5 正交設計

前一章所述之正規設計, 其實驗點在 (r, θ) 區間上皆滿足 (4.1) 式的同餘線性方程式, 在本章中我們將會放寬此限制。

5.1 拉丁超方陣設計

若把建模區間表示爲單位正方形 $[0,1]^2$, 將此區間的橫軸與縱軸均等分成 n 個等分的區間 $[0,1/n), [1/n,2/n), \ldots, [(n-1)/n,1]$, 則單位正方形將被分割成 n 行 n 列共 n^2 個相同大小的小方陣。若一個設計其實驗點在每一行, 每一列只會出現一次, 則我們稱之爲拉丁超方陣設計 (Latin Hypercube Designs)。因爲拉丁超方陣的每一行每一列 (即因子的每一個水準) 都只有一個實驗點, 故其實驗次數與水準數相同。前一章我們所提之正規設計 (n,p,q)-設計, 滿足拉丁超方陣的定義, 故本節考慮的設計包含正規設計, 但一個拉丁超方陣未必會滿足 (4.1) 式, 故我們在本章所考慮的設計比正規設計更廣泛。McKay,Beckman 及 Conover(1979) 最早應用拉丁超方陣在電腦實驗 (computer experiment) 上, 因爲拉丁超方陣具有塡滿空間 (space-filling) 的性質, 所以常在電腦實驗中被採用, 然而根據拉丁超方陣的定義, 並不足以保證每一個拉丁超方陣皆爲好的設計, 例如若所有點皆位於對角線上, 其仍滿足拉丁超方陣的定義, 但很明顯的這並不是一個好設計。因此, 陸續有數位學者提出了一些選取好的拉丁超方陣設計的方法。Owen(1992) 及 Tang(1993) 提出以直交表 (orthogonal-array) 爲基礎的拉丁超方陣, Morris and Mithell(1995) 提出最大化最小拉丁超方陣 (Maximin Latin

hypercubes), 所謂最大化最小拉丁超方陣是指使最小內點距離最大化的拉丁超方陣設計, 其與第四章所述準則二的概念有點類似。Park(1994) 嘗試利用 Sacks, Schiller and Welch(1989) 所提出的整體預測均方誤 (MSE) 最小化方法得到最佳拉丁超方陣。Owen(1994) 嘗試控制拉丁超方陣設計矩陣間行與行之間的相關程度。Tang(1998) 進一步提出了不僅考慮控制線性效應間彼此的相關程度, 同時也考慮到更高次項效應的拉丁超方陣。Ye(1998) 提出如何建構正交拉丁超方陣 (orthogonal Latin hypercubes, 以下簡稱爲 OLH), 使得每個變數的線性效應的估計彼此是正交的, 且線性效應與二次效應及交互作用的估計也是正交的。Steinberg and Lin(2006) 說明正交拉丁超方陣可以透過旋轉 2 水準的因子設計獲得。在本章中我們的重點則是利用拉丁超方陣在建模區間上建構正交性較好的設計。

5.2 正交設計

在本節中我們將使用直交多項式 (orthogonal polynomial) 來爲效應 (effect) 編碼 (coding)。一般來說當因子是屬於定量型且水準是閒隔等距時, 直交多項式是一個特殊技巧來提昇效應間的正交性。以下我們考慮配適一個二階模型 (second-order model)

$$y = \beta_0 + \beta_1 r_l + \beta_2 \theta_l + \beta_{11} r_q + \beta_{22} \theta_q + \beta_{12}(r\theta) + \epsilon \tag{5.1}$$

其中 r_l 爲 r 的線性效應 (linear effect), θ_l 爲 θ 的線性效應, r_q 爲 r的二次效應 (quadratic effect), θ_q 爲 θ 的二次效應, $(r\theta)$ 爲 r 與 θ 的線性對線性交互作用 (linear-by-linear interaction), 這些效應都是根據直交多項式來編碼的。更多關於直交多項式的編碼方式, 請參見 Wu and Hamada(2000)。在 (5.1) 中的這個模型可以改寫成以矩陣表示如下:

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}.$$

其中, $\boldsymbol{y}$ 是一個 $n \times 1$ 的觀測值向量, $\boldsymbol{X}$ 是一個 $n \times 6$ 的自變數效應形成的矩陣, 在此我們稱之爲模型矩陣 (model matrix), 其由設計矩陣 (design matrix) 透過 (5.1) 模型的編碼獲得, $\boldsymbol{\beta}$ 是一個 6×1 的迴歸係數向量, 而 ϵ 是一個 $n \times 1$ 的隨機誤差向量。我們知道 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ 裡的非對角線元素爲 $\boldsymbol{X}$ 矩陣的行間內積 (inner product)。我們希望能適當地選取一個設計矩陣 $\boldsymbol{D}$ 以使得其對應的 $\boldsymbol{X}$ 之行間內積爲零, 亦即, 使得這些效應彼此是正交的。我們稱具有這樣性質的設計爲正交設計(orthogonal designs)。在傳統的實驗設計中, 若模型確定了, 則 $\boldsymbol{X}$ 亦被確定, 但在此我們所要探討的正交性, 隨著極軸選取的不同, $\boldsymbol{X}$ 矩陣也會有所不同, 我們的重點在於無論 $\boldsymbol{X}$ 矩陣如何隨著極軸改變而改變, 正交性皆要保持住。

5.2.1 實驗次數等於水準數

首先我們先處理實驗次數 n 等於水準數 s 的設計, 其中 s 爲 r 與 θ 的 水準數。若 n 爲奇數時, 則 r 與 θ 水準編碼爲

$$\{-\tfrac{(n-1)}{2}, \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots, \tfrac{(n-1)}{2}\},$$

若 n 爲偶數時, 則 r 與 θ 水準編碼爲

$$\{-(n-1), \cdots -5, -3, -1, 1, 3, 5 \cdots, (n-1)\}.$$

隨著極軸選取的不同, θ 值也會隨之改變, 此時其線性效應 θ_l 的編碼自然也會有所不同。若我們以 θ_{l_u} 表示極軸改變後 θ 線性效應之新編碼, 其中 u 爲極軸改變之後, 編碼最小之 θ_{l_u} 在極軸未改變前所對應的 θ_l 編碼爲何。比如有五個實驗點 $(r, \theta) = (-2, -2), (-1, 1), (0, -1), (1, 2), (2, 0)$, 如圖5.1(a) 所示, 其線性效應 (r_l, θ_l) 編碼可參照表5.1。若極軸改變後, 以圖5.1(a) 粗線爲新的極軸 (即選取 $u = 1$), 則所對應新的設計 $(r, \theta) = (-2, 0), (-1, -2), (0, 1), (1, -1), (2, 2)$, 如圖5.2(b) 所示, 其線性效應編碼 (r_l, θ_{l_u}) 可參照表5.1。

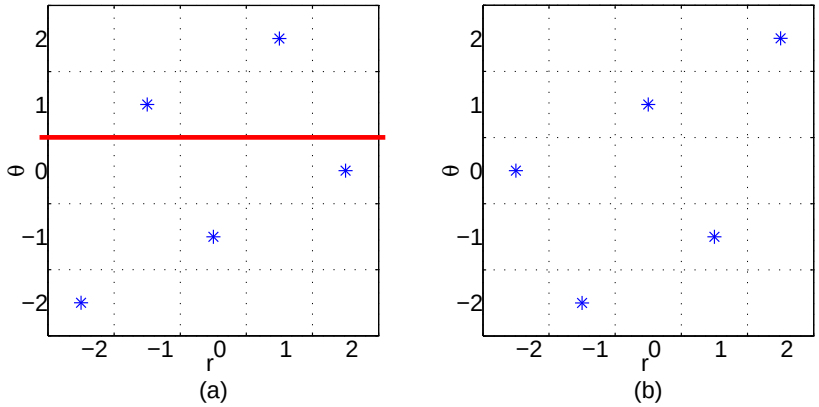

圖 5.1: θ 線性效應隨不同的極軸選取之變化 ((a) 極軸未改變前 (b) 極軸改變後)

表 5.1: 極軸改變前後 (r, θ) 線性效應

r	θ	r_l	θ_l	θ_{l_u}
-2	-2	-2	-2	0
-1	1	-1	1	-2
0	-1	0	-1	1
1	2	1	2	-1
2	0	2	0	2

我們可透過函數來表示 θ_l 與 θ_{l_u} 的關係。若 n 爲奇數時, 我們用函數 f_1 表示:

$$\boldsymbol{\theta_l} \xrightarrow{f_1} \boldsymbol{\theta_{l_u}}$$

$$f_1(\theta_l) = \begin{cases} \theta_{l_i} + (\frac{(n-1)}{2} - u + 1), & \text{if } u \geq 0 \text{ and } \theta_{l_i} < u \\ \theta_{l_i} + (-\frac{(n-1)}{2} - u), & \text{if } \theta_{l_i} \geq u \geq 0 \\ \theta_{l_i} + (\frac{(n-1)}{2} + |u| + 1), & \text{if } \theta_{l_i} < u < 0 \\ \theta_{l_i} + (-\frac{(n-1)}{2} + |u|), & \text{if } u < 0 \text{ and } \theta_{l_i} \geq u \end{cases}$$

若 n 爲偶數時, 我們用函數 f_2 表示:

$$\boldsymbol{\theta_l} \xrightarrow{f_2} \boldsymbol{\theta_{l_u}}$$

$$f_2(\theta_l) = \begin{cases} \theta_{l_i} + ((n-1) - u + 2), & \text{if } u \geq 0 \text{ and } \theta_{l_i} < u \\ \theta_{l_i} + (-(n-1) - u), & \text{if } \theta_{l_i} \geq u \geq 0 \\ \theta_{l_i} + ((n-1) + |u| + 2), & \text{if } \theta_{l_i} < u < 0 \\ \theta_{l_i} + (-(n-1) + |u|), & \text{if } u < 0 \text{ and } \theta_{l_i} \geq u \end{cases}$$

例 5.1　以 $n = 5$ 說明如何透過 f_1 求得新編碼: 參照表5.1, 當 $\boldsymbol{\theta_l} = (\theta_{l_1}, \theta_{l_2}, \theta_{l_3}, \theta_{l_4}, \theta_{l_5})$ $= (-2, 1, -1, 2, 0)$ 時, 若極軸改變後編碼最小的 θ_{l_u} 在極軸改變之前所對應的 θ_l(即 u) 爲 1 時, $\boldsymbol{\theta_{l_u}} = (\theta_{l_{u_1}}, \theta_{l_{u_2}}, \theta_{l_{u_3}}, \theta_{l_{u_4}}, \theta_{l_{u_5}})$ 分別爲:

$$\begin{aligned}
\theta_{l_{u_1}} &= \theta_{l_1} + (\frac{(5-1)}{2} - 1 + 1) = -2 + (2 - 1 + 1) = 0, \\
\theta_{l_{u_2}} &= \theta_{l_2} + (-\frac{(5-1)}{2} - 1) = 1 + (-2 - 1) = -2, \\
\theta_{l_{u_3}} &= \theta_{l_3} + (\frac{(5-1)}{2} - 1 + 1) = -1 + (2 - 1 + 1) = 1, \\
\theta_{l_{u_4}} &= \theta_{l_4} + (-\frac{(5-1)}{2} - 1) = 2 + (-2 - 1) = -1, \\
\theta_{l_{u_5}} &= \theta_{l_5} + (\frac{(5-1)}{2} - 1 + 1) = 0 + (2 - 1 + 1) = 2.
\end{aligned}$$

故當極軸改變後 $(\theta_{l_1}, \theta_{l_2}, \theta_{l_3}, \theta_{l_4}, \theta_{l_5}) = (-2, -1, 0, 1, 2)$ 所對應的新編碼爲 $(\theta_{l_{u_1}}, \theta_{l_{u_2}}, \theta_{l_{u_3}}, \theta_{l_{u_4}}, \theta_{l_{u_5}}) = (0, -2, 1, -1, 2)$。 □

因此, 若已知 n 及 u, 我們可選擇利用 f_1 或 f_2 得到極軸轉換後線性效應的新編碼。

接下來我們考慮正交性質, 我們先找一個 OLH 當設計矩陣, 以 $\boldsymbol{D}$ 來表示。先以 n 爲奇數爲例, 以下我們先定義一些符號。首先 θ_l 的編碼中有大小之分, 我們以 $\theta_{l_{(k)}}$, 表示 θ_l 第 k 大的編碼值, $k = 1, \cdots, n$, 即 $\theta_{l_{(1)}} < \theta_{l_{(2)}} < \theta_{l_{(3)}} < \cdots < \theta_{l_{(n)}}$, 而 $(r_{l_k}, r_{q_k}, \theta_{q_k}, (r\theta)_k)$ 則爲由 $\boldsymbol{D}$ 得到的模型矩陣 $\boldsymbol{X}$ 中與 $\theta_{l_{(k)}}$ 相對應的 $(r_l, r_q, \theta_q, (r\theta))$ 值 , 因此模型矩陣可表示爲

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & r_{l_1} & \theta_{l_{(1)}} & r_{q_1} & \theta_{q_1} & (r\theta)_1 \\ 1 & r_{l_2} & \theta_{l_{(2)}} & r_{q_2} & \theta_{q_2} & (r\theta)_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & r_{l_n} & \theta_{l_{(n)}} & r_{q_n} & \theta_{q_n} & (r\theta)_n \end{bmatrix}$$

由此可推得

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} n & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{(k)}} & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} (r\theta)_k \\ & \sum_{k=1}^{n} (r_{l_k})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{l_{(k)}} & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k} r_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k}(r\theta)_k \\ & & \sum_{k=1}^{n} (\theta_{l_{(k)}})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{(k)}} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{(k)}}\theta_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{(k)}}(r\theta)_k \\ & & & \sum_{k=1}^{n} (r_{q_k})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}(r\theta)_k \\ & & & & \sum_{k=1}^{n} (\theta_{q_k})^2 & \sum_{k=1}^{n} \theta_{q_k}(r\theta)_k \\ & & & & & \sum_{k=1}^{n} (r\theta)_k^2 \end{bmatrix}$$

因爲 $\boldsymbol{D}$ 爲 OLH, 故 $\boldsymbol{X}$ 必滿足線性效應間彼此正交, 即 $\sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{l_{(k)}} = 0$ 。也因爲 OLH 會使得線性效應與二次效應彼此正交, 且主效應與交互作用彼此間正交, 故 $\sum_{k=1}^{n} r_{l_k} r_{q_k} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{(k)}}\theta_{q_k} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{(k)}} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{q_k} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} r_{l_k}(r\theta)_k = 0$, $\sum_{k=1}^{n} \theta_{(l_k)}(r\theta)_k = 0$。此外由於直交多項式的編碼方式有正負對稱的性質, 故滿足限制式 $\sum_{k=1}^{n} r_{l_k} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{(k)}} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} r_{q_k} = 0$, $\sum_{k=1}^{n} \theta_{q_k} = 0$。故對一個 OLH 我們可改寫其 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ 爲

$$
\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix}
n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & \sum_{k=1}^{n}(r_{l_k})^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & \sum_{k=1}^{n}(\theta_{l_{(k)}})^2 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & \sum_{k=1}^{n}(r_{q_k})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{q_k} & 0 \\
 & & & & \sum_{k=1}^{n}(\theta_{q_k})^2 & 0 \\
 & & & & & \sum_{k=1}^{n}(r\theta)_k^2
\end{bmatrix}
$$

由於當極軸改變時, θ_l 將改變爲 θ_{l_u}, 因此其他關於 θ 的效應亦隨之改變, 我們定義 $\theta_{l_{(k)}}$ 經過不同的極軸選取所得到的值爲 $\theta_{l_{u_k}}$, 其可透過 $f_1(\theta_l)$ 或 $f_2(\theta_l)$ 求得。而 $(\theta_{q_{u_k}}, (r\theta)_{u_k})$ 則爲模型矩陣中與 $\theta_{l_{u_k}}$ 相對應的 $(\theta_q, (r\theta))$ 值。故極軸改變後的模型矩陣 $\boldsymbol{X_u}$ 可表示如下:

$$
\boldsymbol{X_u} = \begin{bmatrix}
1 & r_{l_1} & \theta_{l_{u_1}} & r_{q_1} & \theta_{q_{u_1}} & (r\theta)_{u_1} \\
1 & r_{l_2} & \theta_{l_{u_2}} & r_{q_2} & \theta_{q_{u_2}} & (r\theta)_{u_2} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & r_{l_n} & \theta_{l_{u_n}} & r_{q_n} & \theta_{q_{u_n}} & (r\theta)_{u_n}
\end{bmatrix}
$$

其中當 $u = \theta_{l_{(1)}}$ 時, $\boldsymbol{X_u}$ 等同於 $\boldsymbol{X}$。故

$$
\boldsymbol{X}_{\boldsymbol{u}}^{'}\boldsymbol{X}_{\boldsymbol{u}} = \begin{bmatrix}
n & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{q_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} (r\theta)_{u_k} \\
 & \sum_{k=1}^{n} (r_{l_k})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{l_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k} r_{q_k} & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{q_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} r_{l_k}(r\theta)_{u_k} \\
 & & \sum_{k=1}^{n} (\theta_{l_{u_k}})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{u_k}}\theta_{q_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} \theta_{l_{u_k}}(r\theta)_{u_k} \\
 & & & \sum_{k=1}^{n} (r_{q_k})^2 & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{q_{u_k}} & \sum_{k=1}^{n} r_{q_k}(r\theta)_{u_k} \\
 & & & & \sum_{k=1}^{n} (\theta_{q_{u_k}})^2 & \sum_{k=1}^{n} \theta_{q_{u_k}}(r\theta)_{u_k} \\
 & & & & & \sum_{k=1}^{n} (r\theta)_{u_k}^2
\end{bmatrix}
$$

若要線性效應 r_l 與極軸改變後的 θ_{l_u} 之間彼此正交, 則須滿足下式

$$
\sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{l_{u_k}} = 0, \ \forall u = \theta_{l_{(k)}}, \ k = 1, 2, \cdots, n \tag{5.2}
$$

爲了方便計算, 我們將 f_1 由簡便的符號表示如下:

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{(n-1)}{2} - u + 1 \\
B &= -\frac{(n-1)}{2} - u \\
C &= \frac{(n-1)}{2} + |u| + 1 \\
D &= -\frac{(n-1)}{2} + |u|
\end{aligned}
$$

因此 f_1 可重新表示爲

$$
f_1(\theta_l) = \begin{cases}
\theta_{l_i} + A, & \text{if } u \geq 0 \text{ and } \theta_{l_i} < u \\
\theta_{l_i} + B, & \text{if } \theta_{l_i} \geq u \geq 0 \\
\theta_{l_i} + C, & \text{if } \theta_{l_i} < u < 0 \\
\theta_{l_i} + D, & \text{if } u < 0 \text{ and } \theta_{l_i} \geq u
\end{cases}
$$

另外 A, B, C, D 間存在以下關係, $A - B = n$ 且 $B - A = -n$, $C - D = n$。以下我

們一一討論當 u 爲最小的 $\theta_l = \theta_{l_{(1)}}$ 至最大的 $\theta_l = \theta_{l_{(n)}}$ 的情形, 結論如下 (詳細推導請參照附錄 A.4):

當 $u = \theta_{l_{(j)}}, j = 1, \cdots, \frac{n-1}{2}$ 時,

$$\sum_{k=1}^{n} r_{l_k} \theta_{l_{u_k}} = (C - D) \sum_{k=1}^{j-1} r_{l_k} \tag{5.3}$$

當 $u = \theta_{l_{(j)}}, j = \frac{n+1}{2}, \cdots, n$ 時,

$$\sum_{k=1}^{n} r_{l_k} \theta_{l_{u_k}} = (B - A) \sum_{k=j}^{n} r_{l_k} \tag{5.4}$$

所以若要線性效應隨著極軸改變時皆能保持正交的性質, 則 (5.3) 式與 (5.4) 式必須皆爲 0, 因爲 $C - D = n$ 與 $B - A = -n$ 皆爲固定常數, 故 (5.3) 式與 (5.4) 式皆爲 0可分別表示爲

$$\sum_{k=1}^{j-1} r_{l_k} = 0, \forall j = 1, \cdots, \frac{n-1}{2}, \tag{5.5}$$

$$\sum_{k=j}^{n} r_{l_k} = 0, \forall j = \frac{n+1}{2}, \cdots, n。 \tag{5.6}$$

若要 (5.5) 式及 (5.6) 式皆滿足, 唯一的可能是 $r_{l_1} = r_{l_2} = r_{l_3} = r_{l_4} = \cdots = r_{l_n} = 0$。所以可知若是希望在建模區間上找到一個 OLH, 並使其線性效應隨著極軸改變皆保持正交是不可能的。

5.2.2 實驗次數爲兩倍水準數

在本節中我們將限制條件放寬, 不再限制實驗次數 n 等於水準數 s, 而是允許在相同水準下可以有兩個實驗點, 即放寬拉丁超方陣的限制, 使得每行每列都有兩點, 故實驗次數將增加爲 2 倍水準數, 即實驗次數爲 $2s$。

當 θ_l 的水準值爲 $\theta_{l_{(k)}}$ 時, 因爲標準放寬, 故允許有兩個與之對應的 r 線性效應, 分別爲 $(r_{l_k}, r^*_{l_k})$, 故 $(r^*_{l_k}, \theta_{l_{(k)}})$ 即爲增加的實驗點 , 故其模型矩陣可重新寫成

$$
\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix}
1 & r_{l_1} & \theta_{l_{(1)}} & r_{q_1} & \theta_{q_1} & (r\theta)_1 \\
1 & r_{l_2} & \theta_{l_{(2)}} & r_{q_2} & \theta_{q_2} & (r\theta)_2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & r_{l_n} & \theta_{l_{(n)}} & r_{q_n} & \theta_{q_n} & (r\theta)_n \\
1 & r^*_{l_1} & \theta_{l_{(1)}} & r_{q_1} & \theta_{q_1} & (r\theta)_1 \\
1 & r^*_{l_2} & \theta_{l_{(2)}} & r_{q_2} & \theta_{q_2} & (r\theta)_2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & r^*_{l_n} & \theta_{l_{(n)}} & r_{q_n} & \theta_{q_n} & (r\theta)_n
\end{bmatrix}
$$

增加實驗點後, 我們仍希望其模型矩陣, 滿足線性效應間彼此正交, 故可得

$$
\sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{l_{(k)}} + \sum_{k=1}^{n} r^*_{l_k}\theta_{l_{(k)}} = 0 \tag{5.7}
$$

若要滿足線性效應與常數項間彼此正交, 則必須滿足

$$
\sum_{k=1}^{n} r_{l_k} + \sum_{k=1}^{n} r^*_{l_k} = 0 \tag{5.8}
$$

在極軸改變之後, 因爲仍要滿足線性效應之間彼此正交的性質, 即滿足 (5.7) 式, 並希望線性效應與常數項間彼此正交, 即爲滿足 (5.8) 式, 故取 $r^*_{l_k} = -r_{l_k}$。由於我們在相同的 θ 值上, 對 r 取對稱的實驗點 , 故將使得無論 u 值爲何, r 的線性效應與 θ 隨著極軸改變後的線性效應必定正交, 並且也將會與 θ 的二次效應、交互作用必正交。故模型矩陣可改寫爲

$$
\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix}
1 & r_{l_1} & \theta_{l_{(1)}} & r_{q_1} & \theta_{q_1} & (r\theta)_1 \\
1 & r_{l_2} & \theta_{l_{(2)}} & r_{q_2} & \theta_{q_2} & (r\theta)_2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & r_{l_n} & \theta_{l_{(n)}} & r_{q_n} & \theta_{q_n} & (r\theta)_n \\
1 & -r_{l_1} & \theta_{l_{(1)}} & r_{q_1} & \theta_{q_1} & (r\theta)_1 \\
1 & -r_{l_2} & \theta_{l_{(2)}} & r_{q_2} & \theta_{q_2} & (r\theta)_2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & -r_{l_n} & \theta_{l_{(n)}} & r_{q_n} & \theta_{q_n} & (r\theta)_n
\end{bmatrix}
$$

並可推得

$$
\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix}
n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & \sum_{k=1}^{n}(r_{l_k})^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & \sum_{k=1}^{n}(\theta_{l_k})^2 & 2\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{(k)}} & 0 & 0 \\
 & & & \sum_{k=1}^{n}(r_{q_k})^2 & 2\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{q_k} & 0 \\
 & & & & \sum_{k=1}^{n}(\theta_{q_k})^2 & 0 \\
 & & & & & \sum_{k=1}^{n}(r\theta)_k^2
\end{bmatrix}
$$

此外, 使用直交多項式 θ 的線性效應無論極軸如何改變, 必與其二次效應和交互作用正交。故當 $u = \theta_{l_{(k)}}, k = 2, \cdots, n$, 模型矩陣 $\boldsymbol{X_u}$ 可表示如下

$$
\boldsymbol{X_u} = \begin{bmatrix}
1 & r_{l_1} & \theta_{l_{u_1}} & r_{q_1} & \theta_{q_{u_1}} & (r\theta)_{u_1} \\
1 & r_{l_2} & \theta_{l_{u_2}} & r_{q_2} & \theta_{q_{u_2}} & (r\theta)_{u_2} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & r_{l_n} & \theta_{l_{u_n}} & r_{q_n} & \theta_{q_{u_n}} & (r\theta)_{u_n} \\
1 & -r_{l_1} & \theta_{l_{u_1}} & r_{q_1} & \theta_{q_{u_1}} & (r\theta)_{u_1} \\
1 & -r_{l_2} & \theta_{l_{u_2}} & r_{q_2} & \theta_{q_{u_2}} & (r\theta)_{u_2} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & -r_{l_n} & \theta_{l_{u_n}} & r_{q_n} & \theta_{q_{u_n}} & (r\theta)_{u_n}
\end{bmatrix}
$$

並可得

$$
\boldsymbol{X_u'X_u} = \begin{bmatrix}
n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & \sum_{k=1}^{n}(r_{l_k})^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & \sum_{k=1}^{n}(\theta_{l_{u_k}})^2 & 2\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{u_k}} & 0 & 0 \\
 & & & \sum_{k=1}^{n}(r_{q_k})^2 & 2\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{q_{u_k}} & 0 \\
 & & & & \sum_{k=1}^{n}(\theta_{q_{u_k}})^2 & 0 \\
 & & & & & \sum_{k=1}^{n}(r\theta)_k^2
\end{bmatrix}
$$

在確保低階效應必正交下, 我們將考慮更高階效應的正交性。我們希望對角線以外的值皆爲 0, 在此我們只考慮到三次項的正交性質 (r 二次, θ 一次), 即

$$
\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{u_k}} = 0, \forall u。 \tag{5.9}
$$

以下我們一一討論 u 爲 $\theta_{l_{(1)}}$ 至 $\theta_{l_{(n)}}$ 的情形, 結論如下 (詳細推導請參照附錄 A.4):

當 $u = \theta_{l_{(j)}}, j = 1, \cdots, \frac{n-1}{2}$ 時,

$$
\sum_{k=1}^{n} r_{q_k}\theta_{l_{u_k}} = (C - D)\sum_{k=1}^{j-1} r_{q_k} \tag{5.10}
$$

當 $u = \theta_{l_{(j)}}, j = \frac{n+1}{2}, \cdots, n$ 時,

$$\sum_{k=1}^{n} r_{q_k} \theta_{l_{u_k}} = (B - A) \sum_{k=j}^{n} r_{q_k} \tag{5.11}$$

所以若要使得 (5.9) 式滿足, 則 (5.10) 與 (5.11) 式必須皆爲0, 即:

$$\sum_{k=1}^{j-1} r_{q_k} = 0, \forall j = 1, \cdots, \frac{n-1}{2} \tag{5.12}$$

$$\sum_{k=j}^{n} r_{q_k} = 0, \forall j = \frac{n+1}{2}, \cdots, n \tag{5.13}$$

而使得 (5.12) 式、(5.13) 式滿足的唯一解是 $r_{q_1} = r_{q_2} = r_{q_3} = r_{q_4} = \cdots = r_{q_n} = 0$。因此 $\sum_{k=1}^{n} r_{q_k} \theta_{l_{u_k}} = 0 \ \forall u$(即滿足 (5.9) 式) 是不可行的, 所以我們再將條件放寬爲

$$\sum_{k=1}^{n} r_{q_k} \theta_{l_{u_k}} \approx 0, \ \forall u。 \tag{5.14}$$

在 (5.14) 式的條件下, (5.12) 及 (5.13) 式可改寫爲:

$$r_{q_1} \approx 0 \tag{5.15}$$

$$r_{q_1} + r_{q_2} \approx 0 \tag{5.16}$$

$$r_{q_1} + r_{q_2} + r_{q_3} \approx 0 \tag{5.17}$$

$$\vdots$$

$$r_{q_1} + r_{q_2} + r_{q_3} + \cdots + r_{\frac{(n-3)}{2}} + r_{\frac{(n-1)}{2}} \approx 0 \tag{5.18}$$

$$r_{q_n} + r_{q_{n-1}} + r_{q_{n-2}} + \cdots + r_{q_{\frac{(n+1)}{2}}} \approx 0 \tag{5.19}$$

$$\vdots$$

$$r_{q_n} + r_{q_{n-1}} + r_{q_{n-2}} \approx 0 \tag{5.20}$$

$$r_{q_n} + r_{q_{n-1}} \approx 0 \tag{5.21}$$

$$r_{q_n} \approx 0 \tag{5.22}$$

我們建議可透過逐次 (sequential) 控制每一個限制式, 作爲挑選實驗點的方法。首先, 爲了滿足 (5.15) 式, 可選出實驗點 $(r_{l_1}, \theta_{l_{(1)}})$ 及 $(-r_{l_1}, \theta_{l_{(1)}})$, 其中 r_{l_1} 爲根據直交多項式的編碼, 在二次項效應中找最接近 0 的值再對應到一次項效應的值。再來若要滿足 (5.22) 式時, 則可選出實驗點爲 $(r_{l_n}, \theta_{l_{(n)}})$ 及 $(-r_{l_n}, \theta_{l_{(n)}})$, 其中 r_{l_n} 爲根據直交多項式的編碼, 在二次項中找最接近 0 的值爲 r_{q_n}, 再對應到其一次項的值。我們可發現 r_{l_n} 與 r_{l_1} 是在相同規則下找出的實驗點, 故可得到 r_{l_n} 及 r_{l_1} 互爲相反數的推論 (r_{l_1}=$-r_{l_n}$)。故爲滿足 (5.15) 式及 (5.22) 式兩式時, 所選取的 4 個實驗點爲 $(r_{l_1}, \theta_{l_{(1)}})$ 、$(-r_{l_1}, \theta_{l_{(1)}})$ 、$(r_{l_n}, \theta_{l_{(n)}})$ 、$(-r_{l_n}, \theta_{l_{(n)}})$, 其中 $r_{l_1} = -r_{l_n}$。接下來爲了滿足(5.16) 及 (5.21) 兩式時, 所選出的 4 個實驗點爲 $(r_{l_2}, \theta_{l_{(2)}})$ 、$(-r_{l_2}, \theta_{l_{(2)}})$ 、$(r_{l_{n-1}}, \theta_{l_{(n-1)}})$ 、$(-r_{l_{n-1}}, \theta_{l_{(n-1)}})$, 挑法由直交多項式附表中二次項的值, 找出滿足 (5.16) 式的值令爲 r_{q_2}, 在一次項中與之對應的值即爲 r_{l_2} 與 $r_{l_{n-1}}$。其餘實驗點皆由此逐次控制的順序配合直交多項式編碼得到。因爲在奇數水準時, 建模空間會有中心點 (0,0), 我們將會在中心點重複量測一次, 即此時對應到圓上的點重複量測一次, 偶數水準時, 則不在此限。

例 5.2　以實驗點 $n = 14$ 爲例, 佈點步驟如下: 參照直交多項式的編碼, 我們可知當水準數爲 7 時, 其一次項與二次項的編碼分別爲

$$\begin{bmatrix} -3 & 5 \\ -2 & 0 \\ -1 & -3 \\ 0 & -4 \\ 1 & -3 \\ 2 & 0 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}$$

以上第一行爲一次項的編碼 (r_l), 第二行爲二次項的編碼 (r_q)。首先在二次項的編碼中, 找出最接近 0 的值, 因此我們可以得到 r_{q_7} 與 r_{q_1} 皆爲 0, 再找到與其對應的

r_{l_7}爲 -2, r_{l_1} 爲2, 並可得 $-r_{l_7}$爲$2(=r_{l_1})$, $-r_{l_1}$ 爲 $-2(=r_{l_7})$, 因此我們可以得到 4 個點, $(-2,-3)$、$(2,-3)$、$(-2,3)$、$(2,3)$, 如圖5.2(a) 所示; 接著找出滿足 $r_{q_1}+r_{q_2}$ 及 $r_{q_7}+r_{q_6}$ 接近 0 的值, 於是我們可以得到當 r_{q_2} 與 r_{q_6} 爲 -3 時, 會使 $r_{q_1}+r_{q_2}$ 與 $r_{q_7}+r_{q_6}$ 最接近 0, 再找到與之對應的 r_{l_2}, r_{l_6} ($-r_{l_2}$, $-r_{l_6}$), 可得到 4 個點, $(-1,-2)$、$(1,-2)$、$(-1,2)$、(1,2), 加上前述 4 點, 如圖5.2(b) 所示; 再來爲了滿足 $r_{q_1}+r_{q_2}+r_{q_3}$ 及 $r_{q_7}+r_{q_6}+r_{q_5}$ 接近 0, 此時二次項中只剩下 5 跟 -4 , 選擇 5 會讓兩限制式較接近 0, 故選取 r_{q_3} 跟 r_{q_5}, 再找到與其對應的 r_{l_3}, r_{l_5} ($-r_{l_3}$, $-r_{l_5}$), 因此我們可得 4 個點, (3,1)、$(-3,-1)$、$(3,-1)$、$(-3,1)$, 將此4個點加入圖5.2(b) 中, 結果如圖5.2(c) 所示, 最後取 r_{q_4} 爲 4, 並可得與之對應的 r_{l_4} 爲 0, 故 $(r_{l_4}, \theta_{l_{(4)}}) = (0,0)$, 所以我們根據逐步限制所選取的 14 個點, 如圖5.2(d) 所示, 其中中心點 (0,0) 將重覆一次, 代表在圓上時此實驗點需重複量測一次。 □

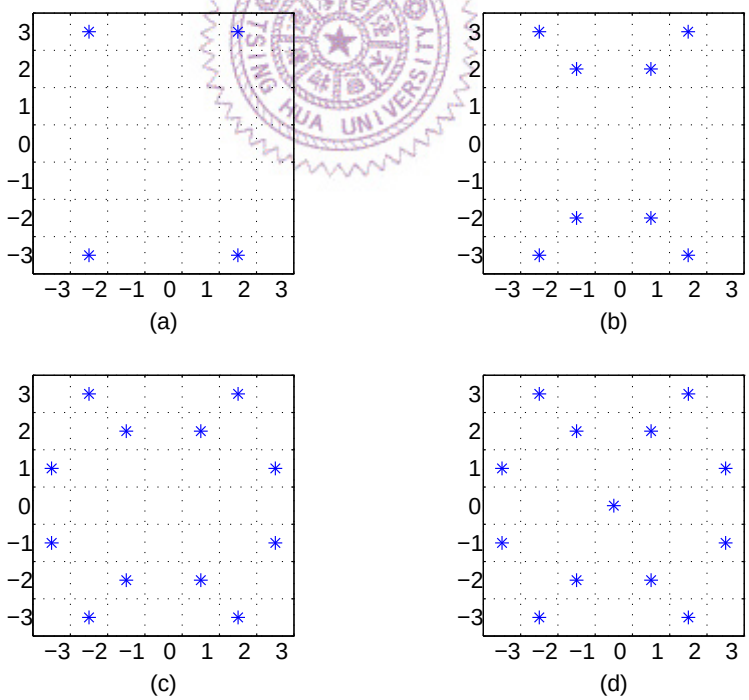

圖 5.2: 正交設計之逐步佈點過程 $(n = 14, s = 7)$

例 5.3　以水準數 (s) 分別爲 6、7、9、10 爲例, 所取的實驗點點如下圖所示, 其中圖 5.3(a) 表示 $s=6$ 時的取點, 圖 5.3(b) 表示 $s=7$ 時的取點, 圖 5.3(c)(d) 分別表示 $s=9$ 及 $s=10$ 時所取的點, 註: 奇數水準 (b),(c) 之中心點需重覆量測一次, 偶數水準則不在此限。 □

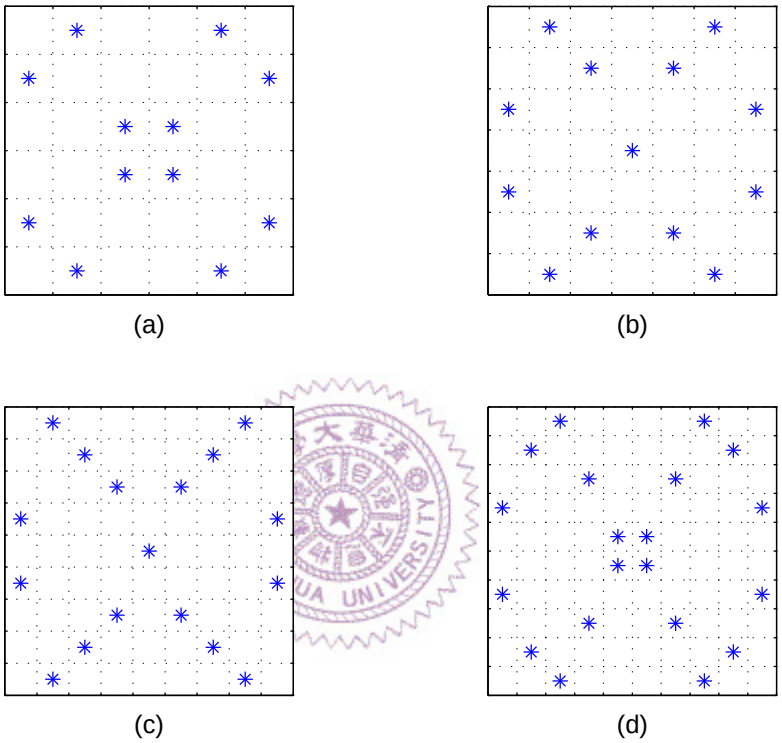

圖 5.3: 正交設計((a)s=6,(b)s=7,(c)s=9,(d)s=10)

對於 5.2.1 節所討論的情形, 即實驗次數等於水準數時, 我們也可放寬線性效應 r_l 與極軸改變後的 θ_{l_u} 效應之正交限制。即將(5.1) 式改寫爲 $\sum_{k=1}^{n} r_{l_k}\theta_{l_{u_k}} \approx 0$, 再參照本節逐次控制的方法, 作爲選取實驗點的依據。但即使如此做也只能讓 r 的線性效應與 θ 的線性效應之間儘量維持正交性, 而未考慮至更高次項。故在 $\boldsymbol{X}_{\boldsymbol{u}}'\boldsymbol{X}_{\boldsymbol{u}}$ 中, 仍然會有許多項不爲 0。