, 我們可以先了解兩種方法在計算各個區塊因子所造成的變異時, 其實都是先透過計算各個區塊因子所造成的平方和, 進而代入1.3節所介紹的巢狀隨機效應模型中, 各個區塊因子變異數之最大概似估計式, 如表1.6。也就是說, 針對同一個實驗, 使用兩種不同

的方法, 如果可以算出相同區塊因子所造成的平方和, 那麼估計區塊因子所造成的變異就會相同。接著, 我們來探討兩種建模方法計算上之差異性:

1. 平均-變異法是直接利用平方和公式, 也就是直接對觀測值做運算, 得到各個區塊因子所造成的平方和;

2. 反應建模法是先透過對觀測值建立反應模型, 並對反應模型做適當的運算, 得到各個區塊因子所造成的平方和。

最後, 本節中我們假設兩種具有簡單區塊結構的實驗, 來說明平均-變異法與反應建模法, 是如何透過不同的計算方式, 得到相同的平方和。

我們先考慮一個簡單的僅具有一個區塊因子的實驗, 此實驗中只有一個兩水準區塊因子 A , 可以想像成此實驗總共有兩個觀測值, 分別來自於在兩台不同的機器上做實驗, 如表3.5。

表 3.5: 一個區塊因子的實驗

A	觀測值
$+$	y_1
$-$	y_2

我們可以用兩種不同的算法, 估計出此區塊因子 A 所造成的平方和:

1. 直接利用平方和 SS_T 的公式可得:

$$\begin{aligned} SS_T =& \sum_{i=1}^{2}(y_i-\bar{y})^2 = [y_1-(\frac{y_1+y_2}{2})]^2+[y_2-(\frac{y_1+y_2}{2})]^2 \\ =& \frac{1}{4}[(y_1-y_2)^2+(y_2-y_1)^2] = \frac{1}{2}(y_1-y_2)^2 \end{aligned} \tag{3.46}$$

2. 也可以先將區塊因子 A 視爲獨立變數, 對反應值配適一個反應模型

$$\hat{y} = \hat{\gamma}_0 + \hat{\gamma}_1 X_A \tag{3.47}$$

再將獨立變數 X_A 視為獨立隨機變數, 且此隨機變數 X_A 出現 1 與 -1 的機率皆為 $\frac{1}{2}$, 因此, 其平均為 0 且變異數為 1 。由3.2節所發展的反應建模法得知, 我們可以對反應模型中的隨機變數 X_A 取變異, 得到區塊因子 A 所造成的平方和

$$Var_{X_A}(\hat{y}) = \hat{\gamma}_1^2 = \frac{1}{4}(y_1 - y_2)^2 \tag{3.48}$$

其中, 由最小平方法的公式 $\hat{\gamma} = (X^T X)^{-1} X^T y$ 可得

$$\hat{\gamma}_0 = \frac{1}{2}(y_1 + y_2), \quad \hat{\gamma}_1 = \frac{1}{2}(y_1 - y_2)$$

由 (3.43) 式與 (3.45) 式可知, 我們可以證明在具有一個區塊因子的實驗中, 可以使用反應建模法得到, 正比於各個因子所造成的平方和的值, 由公式表示即

$$Var_{X_A}(\hat{y}) \propto SS_T \tag{3.49}$$

此外, 我們也可以由 (3.43) 式與 (3.45) 式發現, 兩種方法差異的比例為, 實驗中觀測值的總數, 即差一個常數倍 $c_1 = 2$ 。

接下來我們探討一個具有巢狀區塊結構的簡單實驗, 實驗中有兩個兩水準區塊因子 F, M, 且區塊因子 M 套層於區塊因子 F 之下, 即 F 為總區區塊因子, M 為子區區塊因子, 可以想像成此實驗中總共有四個觀測值, 分別來自兩間不同的工廠, 每間工廠中皆有兩台不同的機器, 如表3.6。

表 3.6: 兩個區塊因子的實驗

F	M	觀測值
$+$	$+$	y_{11}
$+$	$-$	y_{12}
$-$	$+$	y_{21}
$-$	$-$	y_{22}

我們一樣可以用兩種算法, 將總平方和分解為區塊因子 F 所造成的平方和 SS_F , 以及區塊因子 M 所造成的平方和 $SS_{M:F}$:

1. 由總平方和 SS_T 的分解公式

$$\begin{aligned} SS_T &= \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}(y_{ij}-\bar{y}_{..}) = 2\sum_{i=1}^{2}(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})^2+\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}(y_{ij}-\bar{y}_{i.})^2 \\ &= SS_F + SS_{M:F} \end{aligned} \tag{3.50}$$

其中

$$\begin{aligned} SS_F =& 2\sum_{i=1}^{2}(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})^2 = 2[(\frac{y_{11}+y_{12}}{2}-\bar{y}_{..})^2+(\frac{y_{21}+y_{22}}{2}-\bar{y}_{..})^2] \\ =& 2[(\frac{(y_{11}+y_{12})-(y_{21}+y_{22})}{4})^2+(\frac{(y_{21}+y_{22})-(y_{11}+y_{12})}{4})^2] \\ =& \frac{1}{4}[(y_{11}+y_{12})-(y_{21}+y_{22})]^2 \end{aligned} \tag{3.51}$$

$$\begin{aligned} SS_{M:F} =& \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}(y_{ij}-\bar{y}_{i.})^2 = \sum_{i=1}^{2}(y_{i1}-\bar{y}_{i.})^2+\sum_{i=2}^{2}(y_{i2}-\bar{y}_{i.})^2 \\ =& (y_{11}-\frac{y_{11}+y_{12}}{2})^2+(y_{21}-\frac{y_{21}+y_{22}}{2})^2 \\ &+(y_{12}-\frac{y_{11}+y_{12}}{2})^2+(y_{22}-\frac{y_{21}+y_{22}}{2})^2 \\ =& \frac{1}{4}[(y_{11}-y_{12})^2+(y_{21}-y_{22})^2+(y_{12}-y_{11})^2+(y_{22}-y_{21})^2] \\ =& \frac{1}{2}[(y_{11}-y_{12})^2+(y_{21}-y_{22})^2] \end{aligned} \tag{3.52}$$

2. 也可以先將區塊因子 F, M ，皆視爲獨立變數 X_F, X_M ，對反應值配適一個反應模型

$$\hat{y} = \hat{\gamma}_0+\hat{\gamma}_1X_F+\hat{\gamma}_2X_M+\hat{\gamma}_3X_FX_M \tag{3.53}$$

再將獨立變數 X_F, X_M 皆視爲獨立隨機變數, 且此隨機變數 X_F, X_M 出現 1 與 -1 的機率皆爲 $\frac{1}{2}$, 因此, 其平均爲 0 和變異數爲 1 。由3.2節所發展的反應建模法知, 針對區塊因子 F 所造成的平方和, 我們可以先對反應模型中的子區區塊隨機變數 X_M 取平均, 再對總區區塊隨機變數 X_F 取變異;

$$Var_{X_F}[E_{X_M}(\hat{y})] = \hat{\gamma}_1^2 = \frac{1}{16}[(y_{11}+y_{12})-(y_{21}+y_{22})]^2 \tag{3.54}$$

另一方面, 針對區塊因子 M 所造成的平方和, 我們可以先對反應模型中的所有區塊隨機變數取平均, 減去對反應模型中的子區區塊隨機變數 X_M 取平均, 再對總區區塊隨機變數 X_F 取變異。

$$
\begin{aligned}
&Var_{X_F,X_B}(\hat{y}) - Var_{X_F}[E_{X_M}(\hat{y})] \\
&\qquad =\hat{\gamma}_2^2 + \hat{\gamma}_3^2 = [\frac{1}{4}((y_{11} - y_{12}) + (y_{21} - y_{22}))]^2 \\
&\qquad\quad + [\frac{1}{4}((y_{11} - y_{12})^2 - (y_{21} - y_{22}))]^2 \\
&\qquad =\frac{1}{8}[(y_{11} - y_{12})^2 + (y_{21} - y_{22})^2]
\end{aligned} \tag{3.55}
$$

其中, 由 $\hat{\beta} = (X^TX)^{-1}X^Ty$ 可得

$$
\begin{aligned}
\hat{\gamma}_0 &= \frac{1}{4}[(y_{11} + y_{12} + y_{21} + y_{22})], \quad \hat{\gamma}_1 = \frac{1}{4}[(y_{11} + y_{12}) - (y_{21} + y_{22})], \\
\hat{\gamma}_2 &= \frac{1}{4}[(y_{11} - y_{12}) + (y_{21} - y_{22})], \quad \hat{\gamma}_3 = \frac{1}{4}[(y_{11} - y_{12}) - (y_{21} - y_{22})]
\end{aligned}
$$

結合 (3.51) 式與 (3.54) 式, 以及結合 (3.52) 式與 (3.55) 式, 我們可以證明此具有巢狀區塊結構的實驗, 可以使用反應建模法得到正比於各個區塊因子所造成的平方和的值, 用公式表示即

$$Var_{X_F}[E_{X_M}(\hat{y})] \propto SS_F \tag{3.56}$$

$$Var_{X_F,X_M}(\hat{y}) - Var_{X_F}[E_{X_M}(\hat{y})] \propto SS_{M:F} \tag{3.57}$$

此外, 我們也可以由 (3.51) 式與 (3.54) 式, 以及 (3.52) 式與 (3.55) 式, 發現兩種計算方法差異的比例爲, 實驗中觀測值的總數, 即差一個常數倍 $c_2 = 4$ 。

上面我們利用兩個具有簡單區塊結構的實驗, 證明在這樣具有簡單區塊結構的實驗中, 使用平均-變異法與反應建模法, 可以算出相同區塊因子所造成的變異。我們可以試著將此結果推廣, 在上述的兩個簡單實驗中, 我們皆只考慮兩水準的區塊因子, 其實, 在相同的計算方式下, 我們可以證明在具有一個 n 水準區塊因子實驗中, 其中 $n \geq 2$, 使用平均-變異法與反應建模法, 依然可以得到相同區塊因子所造成的變異; 另一方面, 如果考慮具有多個兩水準區塊因子的實驗時, 我們可以將此實驗視爲具有一個多水準區塊因子的實驗, 舉例來說, 我們可以將具有三個兩

水準區塊因子的實驗, 視為具有一個八水準區塊因子的實驗, 因為三個兩水準區塊因子的效應 (包含所有主效應及交互作用) 所生成的空間, 與一個八水準區塊因子的所有主效應所生成的空間是相同的。此外, 我們亦可以將上述多水準區塊因子之概念, 推廣至具有巢狀區塊結構的實驗中, 也就是說, 如果實驗中有好幾個兩水準總區區塊因子, 以及好幾個兩水準子區區塊因子, 我們可以將此實驗視為, 具有一個多水準總區區塊因子, 以及一個多水準子區區塊因子的實驗。而在我們的實際計算中, 我們確實可以將此結果推廣至更複雜的區塊結構, 例如: 長晶實驗所具有的 16/4/2 巢狀區塊結構。

在傳統的反應建模法中, 建立反應模型後, 我們會先做選模的動作, 刪除不顯著的效應, 細節請參考 Wu 和 Hamada (2000, Chapter 10); 然而, 在本論文的新版本反應建模法中, 我們皆利用完整的反應模型來做運算, 也就是在建立反應模型後, 不做選模的動作, 其理由是因當使用反應建模法時, 如果刪除反應模型中不顯著的解釋變數, 所估計出來區塊因子所造成的變異數, 會與使用平均-變異法所估計出來的, 有些許的出入。因此, 本論文建議, 如果實驗者的目的是要正確的估計出各個區塊因子所造成的變異, 則在建立反應模型後, 要使用完整的反應模型做計算; 然而, 如果實驗中具有很多控制因子, 可以在建立好各個區塊因子的變異模型後, 透過半常態圖 (half-narmal plot) 等方法, 篩選重要的控制因子, 也就是不對反應模型做選模, 而是對建立好各個區塊因子的變異模型做選模的動作。

第 4 章 具有干擾因子之多階層實驗

本章中探討具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 其處理結構中除有控制因子外, 亦具有干擾因子 (noise factors) 時, 使用穩健參數設計的分析策略。干擾因子是在製程中或者正常使用條件下很難控制的變數, 舉例來說, 我們想關心汽車引擎的耐用程度, 做實驗時我們可能可以在實驗室中控制室溫, 但是當汽車實際在道路上駕駛時, 我們無法控制環境的溫度, 此時, 溫度就是一個干擾因子。傳統的穩健參數設計, 並不考慮實驗的區塊結構, 針對處理結構中具有控制因子與干擾因子的實驗, 可以利用平均-變異法或反應建模法, 建立平均模型與變異模型, 找出適當控制因子的水準, 使得平均反應值達到目標值, 以及降低製程中干擾因子所造成的總變異, 詳請參考 Wu 和 Hamada (2000, Chpater 10)。然而, 在具有區塊結構的多階層實驗中, 造成總變異的因素不單單只有處理結構中的干擾因子, 還有區塊結構中的區塊因子, 如果直接使用傳統的穩健參數設計, 會使得兩種不同類型因子 (區塊因子與干擾因子) 所造成的變異混淆在一起, 如果我們有辦法區分不同類型因子所造成的變異, 並建立模型來描述這些不同的變異是如何受控制因子的影響, 對於整體實驗的改善, 會有更顯著的效果。本論文中, 針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 且其處理結構中具有控制因子與干擾因子, 提出一個新的分析策略: 兩階段建模策略, 其結合平均-變異法與反應建模法, 使得我們可以建立一個反應值與控制因子相關的平均模型, 各個區塊因子的變異模型, 以及干擾因子的變異模型。

4.1 具有干擾因子的長晶實驗

第二章我們已使用平均-變異法分析具有巢狀區塊結構的長晶實驗, 本章節中, 我們可以再假設長晶實驗的處理結構中還具有干擾因子。具有干擾因子的長晶實驗, 其處理結構中有總區控制因子 A 與子區控制因子 B , 以及總區干擾因子 U ,

與子區干擾因子 V, 其中 A, B, U, V 皆爲兩水準因子, 且處理結構中每個因子的水準設定如表4.1。此外, 並假設長晶實驗具有 16/8 的巢狀區塊結構, 可以想像成其區塊結構中有十六間工廠, 可以用四個兩水準因子 $F_1 \sim F_4$ 的十六個水準組合來表示; 而每間工廠底下有八台機器, 可以用三個兩水準因子 $M_1 \sim M_3$ 的八個水準組合來表示。其中, 總區區塊因子 F_3, F_4 分別與總區控制因子與干擾因子 A, U 混淆在一起, 子區區塊因子 M_2, M_3 分別與子區控制因子與干擾因子 B, V 混淆在一起, 如表4.2。

表 4.1: 具有干擾因子的長晶實驗之因子與水準

控制因子	水準 −	水準 +
A. 襯托器旋轉方式 (susceptor-rotation)	連續	振盪
B. 儲存溫度 (deposition temperature)	1210	1220
干擾因子	**水準 −**	**水準 +**
U. 晶圓代碼 (code of wafers)	668G4	678G4
V. 砷流率 (arsenic flow rate)(%)	55	59

如表4.2, 本實驗的處理結構中是一個 2^4 完全因子設計, 在每種控制因子 A, B 與干擾因子 U, V 的水準組合下, 皆有八個觀測點, 而此八個觀測點分別在四間不同的工廠做實驗, 且每間工廠內有兩台不同的機器。此實驗的目標爲, 對反應值建立平均模型, 建立區塊因子的變異模型, 以及建立干擾因子的變異模型, 探討控制因子是如何影響反應值的平均, 區塊因子所造成的變異, 以及干擾因子所造成的變異, 進而, 找出最佳的控制因子水準設定, 使得平均反應值在各種生產條件下, 其反應值的平均厚度能維持在 14.5 μm , 且盡可能降低製程中干擾因子所造成的變異, 以及各個區塊因子所造成的變異。

表 4.2: 具有干擾因子的長晶實驗資料

處理結構				區塊結構								
控制因子		干擾因子		區塊因子								
				F_1	+	+	+	+	−	−	−	−
				F_2	+	+	−	−	+	+	−	−
				M_1	+	−	+	−	+	−	+	−
A (F_3)	B (M_2)	U (F_4)	V (M_3)									
+	+	+	+		14.29	14.80	14.27	14.70	15.32	15.93	15.27	14.92
+	+	+	−		14.19	14.72	14.19	14.76	14.43	14.90	15.41	15.13
+	−	+	+		13.88	13.41	13.85	13.59	14.01	14.24	14.21	14.40
+	−	+	−		13.92	13.48	14.08	13.52	13.94	14.26	14.08	14.37
+	+	−	+		14.17	13.25	14.14	13.19	14.15	14.22	14.15	14.27
+	+	−	−		14.03	13.33	14.08	13.44	14.17	14.30	14.28	14.41
+	−	−	+		14.06	14.31	14.18	14.68	15.30	15.01	15.42	15.57
+	−	−	−		14.09	14.41	14.05	14.58	15.52	15.06	15.21	15.47
−	+	+	+		13.73	13.90	12.65	14.45	14.90	13.75	14.19	14.22
−	+	+	−		13.29	14.56	13.27	13.71	14.80	14.32	14.63	13.82
−	−	+	+		14.22	13.52	15.28	14.28	14.19	14.56	15.55	15.23
−	−	+	−		14.40	13.58	15.04	13.84	14.43	14.47	15.22	15.11
−	+	−	+		14.53	14.57	14.67	13.71	14.74	15.87	14.97	14.97
−	+	−	−		14.25	14.03	15.28	14.64	14.18	15.22	15.55	16.00
−	−	−	+		12.90	13.95	13.15	14.11	14.25	13.81	14.13	14.43
−	−	−	−		12.71	14.08	13.89	13.60	13.84	14.07	15.17	13.69

* 原始長晶實驗資料數據的精確度達到小數點後四位, 在此因為版面有限, 只列出四捨五入至小數點後第二位的值。

* 為了計算上方便, 我們對調了原始長晶實驗中, 一些控制因子水準組合下的觀測值。

4.2 兩階段建模策略

在具有干擾因子的多階層實驗中, 造成實驗總變異的來源有兩大類: 區塊因子所造成的變異, 以及干擾因子所造成的變異。如果要分別估計區塊因子與干擾因子所造成的變異大小, 我們必須先將這兩種因子視為隨機效應因子, 而控制因子則視為固定效應因子, 並在各種控制因子 A, B 的水準組合下, 建立隨機效應模型來描

述反應值如何受到干擾因子, 以及區塊因子的影響, 並利用平均-變異法或反應建模法, 建立各個區塊因子的變異模型, 以及干擾因子的變異模型。然而, 長晶實驗中的區塊因子爲巢狀結構, 而干擾因子爲交叉結構, 因此, 上述的隨機效應模型中同時具有巢狀效應與交叉效應, 舉例來說, 針對長晶實驗可能可以用下列的隨機效應模型來表示

$$y_{ijkl} = \mu_{A,B} + \tau_i + \beta_{j(i)} + \zeta_k + \eta_l + \epsilon_{(ij)kl} \tag{4.1}$$

並假設 $\mu_{A,B}$ 爲固定效應, 而 τ_i, β_j, ζ_k, 和 $\eta_{l(k)}$ 爲隨機效應, 分別假設其服從 $N(o, \sigma^2_{\tau,(A,B)})$, $N(o, \sigma^2_{\beta,(A,B)})$, $N(o, \sigma^2_{\zeta,(A,B)})$, 和 $N(o, \sigma^2_{\eta,(A,B)})$ 。其中, ζ_k 和 η_l 分別代表干擾因子 U, V 的效應, 其結構爲交叉; 而 τ_i 和 $\beta_{(j)i}$ 分別代表區塊因子工廠與機器的效應, 其結構爲巢狀. 這樣同時包含巢狀效應和交叉效應的隨機模型, 其最大概似估計式可能沒有解析解 (closed form), 可能要使用一些數值運算的方法, 才能估計出各個隨機因子所造成的變異大小; 另一方面, 在某些此類型的實驗裡, 干擾因子與區塊因子的效應可能會混淆在一起, 例如, 長晶實驗中總區區塊因子 F_4 與干擾因子 U 的效應混淆在一起, 在這種情況下, 很難寫出個別因子的變異數之估計式。因此, 爲了簡化上述的計算方法, 針對具有干擾因子的多階層實驗, 我們提出一個兩階段建模策略。

第一階段: 平均-變異法

首先, 將處理結構中的控制因子與干擾因子皆視爲固定效應因子, 因此, 可以使用第二章所介紹的平均-變異法, 建立控制因子與干擾因子對反應值的平均模型, 以及控制因子與干擾因子對各個區塊因子的變異模型。針對具有干擾因子的長晶實驗, 我們會於4.2.1節詳細的介紹兩階段建模策略中的第一階段。

第二階段: 反應建模法

將由第一階段得到的平均模型與各個區塊因子的變異模型中, 代表干擾因子的獨立變數, 視爲獨立隨機變數, 並對其做適當的運算, 得到反應值與控制因子相關的平均模型, 干擾因子的變異模型, 以及各個區塊因子的變異模型。針對具有干擾因子的長晶實驗, 於4.2.2節會詳細的介紹兩階段建模策略中的第一階段。

此兩階段建模策略, 可以大幅簡化直接使用平均-變異法或反應建模法的複雜度。因爲我們可以避免隨機效應模型中, 同時出現巢狀效應與交叉效應。在兩階段建模策略的第一階段中, 只需處理具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 如本論文第二章與第三章所介紹的例子; 而在兩階段建模策略的第二階段中, 只需處理具有交叉干擾因子的實驗。而針對這兩種實驗, 我們都已經有發展好可以使用的建模方法, 因此, 可以較容易地建立平均模型、干擾因子的變異模型、以及區塊因子的變異模型。以下兩小節分別介紹, 眞對具有干擾因子之長晶實驗, 該如何利用兩階段建模策略, 建立各種模型, 以及其分析結果。

4.2.1 第一階段: 平均-變異法

首先, 我們將處理結構中的干擾因子 U, V 也視爲類似控制因子的固定效應因子, 所以, 此時長晶實驗中可以看成有四個固定效應因子 A, B, U, V , 此實驗即爲第二章平均-變異法所介紹的具有子區控制因子之巢狀區塊結構實驗, 因此我們可以根據第二章所提出的新版本平均-變異法, 建立控制因子與干擾因子對反應值的平均模型, 以及控制因子與干擾因子對各個區塊因子的變異模型。

第一階段中平均-變異法的第一步

建立隨機效應模型描述反應值 y 在不同控制因子與干擾因子 A, B, U, V 的水準組合下, 與總區控制因子, 以及子區區塊因子之關聯性。因爲長晶實驗的區塊結構爲巢狀結構, 且共有兩個區塊因子, 分別爲工廠與機器, 且實驗中並沒有重複實驗點, 因此, 我們可以建立一個沒有重複實驗點的二因子巢狀隨機模型。

沒有重複實驗點的二因子巢狀隨機模型

$$y_{jk} = \mu_{A,B,U,V} + \tau_j + \beta_{k(j)} \quad \begin{cases} i = 1, 2, \ldots, 4 \\ j = 1, 2 \end{cases} \tag{4.2}$$

其中 $\mu_{(A,B,U,V)}$ 爲在控制因子與干擾因子 A, B, U, V 不同水準時反應值 y_{ij} 的平均值, 爲一個固定效應; 假設 τ_i , 和 $\beta_{j(i)}$ 爲隨機效應, 分別代表區塊因子工廠與機器的效應, 並假設 τ_i 服從 $N(0, \sigma^2_{\tau,(A,U)})$, 以及 $\beta_{j(i)}$ 服從 $N(0, \sigma^2_{\beta,(A,B,U,V)})$ 。

由第二章所介紹的新版本平均-變異法, 我們可以估計出不同控制因子與干擾因子水準組合時, 反應值的平均, 總區區塊因子 (工廠) 所造成的的變異, 以及子區區塊因子 (機器) 所造成的變異, 詳見表4.3。

表 4.3: 控制因子和干擾因子與平均反應值, 以及區塊因子變異之關聯性

控制因子		干擾因子		平均	總區區塊因子變異	子區區塊因子變異
A	B	U	V	$\hat{\bar{y}}$	$\hat{\sigma}_\tau^2$	$\hat{\sigma}_\beta^2$
+	+	+	+	14.8727	0.2321	0.0766
+	+	+	−	14.8408		0.1208
+	−	+	+	13.9486		0.0478
+	−	+	−	13.9561		0.0883
+	+	−	+	13.9433	0.4792	0.2205
+	+	−	−	14.0053		0.1159
+	−	−	+	14.8154		0.0521
+	−	−	−	14.7982		0.0822
−	+	+	+	13.9738	0.2443	0.5734
−	+	+	−	14.0488		0.3334
−	−	+	+	14.6052		0.2145
−	−	+	−	14.5110		0.2621
−	+	−	+	14.7545	0.2976	0.2744
−	+	−	−	14.9232		0.4861
−	−	−	+	13.8433		0.2897
−	−	−	−	13.8808		0.5293

第一階段中平均-變異法的第二步

由表4.3, 我們可以建立一個反應值與控制因子和干擾因子相關的平均模型:

$$\begin{aligned}\hat{y}_{(A,B,U,V)} =& 14.3576 + 0.0400X_A + 0.0627X_B - 0.0129X_U - 0.0130X_V \\ & - 0.0448X_AX_B + 0.0199X_AX_U + 0.0104X_AX_V + 0.0267X_BX_U \\ & - 0.0213X_BX_V + 0.0184X_UX_V + 0.4076X_AX_BX_U + 0.0163X_AX_BX_V \\ & - 0.0098X_AX_UX_V - 0.0050X_BX_UX_V + 0.0098X_AX_BX_UX_V\end{aligned} \tag{4.3}$$

亦可建立一個總區區塊因子所造成的變異, 與總區控制因子和總區干擾因子相關的變異模型:

$$\ln \hat{\sigma}^2_{\tau,(A,U)} = -1.2330 + 0.1349X_A - 0.2020X_U - 0.1605X_AX_U \tag{4.4}$$

以及建立一個子區區塊因子所造成的變異, 與控制因子和干擾因子相關的變異模型:

$$\begin{aligned}\ln \hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B,U,V)} =& -1.7309 - 0.6780X_A + 0.2285X_B - 0.1047X_U - 0.1072X_V \\ & + 0.0929X_AX_B - 0.0242X_AX_U - 0.0031X_AX_V + 0.0225X_BX_U \\ & + 0.1268X_BX_V + 0.0163X_UX_V - 0.1479X_AX_BX_U + 0.0301X_AX_BX_V \\ & - 0.1733X_AX_UX_V - 0.0143X_BX_UX_V - 0.1033X_AX_BX_UX_V\end{aligned} \tag{4.5}$$

4.2.2 第二階段: 反應建模法

第一階段中, 我們使用新版本的平均-變異法, 得到反應值與控制因子和干擾因子相關的平均模型, 以及各個區塊因子所造成的變異, 與控制因子和干擾因子相關的變異模型。然而, 在正常的製程中, 或者平常的使用條件下, 干擾因子是難以控制的, 因此, 在第二階段中, 我們可以使用反應建模法, 針對第一階段得到的平均模型與變異模型, 做適當的運算, 得到反應值只與控制因子相關的平均模型, 各個區塊因子只與控制因子相關的變異模型, 以及干擾因子的變異模型。

第二階段中反應建模法的第一步

由第三章所介紹的反應建模法可知, 其第一步是將所有因子皆視爲獨立變數, 對反應值 y 配適反應模型。此時, 我們可以直接將第一階段得到的反應值與控制及干擾因子相關的平均模型, 視爲傳統反應建模法中, 針對具有控制及干擾因子的實驗, 所建立的反應模型。因此, 可將第一階段得到的反應模型與變異模型中, 所有描述干擾因子的獨立變數皆視爲獨立隨機變數, 並稱 X_U 總區干擾獨立隨機變數, 以及 X_V 爲子區干擾獨立隨機變數, 並對這些獨立隨機變數做運算, 以得到反應值與控制因子相關的平均模型, 干擾因子所造成的變異與控制因子相關的變異模型、以及區塊因子所造成的變異只與控制因子相關的變異模型。其中, 每個獨立變數皆有 $+1$ 與 -1 兩個值, 並且我們將 U, V 視爲隨機變數 X_U, X_V 時, 其出現 1 與 -1 的機率皆爲 $\frac{1}{2}$, 因此, 可以得到下列各個獨立隨機變數的期望值與變異數。其中, 詳細計算方法及其原因請參考3.2節。

$$\begin{aligned} E(X_U) &= E(X_V) = 0, \\ Var(X_U) &= Var(X_V) = 1, \\ Cov(X_U, X_V) &= 0 \end{aligned} \tag{4.6}$$

第二階段中反應建模法的第二步

由 (4.6) 式得到各個干擾因子獨立隨機變數的期望值與變異數後, 我們可以針對第一階段所建立的模型做計算, 進而可以得到下列四個模型, 了解反應值的平均, 干擾因子所造成的變異, 以及各個區塊因子所造成的變異, 是如何受到控制因子的影響。

1. 反應值與控制因子相關的平均模型: 將第一階段所建立的平均模型 (4.3) 式, 視爲反應建模法中的反應模型, 並對所有干擾獨立隨機變數 X_U, X_V 取平均, 即

$$E_{X_U,X_V}(\hat{y}_{(A,B)}) = 14.3576 + 0.0400X_A + 0.0627X_B - 0.0448X_AX_B \tag{4.7}$$

2. 干擾因子的變異模型: 將第一階段所建立的平均模型 (4.3) 式, 視爲反應建模法中的反應模型, 並對所有干擾獨立隨機變數 X_U, X_V 取變異, 即

$$
\begin{aligned}
&Var_{X_U,X_V}(\hat{y}_{(A,B)}) \\
&\quad =(-0.0129 + 0.0199X_A + 0.0267X_B + 0.4076X_AX_B)^2 Var(X_U) \\
&\qquad + (-0.0130 + 0.0104X_A - 0.0213X_B + 0.0163X_AX_B)^2 Var(X_V) \\
&\qquad + (0.0184 - 0.0098X_A - 0.0050X_B + 0.0098X_AX_B)^2 Var(X_UX_V) \\
&\quad = \texttt{constant} + 0.0099X_A + 0.0080X_B - 0.0049X_AX_B \qquad (4.8)
\end{aligned}
$$

3. 總區區塊因子的變異模型: 由第一階段所建立之總區區塊因子的變異模型 (4.4) 式, 對模型中總區干擾獨立隨機變數 X_U 取平均, 即

$$E_{X_U}(\ln \hat{\sigma}^2_{\tau,(A)}) = -1.2330 + 0.1346X_A \qquad (4.9)$$

4. 子區區塊因子的變異模型: 由第一階段所建立之子區區塊因子的變異模型 (4.5) 式, 對模型中所有干擾獨立隨機變數 X_U, X_V 取平均, 即

$$E_{X_U,X_V}(\ln \hat{\sigma}^2_{\beta,(A,B)}) = -1.7309 - 0.6780X_A + 0.2285X_B + 0.0929X_AX_B \qquad (4.10)$$

由 (4.7)–(4.10) 式, 我們可以做以下的分析。因長晶實驗爲平均反應值有目標值的實驗, 可以使用 Wu 和 Hamada (2000) 提出穩健參數設計的分析策略。首先, 由平均模型 (4.7) 式知, 不論控制因子的水準定在 $(A, B) = (+,+), (+,-), (-,+)$, 或 $(-,-)$, 其反應值的平均厚度皆可維持在 $14.5 \pm 0.5\ \mu m$; 因此, 針對干擾因子所造成的變異, 可以將控制因子的水準定在 $(A, B) = (-,-)$, 使得干擾因子所造成的變異最小; 針對總區區塊因子 (工廠) 所造成的變異, 可以將總區控制因子水準定在 $(A = -)$, 使得總區區塊因子所造成的變異最小; 針對子區區塊因子 (機器) 所造成的變異, 可以將控制因子水準定在 $(A, B) = (+,-)$, 使得子區區塊因子所造成的變異最小。由上述的分析, 我們可以發現, 要使得不同造成實驗變異的因子, 其個別所造成的變異達到最小之最佳控制因子水準可能不同, 也就是說, 使用傳統的穩健參數設計法, 只能針對總變異找出一組最佳的控制因子水準, 但如果

實驗者想要針對不同造成實驗變異的因子做改進, 傳統的穩健參數設計是無法提供這樣的資訊。

如果忽略長晶實驗中區塊結構所造成的影響, 將總變異皆視爲干擾因子的水準改變所造成的, 此時我們可以使用傳統的穩健參數設計, 估計出在控制因子 A, B 不同水準組合時, 干擾因子所造成的變異 $\dot{\sigma}^2_{\texttt{noise}}$, 詳細計算方式請參考 Wu 和 Hamada (2000, Chapter 10)。表4.4列出在控制因子 A, B 不同水準組合時, 考慮長晶實驗區塊結構所造成的影響, 或不考慮區塊結構所造成的影響時, 干擾因子所造成的變異數估計值, 以及區塊因子所造成的變異估計值。

表 4.4: 考慮區塊結構與否之干擾因子、區塊因子變異的估計

控制因子		干擾因子變異	總區區塊因子變異	子區區塊因子變異	忽略區塊結構的干擾因子變異
A	B	$\hat{\sigma}^2_{\texttt{noise}}$	$\hat{\sigma}^2_{\tau}$	$\hat{\sigma}^2_{\beta}$	$\dot{\hat{\sigma}}^2_{\texttt{noise}}$
$+$	$+$	0.1950	0.3335	0.1240	0.3797
$+$	$-$	0.1826		0.0652	0.3963
$-$	$+$	0.1750	0.2546	0.3996	0.5756
$-$	$-$	0.1232		0.3047	0.4840

由表4.4可知, 當我們忽略長晶實驗中區塊結構所造成的影響時, 如果我們想要降低干擾因子所造成的變異, 可以將控制因子水準的設定爲 $(A, B) = (+, +)$, 此實驗結果與由 (4.8) 式所建議的控制因子水準 $(A, B) = (-, -)$ 不同, 其原因是當忽略實驗中區塊結構所造成的影響時, 區塊因子所造成的變異與干擾因子所造成的變異可能會混淆在一起, 也就是說, 此時估計干擾因子所造成的變異是有偏誤的, 因爲此變異並不是單單由干擾因子所造成的, 而是結合了區塊因子所造成的變異。因此, 針對具有區塊結構的多階層實驗, 如果其處理結構中有干擾因子, 我們不能忽略區塊結構所造成的影響而直接使用傳統的穩健參數設計。

4.3 穩健參數設計中的效應排序準則

在穩健參數設計中, 傳統實驗設計的效應階層排序準則 (hierarchical ordering principle) 爲:

1. 認爲低階效應比高階效應重要;
2. 同階層的效應其重要性相同;

是不適用的, 因爲穩健參數設計同時具有兩種目標: 使平均最佳化, 以及降低變異。因此, 不能直接套用 mimimum aberration 準則於所有的因子上, 來判斷一個設計的好壞。如果在一個具有干擾因子的實驗中, 沒有區塊結構的存在, 或者我們可以忽略區塊結構的影響時, 可參考 Wu 和 Zhu (2003) 提出穩健參數設計之效應排序準則 (Effect Ordering Principle for Parameter Design), 選取最佳的實驗設計。然而, 針對具有區塊結構的實驗, 其實驗中除有控制因子與干擾因子外, 亦有區塊因子的存在, 因此, 此穩健參數設計之效應排序準則是不夠的。

由本章節的討論中發現, 干擾因子與區塊因子的作用相當類似, 它們主要的貢獻皆在於利用其與控制因子之交互作用, 達到降低製程或實驗中的變異; 此外, 由建立平均模型, 干擾因子的變異模型, 以及區塊因子的變異模型之過程中, 我們發現針對具有區塊結構的實驗, 使用穩健參數設計時, 效應之重要性有以下遞減順序。首先, 定義 C 代表控制因子, n 代表干擾因子, 以及 p 代表區塊因子。C, n, p, Cn, 和 Cp 應該被視爲同樣重要, 其中 C 是負責調整平均反應值 (如 (4.7) 式), n 和 Cn 對於降低干擾因子所造成的變異有作用, 而 p 和 Cp 則是對於降低區塊因子所造成的變異有作用; 接下來我們考慮第二組有相同重要性的效應, 分別爲 CC, CCn, 和 CCp , 其中 CC 可以影響平均反應值, CCn 和 CCp 分別可以影響干擾因子所造成的變異與區塊因子所造成的變異 (如 (4.9)–(4.10) 式)。此外, 第三組我們考慮 Cnn, 和 Cpp , 此兩種效應也分別可以影響干擾因子所造成的變異與區塊因子所造成的變異, 但因其相較於 CCn 和 CCp , 包含了較多干擾因子與區塊因子, 因此判定其重要性較低。而 nn 和 pp 雖然會影響干擾因子的變異模型與區塊因子的變異模型, 但因爲在正常的使用條件中, 其皆無法被控制或被調整, 因此其重要性較低。最後, Cnp 也被視爲較不重要的, 雖然此效應可以出

現在兩階段分析策略中, 第一階段的區塊因子變異與控制因子和干擾因子相關的變異模型中 (如 (4.4) 式和 (4.5) 式), 然而, 在第二階段的區塊因子變異只與控制因子相關的變異模型中 (如 (4.9) 式和 (4.10) 式), 此效應會消失。由上述的討論, 效應的重要性應依下列遞減順序排列。

1. C, n, Cn, p, Cp
2. CC, CCn, CCp
3. Cnn, Cpp, nn, pp
4. CCC
5. Cnp, nnn, ppp, nnp, npp

上述方法仍有不足之處, 因其未考慮總區控制因子與子區控制因子之差異, 上述效應的重要性是在假設所有控制因子之重要性皆相同的狀況下討論, 而干擾因子與區塊因子也依此假設, 然而, 針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 此假設可能是不恰當的。由本論文所發展的分析方法中, 我們發現了以下兩點:

1. 由本論文第二章所介紹的內容了解到, 各個區塊因子所造成的變異, 只會受到所有比它還高階層的控制因子, 以及同階層的控制因子之影響, 並不會受到比此區塊因子低階層的控制因子之影響。因此, 總區控制因子與區塊因子的交互作用之重要性大於子區控制因子與區塊因子的交互作用, 因其可以影響較多地區塊因子所造成的變異, 而子區控制因子與區塊因子的交互作用之重要性又大於次子區控制因子與區塊因子, 更下層的控制因子與區塊因子的交互作用, 其重要性可以依此類推。

2. 另一方面, 假設實驗者所關心的爲總區區塊因子的變異模型, 此時子區控制因子與總區區塊因子的交互作用是不重要的, 因爲此效應無法出現在總區區塊因子的變異模型中, 也就是說, 針對高階區塊因子的變異模型, 低階控制因子與高階區塊因子之交互作用是不重要的。

更多關於多階層實驗中, 各層因子效應的重要性, 亦可參考 Cheng 和 Tsai (2009)。

第 5 章 結論

針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 本論文的第二章與第三章, 分別提出新版本的平均-變異法與反應建模法, 使得我們可以建立一個平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型; 如果此多階層實驗的處理結構中, 除有控制因子外, 亦有干擾因子的存在, 對此類型的實驗, 本論文的第四章, 我們提出兩階段建模策略, 其結合了平均-變異法與反應建模法, 使得我們除可建立一個平均模型, 與各個區塊因子的變異模型外, 亦可建立一個干擾因子的變異模型。由上述的平均模型與各種變異模型, 我們可以藉由調整模型中控制因子的水準, 使平均反應值達到目標值, 並盡可能地降低各種區塊因子所造成的變異, 以及干擾因子所造成的變異。

針對各類型具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 我們皆可以使用新版本的平均-變異法或反應建模法, 來建立平均與變異模型, 然而, 針對一些具有其它種類區塊結構的多階層實驗, 例如:

1. 具有交叉區塊結構的多階層實驗;

2. 同時具有巢狀與交叉區塊結構的多階層實驗。

更多複雜的區塊結構可參考 Nelder (1965a)。針對這些具有其它種類區塊結構的實驗, 該如何正確地使用穩健參數設計中的平均-變異法與反應建模法, 來建立一個平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型, 是一個值得進一步研究的課題。針對上述問題, 或許可以利用本論文所發展的分析方法之概念及步驟, 得到針對具有其它種類區塊結構實驗的平均與變異模型之建構法。

1. 首先, 當有控制因子與區塊因子之效應混淆在一起時, 皆將此效應完全視爲因控制因子水準改變所造成的;

2. 其次, 在每種控制因子不同的水準組合中, 皆使用隨機效應模型來描述區塊因子與反應值之關聯性;

3. 最後, 利用平均-變異法或反應建模法, 建立一個平均模型, 以及各個區塊因子的變異模型。

此外, 本論文著重於探討具有巢狀區塊結構的多階層實驗之分析方法, 然而, 在實驗設計中還有一個重要的主題是探討該如何設計實驗。當我們實驗的目的是分析平均模型與各個區塊因子的變異模型時, 針對具有巢狀區塊結構的多階層實驗, 目前還沒有一套完整的理論, 可以用來判斷一個設計的好壞, 以及選取最佳的設計。而從我們所發展的分析方法中, 我們也發現在具有巢狀區塊結構的多階層實驗中, 每種類型的因子其重要性是不同的 (詳見4.3節之討論), 例如: 控制因子與干擾因子的交互作用其重要性可能是大於控制因子與控制因子的交互作用, 也就是說, 我們不能假設每個因子 (包含控制因子, 干擾因子, 以及區塊因子) 的效應之重要性, 可僅由其字長來決定, 因此, 不能直接使用傳統 minimum aberration 的概念, 透過字的長度來判斷一個設計的好壞。故當實驗的目的是分析平均模型與變異模型時, 如何探討一個多階層實驗設計的好壞, 也是一個未來值得努力的目標。

參考文獻

Bailey, R. A. (2008), *Design of Comparative Experiments*, Cambridge University Press.

Chen, Y. T. (2008), *Analyzing Dispersion Effects for Multi-Stratum Experiments*, M.S. Thesis. Institute of Statistics, National Tsing Hua University.

Cheng, C. S. and Tasi, P. W. (2009), "Optimal two-level regular fractional factorial block and split-plot designs", *Biometrika*, 96(1), 83–93.

Kackar, R. N. and Shoemaker, A. C. (1986), "Robust Design: A Cost-Effective Method for Improving Manufacturing Processes", *AT & T Techmical Journal*, 65, 39–50.

Montgomery, D. C. (2005), *Design and Analysis of Experiments (6th ed.)*, John Wiley and Sons, New York.

Nelder, J. A. (1965), "The analysis of randomized experiments with orthogonal block structure. I. Block structure and the null analysis of variance", *Proc. R. Soc. Lond*, 283(A), 147–162.

Searle, S. R., Casella, G., and Mcculloch, C. E. (1992), *Variance components*, John Wiley and Sons, New York.

Wu, C. F. J. and Hamada, M. S. (2000), *Experiments: Planning, Analysis, and Parameter Design Optimization*, John Wiley, New York.

Wu, C. F. J. and Zhu, Y. (2003), "Optimal selection of single arrays for parameter design experiments", *Statistica Sinica*, 13, 1179–1199.