國 立 清 華 大 學

碩士論文

題目: 指定需求集下

多階層實驗的最佳設計

The Best Design of Multistratum Experiment

For Specified Requirement Sets

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:陳錫慧(Shyi-huey Chen)

學　　號:944008

中華民國九十七年六月

摘要

在多階層實驗設計裡, 其主要結構有處理結構、區塊結構, 為了找出處理安排到區塊的法則, 我們在此使用 Patterson 與 Bailey(1978) 所提出的設計鍵, 其主要寫出主效應與區塊效應混同的情況, 且利用設計鍵即可找出設計矩陣。在實驗設計文獻裡, 若要估計實驗者所指定的需求集, 我們可使用 Franklin 與 Bailey(1977) 所發展的一套演算法, 然而該演算法僅適用於估計需求集裡效應之情況, 當有區塊結構時, 其無法找出能精確估計需求集裡效應之設計矩陣。

本篇論文考慮區塊結構為巢狀結構的實驗, 為了能更精確估計需求集裡的效應, 希望能找出讓需求集裡所有效應落入特徵值最小階層的設計鍵。我們提出分群方法並推廣 Franklin 與 Bailey(1977) 所提出的搜尋表法, 來找出能讓需求集裡所有效應落入特徵值最小階層的設計鍵。結果發現, 對於給定的設計鍵, 我們可使用設計鍵的分群與需求集分群間的關係, 來評判該組設計鍵能否讓需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層。我們修改 Franklin 與 Bailey(1977) 所提出的搜尋表, 行改為最後一層區塊效應、列改為處理因子, 且不合格集合除了有不合格定義對比, 還須增加不合格區塊效應, 利用表格及不合格集合發展一套演算法來找出能將需求集裡所有效應落入特徵值最小階層的設計鍵。另外, 我們亦利用需求集的分群方式提出另一套演算法來搜尋能將需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之設計鍵。不論使用搜尋表法或是分群法, 其結果皆可直接找出讓需求集裡所有效應落入特徵值最小階層的設計鍵。其次, 為了評判設計鍵的優劣, 我們結合 Ke 與 Tang(2003) 所提出 minimun N-aberation以及 Cheng 與 Wu(2002) 所提出選取最佳區塊設計的方法, 發展出一套方法來評判設計鍵的優劣, 並利用該評判設計鍵的準則提出一套可直接找到最佳設計鍵的演算法。

謝誌

本篇論文得以順利完成, 首先要感謝恩師 鄭少為教授悉心指導。在研究方向的導正與指引, 老師無一不煞費苦心, 殷殷指導, 在此向老師獻上我最由衷的敬意與謝忱。感謝我的研究伙伴, 在我遇到問題時, 都會提供他們的寶貴意見, 同時也感謝給予我論文口試意見的同學。感謝我的家人, 在我遇到困難時給我的鼓勵。最後要將此文獻給所有關心我的人。

目錄

表目錄

圖目錄

第 1 章
緒論

在實驗設計發展方面, 最早出現最簡單的架構-完全隨機化設計 (completely randomized design), 該設計方式是利用隨機化的技巧來使額外未知變數的影響儘可能降到最低; 然而為了確保實驗結論不受沒有興趣的變數影響並增加估計的精確度, 之後發展了隨機集區化設計 (randomized block design), 在此種設計中, 很明顯的出現兩種基本結構-實驗的區塊 (plot) 結構與處理 (treatment) 結構, 此時可利用 Patterson 與 Bailey(1978) 所提出設計鍵 (design key) 的方式來將處理安排到區塊。然而當實驗者已指定要估計某些處理效應, 亦即 Greenfield(1977) 所定義的需求集 (requirement set), 若處理結構為部分因子設計, 則可使用 Franklin 與 Bailey(1977) 所發展的一套演算法, 利用該演算法即能得到可估計需求集裡所有的效應之定義對比子群 (defining contrast group)。然而 Franklin 與 Bailey(1977) 所提出的演算法並未論及需求集裡的效應之估計精確度問題。在多階層 (multi-stratum) 實驗裡, 因為區塊結構的出現, 會產生不同的階層, 而落在不同階層裡的效應估計式會有不同的精確度, 為了將需求集裡所有的效應精確度提升, 我們希望找出能將需求集裡所有的效應落到特徵值 (eigenvalue) 最小階層的設計鍵。

舉例來說, 若實驗者想研究 5 個 2 水準因子對產出的影響, 此時的實驗有 5 個 2 水準因子之處理結構, 然而當實驗環境為 2 間工廠, 每間工廠有 2 台機器, 每台機器裡有 4 個操作員, 此時出現了 2/2/4 的巢狀區塊結構, 結合了處理結構與區塊結構即形成多階層實驗。該實驗總共有 16 個維度, 我們將其拆解成 4 個子空間, 且每個子空間裡具有相同變異數, 對於落入不同階層的處理效應, 其估計處理效應的變異數則不同, 關於此

例更詳細的介紹, 請見下一章的例子2.2。而本文主要探討如何將需求集裡的效應安排到精確度較高的階層裡。

本篇論文主要針對區塊結構為巢狀 (nesting) 且處理結構皆為2水準因子, 對於給定設計鍵, 我們可計算不同的處理效應會落到哪一個階層, 接著判斷需求集裡所有的效應是否落到特徵值最小階層。然而要對所有不同的設計鍵執行此種計算, 將會過於繁雜, 因此本論文中, 我們希望發展出快速判斷哪些設計鍵能讓需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層的方法。其次我們亦希望能發展一套準則來評判設計鍵。我們將提出演算法來直接找到可使得需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層的設計鍵, 另亦將依照評斷設計鍵的準則提出可直接找到最佳設計鍵之演算法。本文主要將提出兩種分群的方式來解決上述的問題, 該兩種分群方式為設計鍵的分群與需求集的分群, 利用設計鍵的分群與需求集分群間的關係來評判哪些設計鍵能將需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層, 並利用需求集分群來搜尋能將需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之設計鍵, 以及利用評斷設計鍵的準則與需求集分群來搜尋出最佳設計鍵。

本文將在第2章介紹以往的文獻中, 在無區塊結構下, 如何找出合適的定義對比子群, 使得需求集裡所有的效應皆可被估計, 接著引入區塊結構並介紹多階層實驗設計, 最後介紹選取最佳設計的準則。第3章將介紹本文主要的新方法-分群技巧, 利用設計鍵分群與需求集分群, 便能判斷給定的設計鍵是否合格, 另亦將介紹其他關於分群技巧的應用。第4章將提出區塊結構的優先順序, 且在考慮不同階層與不同效應的重要程度下, 發展出選取最佳設計鍵的準則, 第5章結合第3章及第4章想法, 提出可直接得到合格的與最佳的設計鍵之演算法, 第6章對本篇研究做總結。

第 2 章
文獻探討

2.1 選取2^{n-m}定義對比子群

Greenfield(1975) 把實驗者希望估計的效應所形成的集合稱為需求集 (requirement set); 而會造成需求集裡的效應互相別名的定義對比則稱為不合格的 (ineligible) 定義對比。在2^{n-m}設計中,Das(1964) 把$n-m$個構成全因子設計的因子稱為基礎因子 (basic factor), 剩下m個因子稱為額外因子 (added factor)。

為了花費最少成本估計需求集的效應, 故在2^{n-m}的設計裡必須選取一個m的上界, Greenfield(1976) 提出需求集裡的個數不可小於自由度, 故$m \leq n - \log_2(R+1)$, 其中R為需求集裡效應的個數; 另一種決定上界的方法由 Franklin(1985) 提出最大在不合格效應 (ineligible effects) 所形成的次序 (order) 小於或等於2^k, 其m的上界值為$n-k$。

對2^{n-m}部分因子設計, Greenfield(1976) 提出了一套演算法來找出合格的定義對比, 但該運算對於混同設計 (confounded design) 無法適用, 而 Franklin 與 Bailey(1977) 發展另一套演算法解決混同的問題, 其運算步驟如下:

步驟**1:** 選取m的起始值。

步驟**2:** 選取一組 (新的)m個基礎因子; 若無法選取, 則到步驟十。

步驟**3:** 形成$2^{n-m} \times m$的表格, 其中列為基本效應 (basic effects)B_i、行為增加因子A_j, 並於表格內形成合格的B_iA_j。

表 2.1: 搜尋表

	額外因子	
基礎效應	D	E
I	-	-
A	-	-
B	-	-
C	-	-
AB	-	-
AC	ACD	ACE
BC	BCD	-
ABC	ABCD	ABCE

步驟4: (搜尋定義對比) 定義對比子群以$G(j)$表示,$j \leftarrow 0$;$G(0) \leftarrow I$。

步驟5: (下一行)$j \leftarrow j+1$;$i(j) \leftarrow 0$。

步驟6: (第j行的下一個元素) 若$i(j) = 2^{n-m}$, 至步驟九; 其餘$i(j) \leftarrow i(j)+1$。

步驟7: (檢查元素是否合適) 檢查是否所有$B_iA_jD_k$為合適的, 其中D_k為定義對比子群$G(j-1)$的所有元素; 若找出$B_iA_jD_k$不合適, 回到步驟六。

步驟8: (完整的設計) 若$j < m$, 回到步驟五; 其餘回到步驟六。

步驟9: (回到前一行) 若$j > 1$, 則$j \leftarrow j-1$並回到步驟六; 其餘回到步驟二。

步驟10: (增加實驗個數) 若合適的設計已經發現, 則停止搜尋; 其餘將$m \leftarrow m-1$並回到步驟二。

例子2.1(部分因子設計): 對於一個2^{5-m}設計且其需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AB, BE\},$$

基於成本考量下利用 Greenfield(1976) 選取m為2, 其不合適定義對比集合為所有主效應、2階交互項、ABC, ABD, ABE, BCE, BDE, 又由於A、B、C可形成不合適集

合, 故將A、B、C當成基礎因子、D與E當成額外因子, 其所形成表格如表2.1。第一行 G(0)=I, 當第二行選 G(1)=ACD 時, 第三行所選的任一個合適效應會造成與 G(1) 相乘形成不合適的; 在第二行選 G(1)=BCD 時, 第三行合適效應與 G(1) 相乘為合適的, 故可找出讓需求集所有效應皆可估計的定義對比為 I=BCD=ACE=ABDE 或 I=BCD=ABCE=ADE。

2.2　多階層實驗設計

一個多階層實驗擁有處理結構與區塊結構, 常見的區塊結構有巢狀與交叉 (crossing) 結構, 以下我們用"/"表示巢狀結構、"×"表示交叉結構, 最簡單巢狀結構為B_1/B_2, 其所指的是在每個區塊類別1裡有區塊類別2, 若區塊類別1有n_1個、區塊類別2有n_2個, 則該區塊結構可表示為n_1/n_2。比如若某實驗將在8間工廠內執行, 且每間工廠將採用4台機器來執行實驗, 則工廠為區塊類別1, 機器為區塊類別2, 該區塊結構可表示為8/4。在分析上, 區塊結構會將n_1n_2維的數據空間分割成不同維度的子空間, 這些子空間被稱為階層 (stratum), 而每一個階層的維度亦可稱為該階層的自由度。利用 Nelder(1964) 可得知對n_1/n_2區塊結構, 其共可切割成3個階層, 每一個階層自由度的算法可利用

$$n_1n_2 \equiv 1 + v_1 + n_1v_2,$$

其中$v_i = n_i - 1$。最簡單交叉結構為$B_1 \times B_2$, 其所指的是有兩個區塊類別為交叉關係, 若集區類別1有n_1個、集區類別2有n_2個, 亦即$n_1 \times n_2$, 則每一個階層自由度的算法可利用

$$n_1n_2 \equiv 1 + v_1 + v_2 + v_1v_2,$$

又 Nelder(1964) 將巢狀與交叉函數定義為

$$N(n_1, n_2) = 1 + v_1 + n_1v_2,$$

且

$$C(n_1, n_2) = 1 + v_1 + v_2 + v_1v_2,$$

對於其他更複雜區塊結構的自由度可從N與C函數展開, 舉例來說, 對於$n_1/n_2/n_3$的自由度可由$N(N(n_1,n_2),n_3)$展開所得到, 其展開後所得到自由度代表一個階層, 且每一個階層裡具有相同特徵值, 此時處理效應會隨著處理安排到區塊的方式不同而落入不同階層, 又不同階層裡有不同的特徵值, 且其特徵值與效應估計式之變異數大小相關, 因此落入不同階層的處理效應之估計式精確度會有所不同, 亦即落入特徵值小的階層之效應估計式的變異數會較小, 關於多階層實驗更詳細內容可參閱 Nelder(1965)。

假設有n個區塊因子 (plot factor)$P_1,\ldots,P_n$, 因子P_j有p_j個水準, 且我們可將$p_1\ldots p_n$拆解成$\theta_1^{\tau_1}\ldots\theta_k^{\tau_k}$, 其中$\theta_1,\ldots\theta_k$可為不同的質數 (prime number), 由於τ_1個θ_1水準因子,$\ldots$,τ_k個θ_k水準因子為實驗者不感興趣的因子, 故將其稱為虛假因子 (pseudo factor), 例如4個水準的區塊因子X可拆解成2個2水準的虛假因子X_1,X_2。階層辨識是由區塊因子形成字的組合所構成, 將每一層階層辨識拆解成虛假因子所形成的效應我們將其稱之為第j層區塊效應。例如區塊結構為X/Y, 利用 Nelder(1964) 的自由度得知不包含平均數會有2個階層, 階層辨識為X,XY, 且X,XY若以虛假因子表示, 則將其X拆解成虛假因子, 並將其所造成效應稱為第1層區塊效應, 同理虛假因子所造成有關XY效應稱為第2層區塊效應; 若區塊結構為$U\times V$, 則利用 Nelder(1964) 的自由度得知不包含平均數會有3個階層, 以區塊因子表示為U,V,UV。

假設有m個處理因子$T_1,\ldots,T_m$, 因子T_i有t_i個水準。當我們將處理安排進區塊時, 處理效應會與區塊效應混同 (confounded), 我們稱該處理效應混同的區塊效應為區塊別名 (plot alias), 而設計鍵所指的是處理因子的主效應 (main effects) 的區塊別名。而與虛假因子互為別名的處理效應稱之為反鍵 (inverse key), 利用反鍵我們可建構出設計矩陣 (design matrix)。為了了解處理效應所落的階層為何, 首先, 我們須先分解每一個階層的區塊效應, 使得該區塊效應以虛假因子表示。接著利用所得到一組設計鍵去發現其他處理效應的區塊別名, 由所得到區塊別名我們可得知該處理效應所屬的階層為何。

本文主要研究巢狀區塊結構, 假設其結構為$B_1/B_2/\cdots/B_k$, 且在區塊1(B_1) 裡有n_1個區塊,$\ldots$, 區塊$k(B_k)$ 裡有n_k個區塊, 亦即區塊結構為$n_1/n_2/\cdots/n_k$, 其所代表意義為第1層所需執行之區塊個數有n_1個、n_2代表在每一個第1層區塊下執行的個數

、n_3代表在每一個第1層及第2層區塊 (總共有n_1n_2個區塊) 下執行的個數、...、n_k代表在每一個第1層至第$k-1$層區塊 (總共有$n_1n_2\cdots n_{k-1}$個區塊) 下執行的個數, 在此為了討論方便, 我們假設$n_1,\ldots,n_k$皆為2的冪次方。在巢狀區塊結構下, 利用 Nelder(1964) 自由度算法, 得知第j層自由度為$n_1n_2\cdots n_{j-1}(n_j-1)$。任意兩個觀察值的變異數如下:

$$cov(Y_\alpha,Y_\beta)=\begin{cases}\sigma^2 & \text{如果}\alpha=\beta,\\ \rho_1\sigma^2 & \text{如果}\alpha\text{與}\beta\text{在第1層至第}k-1\text{層皆位於相同的區塊,}\\ & \text{但第}k\text{層位於不同區塊,}\\ \rho_2\sigma^2 & \text{如果}\alpha\text{與}\beta\text{在第1層至第}k-2\text{層皆位於相同的區塊,}\\ & \text{但在第}k-1\text{層位於不同區塊,}\\ \vdots & \\ \rho_{k-1}\sigma^2 & \text{如果}\alpha\text{ 與}\beta\text{ 在第一層即位於不同的區塊.}\end{cases}$$

而每一階層的特徵值, 我們以符號ξ_i表示, 每一層的特徵值為

$$\xi_i=f(\sigma^2,\rho_1,\ldots,\rho_{k-i}),$$

因為在文獻中常假設$\rho_1>\rho_2>\cdots>\rho_{k-1}$, 故$\xi_1>\xi_2>\cdots>\xi_k$, 亦即在越底層特徵值越小, 此時落入越底層的效應, 其估計式的變異數越小, 則其參數可被更精確地估計。關於此更詳細的介紹, 請見 Bailey(2008)。

例子2.2: 區塊結構為$2/2/4(X/Y/Z)$, 利用 Nelder(1964) 的方法計算各階層的自由度

$$N(N(n_1,n_2),n_3)=1+\upsilon_1+N(n_1,n_2)\upsilon_2,$$

其中$\upsilon_1=N(n_1,n_2)-1,\upsilon_2=n_3-1$, 且$N(n_1,n_2)=1+(n_1-1)+n_1(n_2-1)$, 故

$$N(N(n_1,n_2),n_3)=1+(n_1-1)+n_1(n_2-1)+n_1n_2(n_3-1),$$

將$n_1=2,n_2=2,n_3=4$代入, 得知第1層自由度$n_1-1=1$、第2層自由度$n_1(n_2-1)=2$、第3層自由度$n_1n_2(n_3-1)=12$。接著我們將區塊因子拆解成虛假因子, 以

表 2.2: 不同階層所落入處理效應

階層	自由度	處理效應
S_1	1	BC
S_2	2	BD,CD
S_3	12	A,B,C,D,E,AB,AC,AD,AE,BC,CE,DE

第3層$n_3 = 4$為例, 因$n_3 = 4$不屬於質數而$n_3 = 2^2$, 故第3層虛假因子為Z_1, Z_2, 同理可得知第1層虛假因子為X、第2層虛假因子為Y, 且其階層辨識為X, XY, XYZ, 利用虛假因子, 我們可得知第1層區塊效應為X、第2層區塊效應為Y, XY、第3層區塊效應為

$$Z_1, Z_2, Z_1Z_2, XZ_1, XZ_2, XZ_1Z_2, YZ_1, YZ_2, YZ_1Z_2, XYZ_1, XYZ_2, XYZ_1Z_2.$$

注意每一個階層裡區塊效應的個數與該層的自由度是一致的。

若處理結構為5個2水準因子, 其一組設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = YZ_2, D = XZ_2, E = XYZ_1Z_2,$$

則反鍵為

$$Z_1 = A, Z_2 = B, Y = BC, X = BD, I = ABCDE,$$

由設計鍵我們得知

$$DE = (XZ_2)(XYZ_1Z_2) = YZ_1,$$

因YZ_1屬於第3層, 故DE會落到第3層, 同理我們可得知各處理效應所落的階層如表2.2。其中落在S_3階層的處理效應, 一般認定其估計式的變異數會較落在其他兩個階層的處理效應更小, 故在該階層的處理效應可被更精確地估計。

2.3　選取好的設計準則

2.3.1　Minimum N-Aberration

利用 Franklin 與 Bailey(1977) 可能得到多組定義對比子群, 由於需求集裡有某些2階交互項, 故利用 minimum aberration來評估這些定義對比子群的優劣顯然不適

用。為了評估由 Franklin 與 Bailey(1977) 演算法所得到的定義對比子群, 故 Ke 與 Tang(2003) 提出 minimum N-aberration。一個2^{m-p}的設計假設A_i為定義關係 (defining relation) 裡定義對比之長度的個數為i, 當某一些2階交互項落入需求集裡, 其配適模型為

$$Y = \beta_0 I + \omega_1\gamma_1 + \varepsilon, \tag{2.1}$$

其中γ_1是所有主效應與部分2階交互項的參數向量, 而ω_1是相對應效應參數值, 然而真實模型為

$$Y = \beta_0 I + \omega_1\gamma_1 + \omega_2\gamma_2 + X_3\beta_3 + \ldots + X_m\beta_m + \varepsilon, \tag{2.2}$$

其中γ_2是剩下2階交互項的參數向量、ω_1 是相對應效應參數值,X_i為i階交互項的參數向量, 由2.1式與2.2式得知

$$bias(\hat{\gamma_1}, \gamma_1) = P_2\gamma_2 + P_3\beta_3 + \ldots + P_m\beta_m,$$

其中$P_2 = n^{-1}\omega_1^T\omega_2$、$P_j = n^{-1}\omega_1^T X_j$對於$j \geq 3$。令$N_j = \|P_j\|^2$, 為了降低偏誤 (bias) 的值且希望將越低階效應偏誤降低, 故 minimum N-aberration依序將N_2、N_3、N_4、...最小化。

2.3.2　隨機集區化設計準則

在 Cheng 與 Wu(2002) 將定義對比區分成處理部分與區塊部分。當定義對比只牽涉處理部份, 其定義對比稱為純粹型 (pure-type words); 當定義對比牽涉處理與區塊部份, 其定義對比稱為混合型 (mixed-type words)。對於一個設計D,$A_{i,0}$定義為在純粹型字長為i的處理部分定義對比之個數, $A_{i,1}$為在混合型字長$i+1$的區塊部份之定義對比的個數, 處理字長型態 (treatment wordlength pattern) 定義為

$$W_t(D) = (A_{3,0}, A_{4,0}, A_{5,0}, \ldots);$$

集區字長型態 (block wordlength pattern) 定義為

$$W_b(D) = (A_{2,1}, A_{3,1}, A_{4,1}, \ldots).$$

一個設計D的定義對比, 若其字長型態向量(wordlength pattern vector) 為

$$(l_1(D), l_2(D), l_3(D), \ldots),$$

對於兩種設計D_1, D_2, 假設r使得$l_r(D_1) \neq l_r(D_2)$的最小值 ,若$l_r(D_1) < l_r(D_2)$,則稱D_1為 less aberration。若沒有其他設計比D_*有less aberration, 則稱D_*有minimum aberration。

選取集區因子設計需考慮純粹型與混合型, 在純粹型裡

$$ttt \ll tttt \ll ttttt \ll tttttt \ll \ldots$$

在混合型裡, 需考慮集區的部份, 當集區定義對比 (block defining contrast) 為ttb時, 估計的時候只需犧牲一個2階交互項, 而$tttt$卻需犧牲3個2階交互項, 因此$ttt \ll tttt \ll ttb$; 當集區定義對比為$tttb$時, 估計的時候只需犧牲一個3階交互項, 而$tttttt$卻需犧牲10個2階交互項, 因此$tttttt \ll tttb$。以相同方式建構, 故可得到

$$ttt \ll tttt \ll ttb \ll ttttt \ll tttttt \ll tttb \ll ttttttt \ll \ldots.$$

所以字長型態表示為

$$W_1(D) = (A_{3,0}(D), A_{4,0}(D), A_{2,1}(D), A_{5,0}(D), A_{6,0}(D), A_{3,1}(D), \ldots)$$

並使用 minimum aberration 準則比較字長。

2.3.3　比較準則

在有需求集而不考慮區塊結構的情況下, 我們可使用 Ke 與 Tang(2003) 所提出 minimum N-aberation的準則來評估一個設計的優劣, 該準則的建構主要考量處理效應互為別名且其如何受到需求集的影響。在無需求集而有簡單區塊的結構的情況下, 我們依照 Cheng 與 Wu(2002) 所提出字長順序來評斷一個設計的優劣, 該準則的建構主要考量處理效應互為別名以及處理效應與區塊效應混同的情形, 但其不考慮處理效應互為別名如何受到需求集的影響。然而在多階層實驗裡, 目前尚未有文獻對於有需

求集且有複雜區塊結構的情況去評估一個設計的優劣, 故本文在第 4 章針對此種情況發展一套評估設計鍵的準則, 且該準則考量了處理效應互為別名、處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度。

第 3 章
分群結構

在完全因子設計中每一個效應皆可估計, 但由於成本、時間因素之限制, 使得實驗只能執行部分因子設計時, 因自由度不足故僅能估計部份效應。此時若實驗者提出某個需求集, 並希望能建構使得此需求集中所有的效應皆可估計的部份因子設計, 則我們可應用 Franklin 與 Bailey(1977) 提出的一套演算法來得到合適的定義對比子群以建構部份因子設計。然而該論文中並未考慮估計式之精確度的情況。在多階層實驗裡, 每一個效應的估計式之精確度會隨著其所落之階層不同而不同, 因此我們不僅希望能估計需求集內的每一個效應, 還希望需求集的效應估計式越精確越好, 亦即其變異數越小越好。本章介紹分群的概念, 並針對最後一層的區塊效應進行分群, 讓需求集落到特徵值最小的階層, 且利用分群概念依照不同的目的在第5章發展出一套演算法。

3.1 分群種類

3.1.1 設計鍵分群

在多階層實驗中, 假設區塊結構為巢狀, 我們使用$n_1/n_2/\cdots/n_k$來代表, 其中n_1代表第1層所需執行之區塊個數、n_2代表在每一個第1層區塊下執行的個數、n_3代表在每一個第1層及第2層區塊 (總共有n_1n_2個區塊) 下執行的個數、$\ldots$、n_k代表在每一個第1層至第$k-1$層區塊 (總共有$n_1n_2\cdots n_{k-1}$個區塊) 下執行的個數, 在此為了討論方便, 我們假設$n_1,\ldots,n_k$皆為2的冪次方。我們沿用 Patterson 與 Bailey(1978) 的方法, 將區塊結構$n_1/n_2/\cdots/n_k$以因子來表示, 在區塊結構裡我們可有$\log_2 n_1n_2\cdots n_k$個虛假因子, 由虛假因子所形成效應, 我們稱之為區塊效應; 又第i層可分解成$\log_2 n_i$個虛假因子, 我們將第i層的虛假因子所形成效應稱之為第i層區塊成份 (plot component)。在處理結構方面我們假設有m個2水準因子。設計多階層實驗的方法-設計鍵, 其方法是利用處理因子與區塊效應混同, 我們將此區塊效應稱之為混同區塊效應 (confounded plot effect)。對於設計鍵中混同區塊效應部分, 將其分解成不同階層的區塊效應, 以符號表示如下:

$$A_i = U_{1i}U_{2i}\cdots U_{k-1i}V_i,$$

其中A_i表示處理結構裡的某因子, U_{ji}表示第i個處理因子的混同區塊效應中屬於第j層的部份、V_i表示第i個處理因子的混同區塊效應中屬於第k層的部份, 且U表示非特徵值最小階層的區塊效應, V表示特徵值最小階層的區塊效應。若$V_i \neq I$, 表示A_i在每一個最小的區塊內皆可估計; 若$V_i = I$且令j^*為最大的j使得$U_{ji} \neq I$, 則表示A_i在第$j^* - k + 3$小的區塊內皆可估計。

例子3.1: 在例子2.2中, 區塊結構為$2/2/4(X/Y/Z)$, 在第1層虛假因子為X、第2層虛假因子為Y、第3層虛假因子為Z_1, Z_2, 利用虛假因子, 我們可得知第1層區塊成份為X、第2層區塊成份為Y、第3層區塊成份為Z_1, Z_2, Z_1Z_2。若有一組設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = YZ_2, D = XZ_2, E = XYZ_1Z_2,$$

則A,B,C,D,E因子的混同區塊效應分別為Z_1、Z_2、YZ_2、XZ_2、XYZ_1Z_2, 而因為E因子的混同區塊效應為XYZ_1Z_2, 其中X為第1層的區塊成份、Y為第2層區塊成份、Z_1Z_2為第3層區塊成份, 故$U_1 = X$、$U_2 = Y$及$V = Z_1Z_2$; 同理, 我們可將A因子的混同區塊效應拆解成$U_1 = I$、$U_2 = I$、$V = Z_1$, 其中$U_1 = I, U_2 = I$代表沒有第1層與第2層區塊成份; B因子的混同區塊效應拆解成$U_1 = I$、$U_2 = I$、$V = Z_2$; C因子的混同區塊效應拆解成$U_1 = I$、$U_2 = Y$及$V = Z_2$; D因子的混同區塊效應拆解成$U_1 = X$、$U_2 = I$及$V = Z_2$。因為$A = Z_i$, 亦即$V_i \neq I$, 表示主效應A在每一個最小區塊內皆可估計, 同理,B, C, D, E亦在每一個最小區塊內皆可估計。

我們在這篇論文內提出一個處理因子分群 (factor grouping) 的新技巧, 其可幫助我們快速篩選並除掉不合格的設計鍵。第j層處理因子分群指的是將在一組設計鍵裡的m個處理因子, 每個因子我們都拆解成$A_i = U_{1i}U_{2i}\cdots U_{k-1i}V_i$, 在這$m$個處裡因子中混同區塊效應的第$j$層區塊成份 ($U_{ji}$) 相同的處理因子將其歸類為一個集合, 同理, 將V_i相同的因子歸類為一個集合, 稱為第k層處理因子分群。對於一組設計鍵所得到每一層分群結果, 以數學式表示如下:

第1層到第$k-1$層分群

$$C_{j1} = \{A_i | U_{ji} = U^*_{j1}\},$$

$$C_{j2} = \{A_i | U_{ji} = U^*_{j2}\},$$
$$\vdots$$
$$C_{jd_j} = \{A_i | U_{ji} = U^*_{jd_j}\}.$$

第k層分群

$$C_{k1} = \{A_i | V_i = V^*_1\},$$
$$C_{k2} = \{A_i | V_i = V^*_2\},$$
$$\vdots$$
$$C_{kd_k} = \{A_i | V_i = V^*_{d_k}\},$$

其中d_j表示第j層可分群體數, 我們將設計鍵在第i層所得到分群結構稱之為第i層分群型態 (grouping pattern)。

例子3.2: 在例子2.2中, 有一組設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = YZ_2, D = XZ_2, E = XYZ_1Z_2,$$

將設計鍵以第3層分群型態為例,A因子混同區塊效應V的部份屬於Z_1, B, C, D因子混同區塊效應V的部份屬於Z_2,E因子混同區塊效應V的部份屬於Z_1Z_2 , 故依照第3層分群型態, 其處理因子分群結果為$\{\{A\}, \{B, C, D\}, \{E\}\}$。

3.1.2　需求集分群

將某個效應的混同區塊效應可分解成不同階層的區塊效應, 亦即

$$t = U_1U_2 \cdots U_j \cdots U_{k-1}V,$$

若$V \neq I$, 則處理效應t會落在第k層; 若$V = I$且令j^*為最大j使得$U_j \neq I$, 則處理效應t會落到第j^*層。為了找出實驗者已指定需求集落在特徵值最小階層的設計鍵, 我們利用最後一層的區塊效應$V \neq I$的方式來建構分群。舉例來說, 當需求集為

$$R = \{A_1, ..., A_m\} \bigcup \{A_iA_j | 1 \leq i, j \leq m, i, j \in N\},$$

假設$A_i = U_iV_i, i = 1, ...m$, 則$A_iA_j = U_iU_jV_iV_j$, 為了將需求集裡所有的效應落到特徵值最小的階層, 則必須滿足$V_i \neq I$且$V_iV_j \neq I$; 因為$V_iV_j \neq I$, 所以$V_i \neq V_j$, 亦即因子A_i與A_j在處理因子分群第k層區塊成份必須落在不同的集合裡。

利用需求集將因子設計鍵中第k層區塊成份可相同者放於同一個集合裡, 第k層區塊成份不可相同者將其處理因子放於不同集合裡, 最後得到該m個處理因子應有分群型態, 我們稱為第k層限制型態 (restricted pattern); 在第k層限制型態裡任意因子所形成集合, 我們將此集合稱之為群體。在第k層限制型態取群體個數最小者, 稱為第k層最小限制型態, 而第k層最小限制型態不具唯一性, 舉例來說, 若需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AD, AE, BD, BE, CE, DE\},$$

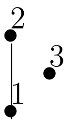
由需求集我們可得到第k層最小限制型態有2種情況, 其第k層最小限制型態為

$$\{\{A, B\}, \{C, D\}, \{E\}\}\text{或}\{\{A, B, C\}, \{D\}, \{E\}\}$$

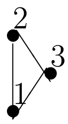
利用第k層最小限制型態, 我們可判斷哪些設計鍵可將需求集裡的所有效應落到特徵值最小的階層, 若第k層最小限制型態包含於一組設計鍵中第k層分群型態裡, 其代表著該組設計鍵第k層分群型態必滿足第k層最小限制型態之分群方式, 故此組設計鍵可將需求集裡的所有效應落到特徵值最小的階層。另外, 我們還可以利用第k層最小限制型態之群體數, 判斷哪些區塊結構一定存在設計鍵, 使得需求集裡的所有效應落到特徵值最小階層, 其定理為第k層最小限制型態之群體個數, 必須小於或等於不包含I的第k層區塊成份之個數, 詳細證明在本章3.3.2裡。

為了清楚找出哪幾個處理因子可在同一個群體、哪幾個因子必定不能在同一個群體裡, 對於需求集僅有主效應及2階交互項, 我們可利用圖論方式來找出第k層最小限制型態, 首先先將未落在需求集裡的2階交互項寫出, 以點代表因子、線代表未落在需求集裡的2階交互項; 由於線代表未落在需求集裡的2階交互項, 故當因子之間有線的連結時, 代表著此兩個處理因子可落於同一個群體裡, 當因子與因子間沒有線, 代表著此兩個處理因子必定不可落於同一個群體裡。由於因子之間有線的連結代表著此兩個處理因子可落於同一個群體裡, 故若在圖論中呈現一個封閉多邊形時, 我們即可將這些因子分於同一個群體裡, 因此在圖一情況, 將1,2分成同一群、3分成另一群; 在圖二情況, 將1,2,3分成同一個群體。當圖論顯現出皆為多個封閉的多邊形時, 由於第k層最小限制型態須取群體個數最少, 分群結構也僅能取封閉多邊形上的點為一個群體, 故其

第k層最小限制型態在此種狀況之取法具唯一性。利用圖論我們可得知第k層最小限制型態, 若第k層最小限制型態包含於第k層分群型態裡, 其代表著該組設計鍵能將需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層裡。

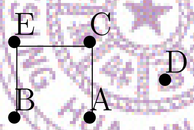


圖一: 圖論



圖二: 圖論

例子3.3: 當需求集為$\{A, B, C, D, E, AB, AD, AE, BC, BD, CD, DE\}$且實驗者希望將需求集裡所有效應落入特徵值最小的階層, 因此我們須由需求集找出第k層限制型態。由於AB、AD、AE在需求集裡, 所以A不能與B, D, E同一群; 因BC、BD在需求集裡, 所以B不亦能與 C,D 同一群; 因CD在需求集裡, 所以 C 亦不能與 D 同一群; 因DE在需求集裡, 所以 D 亦不能與 E 同一群。由於AC, CE, BE沒有在需求集合裡, 利用圖論方式我們可得到圖三, 由圖三得知第k層最小限制型態須分成3群, 其第k層最小限制型態僅有1種情況, 其分群結構為$\{\{A, C\}, \{B, E\}, \{D\}\}$, 若一組設計鍵的第$k$層分群型態為$\{\{A\}, \{C\}, \{B, E\}, \{D\}\}$, 由於第$k$層最小限制型態包含在此設計鍵的第$k$層分群型態裡, 故此組設計鍵可讓需求集落入特徵值最小的階層裡。



圖三: 圖論

若需求集有部分2階交互項以及部分3階交互項

$$R = \{A_1, ..., A_m\} \bigcup \{A_iA_j | 1 \le i, j \le m, i, j \in N\} \bigcup \{A_pA_qA_r | 1 \le p, q, r \le m, p, q, r \in N\},$$

首先, 觀察3階交互項$A_pA_qA_r = U_pU_qU_rV_pV_qV_r$, 當在3階交互項裡的因子任取兩個因子形成2階交互項都不在需求集裡, 故需滿足$V_iV_j \neq I$及$V_pV_qV_r \neq I$, 因此第k層最小限制型態為$A_i \in C_i, A_j \in C_j, A_p, A_q, A_r \in C_p$; 當在3階交互項裡的因子有部份兩個因子形成2階交互項在需求集裡, 假設$i = p$、$j = q$ 除了需要$V_pV_qV_r \neq I$條件, 還需增加存在2階交互項V的部份需滿足$V_iV_j \neq I$, 因此第k層最小限制型態為$A_p, A_r \in C_p, A_q \in C_q$; 當在3階交互項裡的因子有全部任兩個因子形成2階交互項都在需求集裡, 除了$V_pV_qV_r \neq I$, 還必須對所有$i, j = p, q, r$滿足$V_iV_j \neq I$, 因此第k層最小限制

型態為$A_i \in C_i, A_j \in C_j, A_k \in C_k$且還須考慮$V_iV_jV_k \neq I$。

當需求集需落到特徵值最小的階層, 綜合上述第k層最小限制型態, 我們可歸納出以下的結果:

(i)$R = \{A_1, ..., A_m\} \bigcup \{A_iA_j | i, j \in [1, m], i, j \in N\}$, 則$A_i \in C_i$、$A_j \in C_j$。

(ii)$R = \{A_1, ..., A_m\} \bigcup \{A_iA_j | (i, j) \in [1, m], i, j \in N\} \bigcup \{A_pA_qA_r | p, q, r \in [1, m], p, q, r \in N\}$, 當$A_sA_t \neq A_iA_j$對於$s, t = p, q, r$時, 則$A_i \in C_i$、$A_j \in C_j$、$A_p, A_q, A_r \in C_p$; 當$i = p, j = q$時, 則$A_p, A_r \in C_p, A_q \in C_q$; 當3階交互項裡的因子有全部任兩個因子形成2階交互項都在需求集裡, $A_i \in C_i, A_j \in C_j, A_k \in C_k$且還須考慮$V_iV_jV_k \neq I$。

3.2 處理因子數小於或等於虛假因子數

3.2.1 落入最後一層之處理效應及其個數

以下我們先使用一個例子來解釋本節所要談論的主題, 在區塊結構為$2/2/4(X/Y/Z)$、處理結構為4個2水準因子時, 若令設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = YZ_2, D = XZ_1Z_2,$$

因為所有主效應的混同區塊效應皆包含Z的區塊效應, 故所有主效應皆會落在第3層, 但對於2階交互項或是更高階交互項的處理效應我們需計算出其混同區塊效應, 再利用所計算出的混同區塊效應判斷該處理效應是否落在第3層, 例如

$$BCD = (Z_2)(YZ_2)(XZ_1Z_2) = XYZ_1Z_2,$$

因XYZ_1Z_2包含Z的區塊效應, 故BCD落在第3層。但若要對所有的處理效應做此種計算將會過於繁雜, 這時我們可利用第k層分群型態來判斷哪些處理效應會落在最後一層, 以及各種不同處理效應落在最後一層的個數。

定理 1. 若在設計鍵中得到第k層分群型態如下:

$$C_{k1} = \{A_i | V_i = V_1^* = I\}$$

$$C_{k2} = \{A_i | V_i = V_2^*\}$$

$$\vdots$$

$$C_{kd_k} = \{A_i | V_i = V_{d_k}^*\}$$

(a) 對於$V_i \neq I$之因子，其主效應會落到特徵值最小的階層。

(b)l階交互項會落到特徵值最小的階層的情況如下：

(i) 對於奇數階交互項，若$A_1, A_2, \ldots, A_{l-1} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$且$V_j \neq I$，則$l$階交互項 $(A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_j)$ 會落到特徵值最小的階層；若$A_1, A_2, \ldots, A_l \in C_{ki}$且$V_i \neq I$，則$l$階交互項 $(A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_l)$ 亦會落到特徵值最小的階層。

(ii) 對於偶數階交互項，若$A_1, A_2, \ldots, A_{l-1} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$，則$l$階交互項 $(A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_j)$ 會落到特徵值最小的階層；若$A_1, A_2, \ldots, A_{l-2} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}, A_p \in C_{kp}$且$l \geq 2$，則$l$階交互項 $(A_1 A_2 \cdots A_{l-2} A_j A_p)$ 亦會落到特徵值最小的階層。

証明. (a) 若因子設計鍵混同區塊效應V的部份滿足了$V_i \neq I$，其代表著主效應會落到特徵值最小的階層。

(b) (i) 當$A_1, A_2, \ldots, A_{l-1} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$時，由於$l$為奇數，$l-1$為偶數$l-1$階交互項之混同區塊效應$V$的部份會相消，故

$$A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_j = U_{i1} U_{i2} \cdots U_{il-1} U_j V_j,$$

又因為$V_j \neq I$，因此奇數次的l階交互項 $(A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_j)$ 會落到特徵值最小的階層。

當$A_1, A_2, \ldots, A_l \in C_{ki}$，因$l$為奇數，$l$階交互項混同區塊效應中$V$的部份會存在一個$V$，故

$$A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_j = U_1 U_2 \cdots U_l V_i,$$

又因為$V_i \neq I$，所以奇數次的l階交互項 $(A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_l)$ 亦落到特徵值最小的階層。

(ii) 當$A_1, A_2, \ldots, A_{l-1} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$時，由於$l$為偶數，$l-1$為奇數$l-1$階交互項之混同區塊效應$V$的部份會存在一個$V_i$，故

$$A_1 A_2 \cdots A_{l-1} A_j = U_1 U_2 \cdots U_{l-1} U_j V_i V_j,$$

又因為$V_i \neq V_j$, 所以$V_iV_j \neq I$, 因此偶數次的l階 $(A_1A_2\cdots A_{l-1}A_j)$ 交互項會落到特徵值最小的階層。

當$A_1, A_2, \ldots, A_{l-2} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}, A_p \in C_{kp}$時, 由於$l$為偶數,$l-2$為偶數$l-2$交互項之混同區塊效應$V$的部份會相消, 故

$$A_1A_2\cdots A_{l-2}A_jA_p = U_1U_2\cdots U_{l-2}U_jU_pV_jV_p,$$

因為$V_j \neq V_p$, 所以$V_jV_p \neq I$,因此偶數次的l階交互項 $(A_1A_2\ldots A_{l-2}A_jA_p)$ 會落到特徵值最小的階層。 □

推論 **1.** *(a)*$A_i \in C_{ki}$,$A_j \in C_{kj}$若且唯若*2*階交互項A_iA_j落到特徵值最小的階層。

(b) 若$A_i, A_j, A_r \in C_{ki}$且$V_i \neq I$、$A_i, A_j \in C_{ki}$,$A_r \in C_{kr}$且$V_r \neq I$, 或$A_i \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}, A_r \in C_{kr}$且$V_iV_jV_r \neq I$, 則*3*階交互項$A_iA_jA_r$落到特徵值最小的階層。

証明. (a) 首先, 從左邊證到右邊。利用定理1(b), 因為該交互項為偶數次且$l=2$, 故$A_i \in C_{ki}$,$A_j \in C_{kj}$, 則A_iA_j落到特徵值最小的階層。其次, 再從右邊證到左邊, 假設$A_i = U_iV_i, A_j = U_jV_j$, 則$A_iA_j = U_iU_jV_iV_j$, 因為$A_iA_j$落到特徵值最小的階層, 故$V_iV_j \neq I$, 亦即$V_i \neq V_j$, 因此$A_i \in C_{ki}$,$A_j \in C_{kj}$。

(b) 由定理1(b), 因為該交互項為偶數次且$l=3$, 故在$A_i, A_j, A_r \in C_{ki}$且$V_i \neq I$、$A_i, A_j \in C_{ki}$,$A_r \in C_{kr}$且$V_r \neq I$的情況下,$A_iA_jA_r$落到特徵值最小的階層。在$A_i \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}, A_r \in C_{kr}$且$V_i \neq V_j \neq V_r \neq I$的情況下, 我們可得知

$$A_iA_jA_r = U_iU_jU_rV_iV_jV_r,$$

又因為$V_i \neq V_j \neq V_r \neq I$, 故$A_iA_jA_r$落到特徵值最小的階層。

□

定理1所描述的j階交互項只考慮2至3個群體, 對於3個以上的群體, 由於須考慮每個群體V的部份, 亦即在算j階交互項時不同群體須考慮V的部分是否會相消, 故定理1僅描述一定會落入特徵值最小階層的處理效應。在某些情況下, 實驗者只關心不同處理效應落在特徵值最小階層的個數, 故我們發展定理2。

定理 2. 若在設計鍵中得到第 k 層分群型態如下:

$$C_{k1} = \{A_i | V_i = V_1^* = I\}$$

$$C_{k2} = \{A_i | V_i = V_2^*\}$$

$$\vdots$$

$$C_{kd_k} = \{A_i | V_i = V_{d_k}^*\}$$

假設在C_{k1}集合裡因子個數有a_1、C_{k2}集合裡因子個數有a_2、...、C_{kd_k}集合裡因子個數有a_{d_k}, 則不同處理效應落在特徵值最小階層的個數如下:

(a) 主效應有$m - a_1$個

*(b)*2階交互項有$\sum\sum_{i\neq j} a_i a_j I_{[d_k \geq 2]}$個

(c) 奇數次的l階交互項至少有

$$\sum_{i=1}^{i=d_k} \sum_{j=2, i\neq j}^{i=d_k} C_{l-1}^{a_i} a_j I_{[a_i \geq l-1]} + \sum_{i=2}^{i=d_k} C_3^{a_i} I_{[a_i \geq l]}$$

(d) 偶數次的l階交互項至少有

$$\sum_{i\neq j} \sum_{i,j=1}^{i=d_k} C_{l-1}^{a_i} a_j I_{[a_i \geq l-1]} + \sum_{i\neq j\neq k} \sum \sum_{i,j,k=1}^{i=d_k} C_{l-2}^{a_i} a_j a_k I_{[a_i \geq l-2]}$$

証明. (a) 因為$A_i = U_i V_i$且必須滿足$V_i \neq I$, 所以主效應有$m - a_1$個落到特徵值最小的階層。

(b) 由定理1得知當$l = 2$時,$A_i \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$則$A_i A_j$會落到特徵值最小的階層, 故有$\sum\sum_{i\neq j} a_i a_j I_{[d_k \geq 2]}$個2階交互項落入特徵值最小的階層。

(c) 由定理1得知l為奇數時, 當$A_1, A_2, \ldots, A_{l-1} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$且$V_j \neq I$, 則$l$階會落到特徵值最小的階層, 故有

$$\sum_{i=1}^{i=d_k} \sum_{j=2, i\neq j}^{i=d_k} C_{l-1}^{a_i} a_j I_{[a_i \geq l-1]}$$

個; 當$A_1, A_2, \ldots, A_l \in C_{ki}$且$V_i \neq I$, 則$l$階會落到特徵值最小的階層, 故有

$$\sum_{i=2}^{i=d_k} C_3^{a_i} I_{[a_i \geq l]}$$

個, 因為定理1所得到的l階交互項未考慮分成l群的交互項部分, 故l階交互項至少有

$$\sum_{i=1}^{i=d_k}\sum_{j=2,i\neq j}^{i=d_k} C_{l-1}^{a_i} a_j I_{[a_i\geq l-1]} + \sum_{i=2}^{i=d_k} C_3^{a_i} I_{[a_i\geq l]}$$

個落到特徵值最小的階層。

(d) 由定理1得知l為偶數時, 當$A_1, A_2, \ldots, A_{l-1} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}$時, 則$l$階會落到特徵值最小的階層, 故有

$$\sum_{i\neq j}\sum_{i,j=1}^{i=d_k} C_{l-1}^{a_i} a_j I_{[a_i\geq l-1]}$$

個; 當$A_1, A_2, \ldots, A_{l-2} \in C_{ki}, A_j \in C_{kj}, A_p \in C_{kp}$時, 則$l$階會落到特徵值最小的階層, 故有

$$\sum_{i\neq j\neq k}\sum\sum_{i,j,k=1}^{i=d_k} C_{l-2}^{a_i} a_j a_k I_{[a_i\geq l-2]}$$

個, 因此偶數次l階交互項至少有

$$\sum_{i\neq j}\sum_{i,j=1}^{i=d_k} C_{l-1}^{a_i} a_j I_{[a_i\geq l-1]} + \sum_{i\neq j\neq k}\sum\sum_{i,j,k=1}^{i=d_k} C_{l-2}^{a_i} a_j a_k I_{[a_i\geq l-2]}$$

個落到特徵值最小的階層。 □

例子3.4: 當在區塊結構為$2/2/4(X/Y/Z)$、處理結構為4個2水準因子, 且設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = YZ_2, D = XZ_1Z_2,$$

該組設計鍵的第k層分群型態為A因子之設計鍵V的部分屬於Z_1, B, C因子之設計鍵V的部分屬於Z_2,D因子之設計鍵V的部分屬於Z_1Z_2, 亦即$\{\{A\}, \{B, C\}, \{D\}\}$。由推論1得知從第$k$層分群型態中的任兩個相異群體各選出一個因子, 其2階交互項會落入特徵值最小階層, 因此A因子來自某一個群體、B因子來自另一個群體, 故 AB 落到特徵值最小階層, 同理,AC, AD, BD, CD也會落到特徵值最小階層。其餘我們以類似方法-定理1及定理2, 得知落到特徵值最小階層的處理效應及個數, 其結果如表3.1。由於第3層自由度為$12(=2\times 2\times(4-1))$, 由表3.1得知利用定理1及定理2的方法我們可直接得到所有會落到最後一層的處理效應及個數。

表 3.1: 落入最後一層的處理效應

	使用定理1及定理2	
處理效應	效應	個數
主效應	A,B,C,D	4
2階交互項	AB,AC,AD,BD,CD	5
3階交互項	ABC,BCD	2
4階交互項	ABCD	1

推論 **2.** 當區塊結構n_k=*2*且所有主效應皆可落到特徵值最小的階層時, 則主效應以及奇數次的交互項皆會落在特徵值最小的階層且所有偶數次交互項皆不可能落入特徵值最小的階層。

証明. 由於n_k=2, 故第k層虛無因子只有1個因子, 亦即第k層區塊成份可分到V的部份僅有1個。在所有主效應必須落到特徵值最小階層的條件下, 第k層分群型態只能有1個集合數, 亦即$C_1 = \{A_i | V_i = V_1^*\}$對於所有$i$。因為所有處理因子設計鍵中混同區塊效應具有相同$V$, 所以所有主效應皆落在特徵值最小的階層; 又由於$A_i, A_j \in C_1$對於所有i, j, 造成任兩個處理因子交互項中混同區塊效應V的部份會相消, 故我們可得知沒有2階交互項落入特徵值最小階層; $A_i, A_j, A_k \in C_1$對於所有i, j, k, 造成任三個處理因子交互項中混同區塊效應V的部份會存在, 因此所有3階交互項皆落到特徵值最小階層, 同理, 我們可歸納出偶數項交互項的V會相消、奇數項交互項的V會存在。因此, 落在特徵值最小的階層為主效應以及奇數次的交互項。 □

3.2.2 存在設計鍵的條件

當需求集包含所有主效應及某些2階交互項時, 我們可由需求集找出的第k層最小限制型態可分的群體數來判斷目前區塊結構能否讓需求集裡所有的效應落在特徵值最小的階層。

定理 3. 假設由需求集找出的第k層最小限制型態共有p群, 則當$p \leq n_k - 1$時若且唯若存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落入特徵值最小的階層。

証明. 假設該p個群體第k層區塊成份分別為$V_1, V_2, \ldots, V_p$。首先, 我們先由左邊證到右邊。因所有主效應須落到特徵值最小的階層, 故對於所有$i = 1, \ldots, p$必須滿足$V_i \neq$

表 3.2: 是否存在設計鍵

需求集	第k層最小限制型態	p	是否存在設計鍵
$\{A,B,C,D,AB,AC,AD\}$	$\{A\}$,$\{B,C,D\}$	2	是
$\{A,B,C,D,AB,AC,BC,CD\}$	$\{A,D\}$,$\{B\}$,$\{C\}$	3	是
$\{A,B,C,D,AC,AD,BC,BD,CD\}$	$\{A,B\}$,$\{C\}$,$\{D\}$	3	是
所有主效應及所有2階交互項	$\{A\}$,$\{B\}$,$\{C\}$,$\{D\}$	4	否

I, 因此第k層不為I的區塊成分共有n_k-1個。因為$p \leq n_k-1$, 故對於$i,j=1,\ldots,p$必可找到$V_i \neq V_j$, 因此存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。

其次, 再從右邊證到左邊。因為存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層, 且在第k層最小限制型態共有p群及所有主效應須落到特徵值最小階層的情況下, 因子設計鍵中第k層區塊成份必須對於所有$i,j=1,\ldots,p$滿足$V_i \neq V_j$及$V_i \neq I$, 則第k層不為I的區塊成份至少須有p個, 亦即$p \leq n_k-1$。 □

例子3.5: 假設處理結構有4個因子, 以A,B,C,D表示, 區塊結構為2/2/4, 由定理3可得知第k層最小限制型態p必須滿足$p \leq 3$, 才能存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層, 故在不同需求集僅須計算出第k層最小限制型態, 即可得知在目前區塊結構是否能存在設計鍵, 使得需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層。表3.2針對不同需求集, 我們利用第k層最小限制型態, 來判斷是否存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層。

定理3僅適用於需求集為主效應及某些2階交互項的情況, 若需求集裡存在3階或3階以上的交互項時, 除了須由需求集找出第k層最小限制型態外, 還需考慮每一個群體V分配的問題。這時情形會較繁雜, 不易獲得如定理4如此簡潔的結果, 但相同的推論仍可應用。以需求集為所有主效應、2階交互項、$\ldots$,j階交互項且需求集要落到特徵值最小的階層為例, 由於2階交互項必須落到特徵值最小的階層, 故2階交互項中混同區塊效應V的部份必須對於所有i,j滿足$V_iV_j \neq I$, 亦即對於所有i,j滿足$V_i \neq V_j$, 因此第k層最小限制型態需分成m群; 又因為2階、$\ldots$,j階交互項必須落到特徵值最小的階層, 故2階,$\ldots$,j階交互項中混同區塊效應V的部份必須對於所有i,j,l滿足$V_iV_j \neq I$、$V_iV_jV_l \neq I$、$\ldots$, 因此第k層最小限制型態須分m群, 且第k層限制型態須對於所有i,j,l,k,r滿足$V_i \neq V_j, V_iV_j \neq V_l, \ldots, V_iV_l \cdots V_k \neq V_r$。

3.2.3　最佳第k層限制型態

在第k層最小限制型態之群體數滿足$p \leq n_k - 1$情況下, 我們可得知存在設計鍵使得需求集裡所有的效應皆可落入特徵值最小階層, 然而能存在設計鍵讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層之第k層限制型態卻有衆多個, 我們不希望從衆多第k層限制型態中, 選到會讓高階效應落在特徵值最小的階層裡。因此, 我們依照等級次序原則(hierarchical ordering principle), 希望將未落在需求集裡2階交互項落在特徵值最小階層個數最大化, 其選取最佳第k層限制型態方式如定理4。

定理 4. 假設第k層最小限制型態共有p群, 其每一個群體因子設計鍵中第k層區塊成份假設為$V_i^*, i = 1, \ldots, p$, 以符號表示如下:

$$C_{k1} = \{A_i | V_i = V_1^*\},$$

$$C_{k2} = \{A_i | V_i = V_2^*\},$$

$$\vdots$$

$$C_{kp} = \{A_i | V_i = V_p^*\}.$$

其中,C_{k1}裡共有a_1個處理因子、$\cdots$、C_{kp}裡共有a_p個處理因子, 且$\sum_{i=1}^{i=p} a_i = m$。當$p \leq n_k - 1$時, $\sum_{i=1}^{i=n_k-1}(a_i - \frac{m}{n_k-1})^2$越小越能增加2階交互項落到第$k$層。

証明. 當$p \leq n_k - 1$時, 代表有足夠V可分到每一個群體, 亦即對於$i, j = 1, \ldots, p$必可滿足$V_i \neq V_j$, 為了增加2階交互項落在特徵值最小的階層, 我們須將

$$\sum\sum_{i \neq j} a_i a_j I_{[p \geq 2]}$$

最大化。在p可變動下 $(p < n_k - 1)$, 由於$V_i \neq V_j$即可讓2階交互項落入特徵值最小階層, 故我們須將原本群體數p增加至最大值-$n_k - 1$, 因此有

$$\sum\sum_{i \neq j} a_i a_j I_{[n_k - 1 \geq 2]}$$

個2階交互項落入特徵值最小的階層。此時群體個數固定, 但群內某些因子可變動, 為了讓2階交互項落在特徵值最小階層之個數增加, 所以必須將

$$\sum\sum_{i \neq j} a_i a_j I_{[n_k - 1 \geq 2]}$$

最大化, 由算術平均大於或等於幾何平均數得知$a_ia_j \leq (\frac{a_i+a_j}{2})^2$, 當=成立時,$a_i = a_j$,a_ia_j達到最大值, 所以在$a_1 = a_2 = a_3 = \cdots = a_{n_k-1}$情況下, 2階交互項落於特徵值最小階層的個數最多。我們可由$a_1 = a_2 = a_3 = \cdots = a_{n_k-1}$, 得知每一個群體彼此群內個數越接近, 越能將2階交互項落在特徵值最小階層的個數最大化, 但由於此$n_k - 1$群裡的處理因子總個數有m個, 且$n_k - 1$個群體能分配到第k層區塊成份有$n_k - 1$個, 因此該$n_k - 1$群裡群內個數越接近$\frac{m}{n_k-1}$, 越能將2階交互項落在特徵值最小階層的個數最多, 故$\sum_{i=1}^{i=n_k-1}(a_i - \frac{m}{n_k-1})^2$越小, 越能增加2階交互項落在特徵值最小的階層。 □

例子3.6($p \leq n_k - 1$): 當$n_k = 4$且需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AD, AE, BD, BE, CE, DE\}$$

時, 由需求集利用圖四可得知第k層最小限制型態可分成2群且有2種分法, 其分群結構為

$$\{\{A, B\}, \{C, D\}, \{E\}\}\text{或}\{\{A, B, C\}, \{D\}, \{E\}\}.$$

由於$p \leq n_k - 1$, 故需求集裡所有的效應皆落入特徵值最小階層。在

$$m = 5, n_k - 1 = p = 3$$

的情況下, 若第k層限制型態為$\{\{A, B\}, \{C, D\}, \{E\}\}$, 則

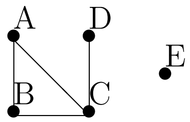
$$\sum_{i=1}^{i=n_k-1}(a_i - \frac{m}{n_k - 1})^2 = \sum_{i=1}^{i=3}(a_i - \frac{5}{3})^2 = \frac{2}{3},$$

若第k層限制型態為$\{\{A, B, C\}, \{D\}, \{E\}\}$, 則

$$\sum_{i=1}^{i=n_k-1}(a_i - \frac{m}{n_k - 1})^2 = \sum_{i=1}^{i=3}(a_i - \frac{5}{3})^2 = \frac{8}{3},$$

由定理4得知最佳第k層限制型態為$\{A, B\}, \{C, D\}, \{E\}$。若不使用定理4, 僅考慮落入特徵值最小階層的2階交互項, 在第k層最小限制型態為$\{\{A, B\}, \{C, D\}, \{E\}\}$情況下, 除了能將需求集裡11個效應落入特徵值最小階層, 對於不在需求集裡的AC, BC效應也能落在特徵值最小階層; 然而第k層最小限制型態為$\{\{A, B, C\}, \{D\}, \{E\}\}$, 除

了能將需求集裡11個效應落入特徵值最小階層, 對於不在需求集裡的效應僅有CD落在特徵值最小階層, 因此最佳第k層限制型態仍為$\{\{A,B\},\{C,D\},\{E\}\}$。



圖四: 圖論

當區塊結構無法改變且第k層最小限制型態不滿足$p \le n_k - 1$時, 此時目前區塊結構必不存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層, 因此我們只能將需求集裡的效應落到特徵值最小階層之個數最大化。以下我們以將需求集裡的效應落入特徵值最小階層之個數最大化的目的, 來進行第k層最小限制型態之第k層區塊效應分配及合併群體的問題, 其結果如定理5。

定理 5. 假設第k層最小限制型態共有p群, 其每一個群體因子設計鍵中第k層區塊成份假設為$V_i^*, i = 1, \ldots, p$, 以符號表示

$$C_{k1} = \{A_i | V_i = V_1^*\},$$
$$C_{k2} = \{A_i | V_i = V_2^*\},$$
$$\vdots$$
$$C_{kp} = \{A_i | V_i = V_p^*\}.$$

其中,C_{k1}裡共有a_1個處理因子、$\cdots$、C_{kp}裡共有a_p個處理因子, 且$\sum_{i=1}^{i=p} a_i = m$。

(i) 當$p = n_k$時, 將$a_{(1)} = min(a_1, a_2, \ldots, a_p)$的群體第$k$層區塊成份分配到$I$, 則需求集裡的效應落入特徵值最小階層之個數最大化。

(ii) 當$p > n_k$時, 將p個群體合併成n_k個群體, 且每個群體內個數須趨近於$\frac{m}{n_k}$, 則需求集裡的效應落入特徵值最小階層之個數最大化。

証明. (i) 當$p = n_k$時, 此時不存在設計鍵使得需求集裡所有效應落入特徵值最小階層, 首先考慮在p群中任取2群合併成1群, 使得第k層最小限制型態由原本p群變成$p-1$群, 為了將所有主效應都落在特徵值最小的階層裡, 我們將此$p-1$個群體的第k層區塊效應分配問題不考慮I, 因此此種合併群體會造成需求集裡的效應減少

$$\sum_{i,j=1}^{p-1} \sum_{i \ne j} a_i a_j,$$

為了將需求集裡的個數減少最小化, 故當$a_i = a_{(1)}, a_j = a_{(2)}$可將$\sum_{i,j=1}^{p-1}\sum_{i\neq j} a_i a_j$最小化; 若考慮將此$p$群中某一個群體的第$k$層區塊效應分配到$I$, 則需求集裡的效應會減少$a_i$, 為了讓需求集裡的個數減少最小化, 故當$a_i = a_{(1)}$可將$a_i$最小化。因為$a_{(1)} \leq a_{(1)}a_{(2)}$, 所以將$p$群中$a_{(1)}$的群體第$k$層區塊成份分配到$I$, 必定可將需求集裡的效應落入特徵值最小階層的個數最大化。

(ii) 當$p \geq n_k$時, 假設有b個群體的處理因子設計鍵中混同區塊效應 V的部份分配到I,$d_1 - 1$個群體合併到處理因子設計鍵中混同區塊效應 V的部份為V_1、$d_2 - 1$個群體合併到處理因子設計鍵中混同區塊效應 V的部份為V_2、$\ldots$、$d_t - 1$個群體合併到處理因子設計鍵中混同區塊效應 V的部份為V_{n_k}, 且

$$b + \sum_{i=1}^{i=t}(d_i - 1) = p - n_k + 1.$$

由於處理因子設計鍵中混同區塊效應V的部份可等於I, 故第k層限制型態最大可分成n_k群, 為了盡量將需求集2階交互項盡量若入特徵值最小的階層, 亦即我們要將

$$\sum\sum_{i\neq j} a_i a_j I_{[n_k\geq 2]}$$

最大化, 利用算術平均數大於或等於幾何平均數的方法 (如定理4), 可得知每一個群內個數越接近 $\frac{m}{n_k}$, 越可將 2階交互項落入最小特徵值之個數最大化。 □

例子3.7($p \geq n_k$): 當$n_k = 4$時, 由需求集得知第k層最小限制型態需4群, 其分群結構為$\{\{A,B\},\{C,D\},\{E,F\},\{G,H\}\}$。由分群結構觀察, 需求集有8個主效應以及24個2階交互項效應。由定理6得知$\frac{m}{n_k} = \frac{8}{4} = 2$, 故第$k$層最佳分群型態為$\{\{A,B\},\{C,D\},\{E,F\},\{G,H\}\}$, 並將此4群中的某一個群體$V$的部份分配到$I$。在不使用定理6的方法, 僅考慮設計鍵中混同區塊效應V的部份有分配到I與沒有分配到I。若將$\{A,B\}$的設計鍵中混同區塊效應V 的部份與$\{C,D\}V$ 的部份相同, 在需求集裡會有28個效應落到特徵值最小的階層 (比原先需求集的效應少4個); 若考慮將$\{A,B\}$的設計鍵中混同區塊效應V 的部份分配到I, 在需求集裡會有30個效應落到特徵值最小的階層 (比原先需求集的效應少2個)。因此, 將第k層最小限制型態中某個群體的設計鍵混同區塊效應V的部份分配到I可讓需求集落入特徵值最小階層之個數最大化。

當$p \leq n_k - 1$時, 為了讓需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層, 在定理4第k層最小限制型態必須包含於最佳第k層限制型態裡。當$p \geq n_k$時, 由於目前區塊結構無

法將需求集裡有的效應落到特徵值最小階層，所以在定理5的目的只是將第k層最小限制型態中的部分群體合併。

3.3　處理因子數大於虛假因子數

假設處理因子數有m個、虛假因子數有q個且其因子水準數皆為2，若處理因子數大於虛假因子數 $(m > q)$，此種情況導致無法將所有2^m個水準組合都安排進區塊內，由於虛假因子數有q個，此時最多只能安排2^q個水準組合，因此我們僅能操作$2^{m-r} = 2^q$個處理。由於我們不是操作所有2^m個處理，而是操作一部份2^{m-r}個處理，這時出現了定義對比子群。以下針對第k層限制型態找出合格定義對比，並利用 Franklin 與 Bailey(1977) 的演算法找出合適定義對比子群；其次，針對需求集裡所有效應落入特徵值最小階層對合適定義對比影響。

3.3.1　找出合格的定義對比

當需求集包含所有主效應及部分2階交互項，Franklin與 Bailey(1977) 定義若某定義對比 (defining contrast) 可由需求集裡的效應及某兩個在需求集的效應相乘而獲得，則稱其為不合格的定義對比，否則便其為合格的定義對比。注意這邊的合格與否，只是初步先篩除某些很明顯不適用的定義對比，並不是任一合格的定義對比便能建構出能估計需求集裡所有效應的部份因子設計。為快速計算合格定義對比，我們應用第k層限制型態去找出合格定義對比集合。

在談論合格定義對比集合前，我們先定義兩種定義對比，若定義對比是由第k層限制型態裡某一個群體所形成，我們將其稱之為群內定義對比，舉例來說，若第k層限制型態為$\{\{A\},\{B,C,D\}\}$，因BCD由$\{B,C,D\}$為所形成，故其為群內定義對比；若定義對比是由第k層限制型態裡某兩個群體或兩個以上群體所形成，我們將其稱之為群間定義對比，舉例來說，若第k層限制型態為$\{\{A\},\{B,C,D\}\}$，因$ABCD$由2個群體所形成，故其為群間定義對比。

定理 6. *若需求集為所有主效應以及某些2階交互項，對於 Franklin 與 Bailey(1977) 所定義不合格定義對比，我們可利用第k層最小限制型態，若某定義對比滿足以下 (i)(ii)(iii)(iv) 任一個條件，其皆屬於合格定義對比集合。*

(i) 字長大於或等於5的定義對比。

(ii) 字長為*3*個或*4*個字 *(letter)* 所形成的群內定義對比。

(iii) 從*2*個群體中選出一個群體並從該群體選出*3*個字，及在另一個群體並從該群體選出*1*個字，其所組成的*4*個字長的群間定義對比。

(iv) 當第k層最小限制型態不具唯一性時，若從兩個群體中個別選出*2*個字，且該*4*個字所形成*6*個*2*階交互項僅有*1*個*2*階交互項屬於需求集，則其所組成的*4*個字長的群間定義對比。

証明. (i) 由於需求集僅有所有主效應與部分2階交互項，所以不合格定義對比最多只到4個字長，因此所有字長為5及5以上皆為合格定義對比。

(ii) 由群內去找出合格定義對比，在第k層限制型態中會分成同一群，主要是處理因子之間的2階交互項不是我們所希望去估計，但主效應本身是在需求集裡，所以群內字長 (wordlength) 必須大於等於3才是合格定義對比。

(iii) 由群間去找出合格定義對比，對於字長為3或4是否為合格定義對比，其探討如下:

若有4個或3個群體且群內個數皆為1，當字長為3的定義對比，其可拆解成主效應與2階交互項，由於群內個數為1，故代表著群間2階交互項為希望估計的效應，又主效應也屬於需求集，因此字長為3為不合格定義對比；當字長為4的定義對比，其可拆解成兩個2階交互項相乘，由於4個群體群內個數皆為1，故代表著這兩個2階交互項為希望估計的效應，因此字長為4為不合格定義對比。

若有2個或3個群體且存在一個群體個數為2其餘個數皆為1，由於群間2階交互項為希望估計的效應，所以希望估計的效應彼此之間不能互為別名 (aliasing)，因此只要從2個群體中選出一個群體2個字另一個群體1個字所產生的3個字長之定義對比，其會導致群間的2階交互項 (希望估計的效應) 會與主效應互為別名，故群間字長為3是不合格定義對比；由於群間2階交互項為希望估計的效應，所以從3個群體中選出一個群體2個字另兩個群體皆1個字所產生的4個字長之定義對比，其會造成希望估計2階交互項彼此互為別名，因此群間字長為4是不合格定義對比。例如由需求集得知第k層限制型態為$\{A, B\}$ $\{C\}$ $\{D\}$，任何字長為3可拆解成主效應與群間2階交互項，所以字長為3是不合格，且 ABCD 可拆解成 AC,BD，故字長為4也是不合格。

若有2個群體且其群內個數皆為2，由於群間2階交互項為希望可估計，所以從2個群體中選群內皆為2個字的4個字長之定義對比，其會造成希望估計2階交互項彼此互為別名，因此群間字長為4是不合格定義對比。例如由需求集得知第k層最小限制型態

為$\{A, B\}$ $\{C, D\}$, 任何字長為3為不合格, 因 ABCD 可拆解成 AC,BD, 故字長為4也是不合格。

若有2個群體且一個群體個數為3另一個群體個數為1, 由於群間交互項要估計而群內交互項不用估計, 所以從2個群體中選一個群體3個字與另一個群體1個字的4個字長之定義對比, 其會造成群間交互項會與群內交互項互為別名, 又因為群間交互項不是我們所希望估計的效應, 故2個群體字長為4是合格定義對比。例如由需求集得知第k層最小限制型態為$\{A, B, C\}$ $\{D\}$, 故字長為3只有 ABC 是合格的, 而字長為4有 ABCD 是合格的。

(iv) 當第k層最小限制型態不具唯一性時, 若從兩個群體中個別選出2個字, 假設第k層最小限制型態某兩個群體為$\{A_i, A_j\}, \{A_l, A_m\}$, 因$A_i, A_j, A_l, A_m$僅存在1個$A_iA_l$2階交互項屬於需求集, $A_iA_l = A_jA_m$且A_jA_m不屬於需求集, 因此其所組成的4個字長為合格定義對比。

□

當第k層最小限制型態具唯一性時, 由定理6(i)(ii)(iii) 可得到合格定義對比集合, 然而若第k層限制型態不具唯一性時, 由定理6(i)(ii)(iii)(iv) 可得到合格定義對比集合, 若想要估計更多2階交互項時, 我們僅需使用定理6(i)(ii)(iii) 得到合格定義對比。由於定理6所得到每一個合格定義對比皆能估計需求集裡所有的效應, 故定理6適用於部分因子設計之2^{m-1}的實驗; 對於2^{m-r}的實驗, 除了利用定理6得到合格定義對比, 我們還需使用 Franklin 與 Bailey(1977) 搜尋表 (search table) 的方式, 找出合格定義對比子群, 這也是我們一開始所提到的定理6所得到合格, 只是初步先選出某些合格定義對比, 但並不是任一合格的定義對比便能建構出能估計需求裡所有效應的部份因子設計。

例子3.8: 若需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AB, AC, AD, AE\},$$

由需求集得知第k層最小限制型態可分成2群, 其分群結構為$\{\{A\}\ \{B, C, D, E\}\}$, 由定理6$(i)$得知$ABCDE$為合格定義對比, 其次, 分群結構為$\{B, C, D, E\}$且由定理6$(ii)$得知合格定義對比為$BCD, BCE, BDE, CDE, BCDE$, 由定理6$(iii)$得知$ABCD$, $ABCE, ABDE, ACDE$為合格定義對比。

3.3.2 合格定義對比的影響

在需求集為所有主效應及部分2階交互項時, 若是處理結構為完全因子設計, 利用需求集找到第k層最小限制型態後, 只要滿足$p \leq n_k - 1$此條件, 則至少存在一組設計鍵使得需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。當處理結構為部分因子設計時, 若要估計需求集裡所有的效應, 我們可由定理6及 Franklin 與 Bailey(1977) 搜尋表找出合格定義對比子群, 然而若要讓需求集裡所有效應落入特徵值最小階層, 除了須考慮第k層最小限制型態及區塊結構外, 還須考慮在定理6的合格定義對比能否產生需求集裡所有效應落入特徵值最小階層的設計鍵。以下是利用第k層最小限制型態得知合格定義對比, 其次再考慮合格定義對比能否在此種分群結構下得到一組設計鍵。

定理 7. *在區塊結構滿足$p \leq n_k - 1$情況下, 字長至少為4及偶數個的群內定義對比、字長至少為5的群間定義對比, 以及若第k層最小限制型態不具唯一性, 從兩個群體中個別選出2個字, 且該4個字所形成6個2階交互項僅有1個2階交互項屬於需求集, 其所組成的4個字長的群間定義對比, 並且其所得到定義對比之混同區塊效應須為I, 即可存在設計鍵使得需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層裡。*

証明. 以下我們將由定理6的合格定義對比區分為群內與群間兩種情況來各別討論。對於群內定義對比, 若其字長為3, 由定理6得知字長為3所形成的群內定義對比為合格的, 由於3個因子設計鍵中混同區塊效應V的部份是相同的, 所以造成

$$A_iA_jA_k = U_iVU_jVU_kV = U_iU_jU_kV,$$

由於需求集包含所有主效應且需求集裡所有效應需落到特徵值最小階層, 因此$V \neq I$無法產生3個字長群內定義對比的設計鍵, 亦即$A_iA_jA_k \neq I$, 同理, 我們可推得字長為奇數個的群內定義對比, 無法產生3個字長群內定義對比的設計鍵; 若其字長為4, 由定理6得知字長為4所形成的群內定義對比為合格的, 因4個因子設計鍵中混同區塊效應V的部份是相同的, 所以

$$A_iA_jA_kA_l = U_iVU_jVU_kVU_lV = U_iU_jU_kU_l,$$

只要能滿足$U_iU_jU_kU_l = I$的條件, 即可找到需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之4個字長群內定義對比的設計鍵; 同理, 我們可推得字長為偶數個的群內定義對

比, 可找到需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之偶數個字長群內定義對比的設計鍵。

對於群間定義對比, 若字長為4是由群間所得到的, 由定理6得知從2個群體中選出一個群體群內個數為3另一個群體群內個數為1所組成的4個字長的群間定義對比為合格的, 因4個因子設計鍵中混同區塊效應V的部份有3個是相同的, 其V的部分假設為V_i, 另一個因子設計鍵中混同區塊效應 V的部份為V_j且$V_i \neq V_j$, 所以

$$A_iA_jA_kA_l = U_iV_iU_jV_iU_kV_iU_lV_j = U_iU_jU_kU_lV_iV_j,$$

因$V_i \neq V_j$所以$A_iA_jA_kA_l \neq I$, 因此由2個群體中選出一個群體群內個數為3另一個群體群內個數為1所組成的4個字長的群間定義對比, 無法找到可讓需求集所有的效應落到特徵值最小階層的定義對比; 當字長至少為5, 若其定義對比滿足區塊效應的部份等於I, 則我們可找到需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之字長至少為5群間定義對比的設計鍵。

由定理6得知第k層最小限制型態不具唯一性時, 若從兩個群體中個別選出2個字, 且該4個字所形成6個2階交互項僅有1個2階交互項屬於需求集, 則其所組成的4個字長的群間定義對比。因4個因子設計鍵中混同區塊效應V的部分有2個是相同的, 其V的部分假設為V_i, 另2個因子設計鍵中混同區塊效應 V的部份為V_j且$V_i \neq V_j$, 所以

$$A_iA_jA_kA_l = U_iV_iU_jV_iU_kV_jU_lV_j = U_iU_jU_kU_l,$$

只要滿足$U_iU_jU_kU_l = I$, 即可找到需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之4個字長群間定義對比的設計鍵。 □

例子3.9: 假設區塊結構為$4/4(X/Y)$、處理結構有5 個因子以及需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AB, AC, AD, AE, BC, CD, DE\},$$

從需求集得知第k層最小分群型態為$\{\{A\}, \{B, D\}, \{C, E\}\}$(滿足了$p \leq n_k - 1$), 由定理7得知字長至少為4及偶數個的群內定義對比, 然而因第k層最小分群型態中每一個群體群內個數小於3, 故無法發現字長至少為4及偶數個群內定義對比之設計鍵; 由定理7得知字長至少為5的群間定義對比, 而第k層最小分群型態中群間字長為5的定義對比有$ABCDE$, 因需求集裡包含所有主效應且需求集裡所有效應須落入特徵值最

小階層, 故因子設計鍵中$V \neq I$, 假設

$$A = U_aV_1, B = U_bV_2, C = U_cV_3, D = U_dV_2, E = U_eV_3,$$

則

$$ABCDE = U_aU_bU_cU_dU_eV_1,$$

因$V_1 \neq I$, 所以無法發現字長為5的群間定義對比之設計鍵, 由於此第k層最小限制型態不具唯一性, 但此第k層最小限制型態中$\{B, D\}, \{C, E\}$有2個交互項屬於需求集, 故無法發現定義對比為$BCDE$的設計鍵。由以上討論, 我們可得知該區塊結構無法發現一組設計鍵, 使得需求集所有的效應落到特徵值最小的階層。

例子3.10: 在例子3.8中, 由定理7我們可找到需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之群內定義對比$BCDE$。

第 4 章
區塊結構的順序與評判設計鍵準則

4.1 區塊結構的順序

4.1.1 排序準則

對一個區塊結構$n_1/n_2/\cdots/n_k$, 其共有k個階層, 在第i層的自由度為$n_1n_2\cdots(n_i-1)$, 因此第i層最多可安排$n_1n_2\cdots(n_i-1)$個處理效應。因為在$\rho_1>\rho_2>\cdots>\rho_{k-1}$假設下, 越底層其特徵值越小, 亦即落入越底層的處理效應, 其估計式的變異數越小, 故能估計的越精確。在這種狀況下, 若能讓越底層自由度越大, 則我們便可以安排更多的處理效應, 讓更多的效應被估計的越精確, 因此, 我們利用各階層自由度來安排區塊結構的順序。

對於兩個區塊結構$n_1/n_2/\cdots/n_k$及$n'_1/n'_2/\cdots/n'_k$, 為了估計總處理效應個數一樣 (自由度一樣), 故$n_1n_2\cdots n_k=n'_1n'_2\cdots n'_k$, 然而不同區塊結構其各階層估計處理效應的個數卻不盡相同。為了增加效應估計式精確度之個數, 故不同區塊結構的順序以各階層自由度來考量, 其優先順序的排列為越底層自由度越大越優先。在區塊結構為$n_1/n_2/\cdots/n_k$, 其第i層自由度為$D_{i1}=n_1n_2\cdots n_{i-1}(n_i-1)$; 另一個區塊結構為$n'_1/n'_2/\cdots/n'_k$, 其第$i$層自由度為$D_{i2}=n'_1n'_2\ldots n'_{i-1}(n'_i-1)$。此兩種區塊結構在第$i$層自由度的差異為$Df_i=D_{i1}-D_{i2}$。由於越底層特徵值越小, 因此第$k$層自由度大的優先考量, 若$Df_k>0$, 則$n_1/n_2/\cdots/n_k$比$n'_1/n'_2/\cdots/n'_k$優, 造成此種結果主要因為前者比後者更多自由度, 反之, 若$Df_k<0$, 則$n'_1/n'_2/\cdots/n'_k$比$n_1/n_2/\cdots/n_k$優, 若$Df_k=0$, 則我們再依序考量第$k-1$、$k-2$、$\ldots$、1層自由度大者優先排列, 故若存在j, 使得$Df_j>0$, 且$Df_i=0$對於$i>j$, 則區塊結構為$n_1/n_2/\cdots/n_k$之順序較$n'_1/n'_2/\cdots/n'_k$優先。

例子4.1: 區塊結構為$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$, 第$i$層自由度$D_{i1}=2^{\sum_{r=1}^{r=i-1}\alpha_r}(2^{\alpha_i}-1)$, 而區塊結構為$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_j-1}/\cdots/2^{\alpha_l+1}/\cdots/2^{\alpha_k}$, 在第 i 層自由度 (D_{i2}) 如下:

$$D_{i2}=\begin{cases} 2^{\sum_{r=1}^{r=i-1}\alpha_r}(2^{\alpha_i}-1) & i=1,...,j-1,\\ 2^{\sum_{r=1}^{r=i-1}\alpha_r}(2^{\alpha_i-1}-1) & i=j,\\ 2^{\sum_{r=1}^{r=i-1}\alpha_r-1}(2^{\alpha_i}-1) & i=j+1,...,l-1,\\ 2^{\sum_{r=1}^{r=l-1}\alpha_r-1}(2^{\alpha_l+1}-1) & i=l,\\ 2^{\sum_{r=1}^{r=i-1}\alpha_r}(2^{\alpha_i}-1) & i=l+1,..,k.\end{cases}$$

區塊結構由$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$ 改變為 $2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_j-1}/\cdots/2^{\alpha_l+1}/\cdots/2^{\alpha_k}$, 其自由度變化如下:

$$Df_i=D_{i2}-D_{i1}=\begin{cases} 0 & i=1,...,j-1,\\ -2^{\sum_{r=1}^{r=j}\alpha_r-1} & i=j,\\ -2^{\sum_{r=1}^{r=i-1}\alpha_r-1}(2^{\alpha_i}-1) & i=j+1,...,l-1,\\ 2^{\sum_{r=1}^{r=l-1}\alpha_r-1} & i=l,\\ 0 & i=l+1,..,k.\end{cases}$$

由於$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$ 在第l層自由度較$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_j-1}/\cdots/2^{\alpha_l+1}/\cdots/2^{\alpha_k}$ 多, 故$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_j-1}/\cdots/2^{\alpha_l+1}/\cdots/2^{\alpha_k}$ 較$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$優先。假設$\Sigma_{i=1}^{i=k}\alpha_i=a$, 利用疊代法我們可推得最優的區塊結構為$\alpha_1=1,\ldots,\alpha_{k-1}=1,\alpha_k=a-(k-1)$, 亦即其區塊結構為$2/2/\cdots/2/2^{a-k+1}$。

4.1.2　相關定理

如果在目前的區塊結構下, 無法讓需求集裡所有的效應皆落入最後一層, 則我們可以考慮改變目前區塊結構。以下針對區塊結構排序後, 哪些區塊結構不能將需求集裡所有效應落入特徵值最小階層相關性質之探討。

定理 8. 假設區塊結構$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$與$2^{\beta_1}/2^{\beta_2}/\cdots/2^{\beta_k}$, 在$\Sigma_{i=1}^{i=k}\alpha_i=\Sigma_{i=1}^{i=k}\beta_i$的情況下,

(i) 若$\alpha_k>\beta_k$且$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$不能讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層, 則$2^{\beta_1}/2^{\beta_2}/\cdots/2^{\beta_k}$也不能將需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。

(ii) 若$\alpha_k = \beta_k$, 令i為使得$\alpha_i > \beta_i$最大的i, 若$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$不能讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層, 若且唯若,$2^{\beta_1}/2^{\beta_2}/\cdots/2^{\beta_k}$也無法讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。

証明. (i) 因為$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$不讓將需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層, 由定理3得知第k層最小限制型態p不滿足$p \leq 2^{\alpha_k}-1$, 亦即$p > 2^{\alpha_k}-1$。因為$\alpha_k > \beta_k$, $p > 2^{\alpha_k}-1 > 2^{\beta_k}-1$, 故$p > 2^{\beta_k}-1$, 由定理3得知$2^{\beta_1}/2^{\beta_2}/\cdots/2^{\beta_k}$也不能讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。

(ii) 由左邊證到右邊。因為$2^{\alpha_1}/2^{\alpha_2}/\cdots/2^{\alpha_k}$不能讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層, 由定理3得知第k層最小需限制型態p不滿足$p \leq 2^{\alpha_k}-1$, 亦即$p > 2^{\alpha_k}-1$。因為$\alpha_k = \beta_k$, 故$p > 2^{\alpha_k}-1 = 2^{\beta_k}-1$, 因此,$2^{\beta_1}/2^{\beta_2}/\cdots/2^{\beta_k}$也不能讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。同理可從右邊證到左邊。 □

如果在目前區塊結構無法讓需求集裡所有的效應落入最後一層, 此時須改變目前的區塊效應, 由定理8可得知, 我們須增加最後一層的個數(n_k), 接著利用例子4.1使用疊代法增加最後一層的個數, 倘若最優的區塊結構仍然無法讓需求集裡所有的效應落入最後一層, 此時我們須將原本$n_1 n_2 \cdots n_k$增加至$2n_1 n_2 \cdots n_k$, 且將原本最優區塊結構之最後一層個數增加1倍。

4.2 評判設計鍵的準則

針對客户提出某需求集的實驗, 我們使用 Minimum N-Aberration準則來選取好的部份因子設計, 但是該準則僅適用於無區塊結構的設計, 且其只衡量處理效應互為別名的情況; 當區塊具有某些簡單的結構, 如集區因子設計, 有文獻建議用其所提出的順序來比較字長之準則選取好的設計, 其衡量了處理效應互為別名、處理效應與區塊效應混同的情況, 但該準則並不適用於有需求集的實驗; 然而在多階層實驗設計的文獻中, 尚無一套準則針對既有需求集又有巢狀區塊結構來評斷設計鍵的優劣。為篩選所得到之設計鍵, 我們發展出篩選在巢狀區塊結構以及有需求集實驗的設計鍵之準則, 其準則之發展須考量處理效應互為別名、處理效應與區塊效應混同的情況, 以及處理效應估計精確度之問題。

表 4.1: 符號表

	階層			
處理效應	S_1	S_2	$\ldots$	S_k
需求集	B_{11}	B_{12}	$\ldots$	B_{1k}
其餘2階交互項	B_{21}	B_{22}	$\ldots$	B_{2k}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
其餘i階交互項	B_{i1}	B_{i2}	$\ldots$	B_{ik}

4.2.1　符號定義

在多階層實驗裡, 每一個階層有不同效應落入, B_{1j}代表需求集落入第j階層裡的個數、對於$i \geq 2$, B_{ij}代表剩下未在需求集的i階交互項落入第j階層裡的個數, 其不同階層在不同等級交互項之個數主要在衡量處理效應與區塊效應混同的情況以及處理效應估計精確度, 我們以表4.1來呈現符號。

當實驗為部份因子設計時, 在 minimum N-aberration中的N_j(需求集的效應與j階交互項互為別名的個數) 中出現的效應, 有可能落入不同階層中, 令C_{jl}為在第l層中需求集裡的效應與j階交互項互為別名的個數, 故N_j可拆解成C_{jk}、C_{jk-1}、$\ldots$、C_{j1}, 亦即$N_j = C_{jk} + C_{jk-1} + \cdots + C_{j1}$, 其中$N_j$主要衡量處理效應互為別名, C_{jl}衡量處理效應互為別名、處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度。

4.2.2　準則

在實驗個數一樣, 在允許區塊結構、設計鍵可變動情況下, 對於固定定義對比, 我們期望所發展之準則能將越低階效應落入特徵值越小的個數越多, 因此我們所發展的準則僅須考量處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度。當固定在估計i階交互項時, 在處理效應估計精確度方面, 我們希望將該組效應落入特徵值越小的個數越多, 因此依序將

$$B_{ik}, B_{ik-1}, \ldots, B_{i1} \tag{4.1}$$

最大化; 當固定在第j階層時, 在處理效應與區塊效應混同方面, 我們期望將越低階效

應落入之個數越多, 故依序將

$$B_{1j}, B_{2j}, \ldots, B_{mj} \tag{4.2}$$

最大化。同時考量處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度, 在4.1式的情況下, 其是將表4.1依序由左到右將B_{ij}最大化, 在4.2式的情況下, 其是將表4.1依序由下到上將B_{ij}最大化, 綜合兩種最大化, 我們可得知須先將B_{1k}最大化, 其次再依序將 (B_{1k-1},B_{2k})、$(B_{1k-2}, B_{2k-1}, B_{3k})\ldots$,$(B_{m-1,1}, B_{m2})$, B_{m1} 最大化, 但由於希望將重要程度較大之處理效應盡量落到特徵值越小階層, 故先將B_{1k-1}最大化、其次再對B_{2k}最大化, 其後面的向量也以相同方式建構。因此在定義對比與實驗個數固定下, 而區塊結構及設計鍵可改變下, 選取好的設計鍵之準則為依序將

$$B_{1k}, B_{1k-1}, B_{2k}, B_{1k-2}, B_{2k-1}, B_{3k}, \ldots, B_{m1} \tag{4.3}$$

最大化, 我們將其準則稱之為精度準則 (efficiency criterion)。

當實驗個數一樣, 在區塊結構、定義對比與設計鍵可變動情況下, 此時須考量處理效應互為別名、處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度, 若考量處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度, 我們須使用精度準則, 對於處理效應互為別名的情況, 我們使用 minimum N-aberration準則, 利用字長綜合4.3式與 minimum N-aberration準則之結合發展出一套準則。在考量處理效應互為別名的情況下, 我們利用 minimum N-aberration準則來選取一個好的部份因子設計, 由於該準則適用於沒有區塊結構的情形, 故其特徵值相當於在有區塊結構裡特徵值最小值, 其值以e_v表示; 又N_j代表著除了可以估計需求集外, 其需求集裡的效應還會與未在需求集的j階交互項互為別名, 因此N_j以

$$R\underbrace{tt\ldots t}_{j}e_v$$

表示, 例如N_2以$Rtte_v$表示。在考量處理效應與區塊效應混同以及處理效應估計精確度的情況下, 其準則為依序將4.3式最大化, 第1至$k-1$層之特徵值分別以e_{U_1}、$e_{U_2}\ldots$、$e_{U_{k-1}}$表示, 而B_{1j}(需求集落到第j層的個數) 以Re_{U_j}表示、B_{ij}以

$$\underbrace{tt\ldots t}_{i}e_{U_j}$$

表示, 因此由4.3式可得知

$$Re_v \gg Re_{U_{k-1}} \gg tte_v \gg Re_{U_{k-2}} \gg tte_{U_{k-1}} \gg ttte_v \gg Re_{U_{k-3}} \gg \ldots \gg \underbrace{tt\ldots t}_{m}e_{U_1}$$

其中≫的含意與2.3.2節中相似。考量處理效應互為別名的情況, 其準則須先將N_2最小化, 故先考慮N_2並將其排入4.3式。N_2=$Rtte_v$且$Re_v \gg Rtte_v \gg ttte_v$, 由於在部分因子設計裡, 為了估計剩下不在需求集裡的2階交互項, 所以我們希望先將需求集裡的效應盡量不與剩下其他2階交互項互為別名, 故

$$Rtte_v \gg tte_v; \tag{4.4}$$

為了盡量先將需求集的效應精確度提升, 因此

$$Re_{U_{k-1}} \gg Rtte_v, \tag{4.5}$$

綜合4.4與4.5式可得知

$$Re_v \gg Re_{U_{k-1}} \gg Rtte_V, \tag{4.6}$$

故依序將B_{1k}, B_{1k-1}最大化,N_2最小化。將N_2最小化後, 還須考慮需求集裡與2階交互項互為別名之效應希望落在越高階階層, 故將C_{2k},C_{2k-1},...,C_{21}最大化。其餘, 也以相同方式建構, 可得知當區塊結構、定義對比以及設計鍵變動時, 我們將該準則稱為精度 minimum N-aberration, 其準則內容如下:
依序將B_{1k}, B_{1k-1}最大化,N_2最小化,$C_{2k}, C_{2k-1}, \ldots, C_{21}, B_{2k}, B_{1k-2}, B_{2k-1}$最大化, N_3最小化, $C_{3k}, C_{3k-1}, \ldots, C_{31}, B_{3k}, B_{1k-3}, B_{2k-2}, B_{3k-1}$最大化,$N_4$最小化...。

第 5 章
設計鍵的搜尋

我們推廣 Franklin 與 Bailey(1977) 提出的一套演算法來得到合格的定義對比子群以建構部份因子設計。因為區塊出現巢狀結構會使得估計效應之精確度不盡相同，一般而言，實驗者希望需求集裡的效應能越精確地被估計，故我們在此發展的演算法可達到此目的。更精確地說，我們先針對允許區塊結構改變的情形，發展演算法，使得利用該演算法便能得到讓需求集裡的所有效應落在特徵值最小階層裡之設計鍵；另外，我們還針對區塊結構不可改變的情況，發展出另一套演算法，使得利用該演算法可得到需求集裡的效應能盡量落在精確度較高階層裡之設計鍵。

5.1 允許區塊結構改變

當區塊結構可改變的情形下，我們發展兩套演算法，使得利用此演算法便能得到讓需求集裡所有效應落到特徵值最小階層之設計鍵。其該兩套演算法分別為-搜尋表與分群方式，其介紹如下:

5.1.1 搜尋表法

在部分因子設計裡，為了估計實驗者已指定的需求集，Franklin與 Bailey(1977) 指出需求集及需求集裡任兩個效應之交乘項皆為不合格的定義對比。然而在具有區塊結構的實驗下，實驗者除了要估計需求集裡所有的效應外，還希望能讓需求集裡所有效應落到特徵值最小的階層。在這種情況下，某些區塊效應將不能成為需求集裡處理效應之區塊效應，我們將其稱為不合格區塊效應 (ineligible plot effect)。由於需求集裡的效應必須落入特徵值最小的階層，故需求集裡處理效應與非特徵值最小階層區塊效

應之交乘項皆為不合格區塊效應。以區塊結構為$2/8(X/Y)$、處理結構為5個2水準因子為例, 若需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AB, AC, AD, AE, BC, BD, BE\},$$

則不合格區塊效應為

$$\{XA, XB, XC, \ldots, XE, XAB, XAC, \ldots, XBE\}, \tag{5.1}$$

由於該區塊結構為$2/8(X/Y)$, 其階層數共有2層, 故非特徵值最小階層僅在第1層, 又因為第1層$n_1 = 2$, 故第1層虛假因子僅有X, 因此X為非特徵值最小階層的區塊效應。

在無區塊結構且處理結構為部份因子設計情況下, 為了讓需求集裡所有效應皆可估計, 可以利用 Franklin 與 Bailey(1977) 所提出演算法找出定義對比子群。在有區塊結構下, 我們推廣類似的概念, 提出一套可估計需求集裡所有效應, 且讓其皆落入特徵值最小階層之演算法, 其程序如下:

步驟0: 依照第4章4.1節所提出區塊結構順序, 並由劣到優的順序改變區塊結構, 且其順序只考量增加n_k的個數, 若其順序最優的區塊結構仍然無法將需求集裡所有效應落入, 則將$n_1 \cdots n_k$增加為$2n_1 \cdots n_k$。

步驟1: 當特徵值最小階層的自由度小於需求集裡效應的個數, 回到步驟0。

步驟2: 找出不合格集合, 不合格定義集合定義如下。若處理結構為完全因子設計, 則不合格集合僅有不合格區塊效應; 若處理結構為部份因子設計, 則不合格集合包含了不合格定義對比與不合格區塊效應。

步驟3: 建構一個表格, 稱之為搜尋表 (search table), 列為因子A_j, 行為特徵值最小階層的區塊效應P_i, 每一個格 (cell) 為行的元素與列的元素相乘P_iA_j。

步驟4:(搜尋設計鍵) $j = 1, D(j) = P_iA_j$。

步驟5:(下一行) $j \leftharpoondown j+1; i(j) \leftharpoondown 0$。

步驟6: $i(j) \leftharpoondown i(j)+1$。

步驟**7:(**檢查是否為合格**)** 檢查$D(1)D(j),\ldots,D(j-1)D(j),D(1)D(2)D(j),\ldots,$ $D(j-2)D(j-1)D(j),\ldots,D(1)\cdots D(j)$是否合格, 若存在某幾個元素相乘落入不合格集合, 則回到步驟6, 若$i(j)$等於最後一層的自由度且仍然存在某幾個元素相乘落入不合格集合, 回到步驟4, 倘若所有組合的設計鍵仍然存在某幾個元素相乘落入不合格集合, 回到步驟0改變區塊結構, 若任幾個元素相乘不落入不合格集合, 則到步驟8。

步驟**8:** 若$j<m$, 則回到步驟5。若$j=m$, 則找到一組設計鍵可讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。

例子5.1: 假設區塊結構為2/4/2、處理結構為2水準5因子, 需求集為

$$\{A,B,C,D,E,AB,AC,AD,AE\},$$

由於該區塊結構最後一層自由度為$8(=2\times4\times(2-1))$ 小於需求集的效應個數, 所以依照第4章4.1節所提出之區塊結構的順序, 我們將區塊結構由2/4/2改變為$2/2/4(X/Y/Z)$, 此時區塊結構為2/2/4之自由度為$12(=2\times2\times(4-1))$ 大於需求集效應的個數。因該處理結構為部份因子設計, 所以不合格集合包含了不合格區塊效應與不合格定義對比。由於非特徵值最小之區塊效應為X,Y,XY, 故不合格區塊效應為需求集裡處理效應與非特徵值最小階層區塊效應之交乘項, 因此該集合為

$$\{XA,YA,XYA,XB,YB,XYB,\ldots,XAE,YAE,XYAE\},$$

而由 Franklin 與 Bailey(1977) 所提出不合格定義對比得知該需求集不合格定義對比為所有主效應及2階交互項、ABC,ABD,ABE,ACD,ACE,ADE, 其建構的搜尋表5.1, 其中行為5個處理因子, 而列為特徵值最小之區塊效應, 且其最後一層區塊效應為有關於Z_1,Z_2,Z_1Z_2的效應, 每一格為行的元素與列的元素相乘, 比如在格為(3,1), 因第3列最後一層的區塊效應為Z_1Z_2、第一行的處理因子為A, 故其 (3,1) 格應為Z_1Z_2A。

第一行先選Z_1A, 第二行若選Z_1B會造成某交乘項$Z_1AZ_1B=AB$屬於不合格定義對比, 因此往第二行的下一個元素-Z_2B, 而Z_2B與Z_1A的交乘項為Z_1Z_2AB, 其屬於合格集合, 故第二行可選擇Z_2B。第三行若選Z_1C, Z_2C與Z_1Z_2C, 其與Z_1A、Z_2B中某幾個交乘項會落在不合格定義對比, 而我們若選擇XZ_1C, 因$XZ_1CZ_1A=XAC$屬

表 5.1: 搜尋表

最後一層區塊效應	A	B	C	D	E
Z_1	Z_1A	Z_1B	Z_1C	Z_1D	Z_1E
Z_2	Z_2A	Z_2B	Z_2C	Z_2D	Z_2E
Z_1Z_2	Z_1Z_2A	Z_1Z_2B	Z_1Z_2C	Z_1Z_2D	Z_1Z_2E
XZ_1	XZ_1A	XZ_1B	XZ_1C	XZ_1D	XZ_1E
XZ_2	XZ_2A	XZ_2B	XZ_2C	XZ_2D	XZ_2E
XZ_1Z_2	XZ_1Z_2A	XZ_1Z_2B	XZ_1Z_2C	XZ_1Z_2D	XZ_1Z_2E
YZ_1	YZ_1A	YZ_1B	YZ_1C	YZ_1D	YZ_1E
YZ_2	YZ_2A	YZ_2B	YZ_2C	YZ_2D	YZ_2E
YZ_1Z_2	YZ_1Z_2A	YZ_1Z_2B	YZ_1Z_2C	YZ_1Z_2D	YZ_1Z_2E
XYZ_1	XYZ_1A	XYZ_1B	XYZ_1C	XYZ_1D	XYZ_1E
XYZ_2	XYZ_2A	XYZ_2B	XYZ_2C	XYZ_2D	XYZ_2E
XYZ_1Z_2	XYZ_1Z_2A	XYZ_1Z_2B	XYZ_1Z_2C	XYZ_1Z_2D	XYZ_1Z_2E

表 5.2: 不同階層所落入的處裡效應

階層	自由度	處理效應
S_1	1	BC
S_2	2	BD,CD
S_3	12	A,B,C,D,E,AB,AC,AD,AE,ABC,ABD,BCD

於不合格區塊效應, 因此往下一個元素搜尋,XZ_2C與Z_1A、Z_2B中任幾個的交乘項屬於合格集合, 故第三行選擇XZ_2C。第四行若選$Z_1D, Z_2D, Z_1Z_2D, XZ_2D, XZ_1Z_2D$, 其會與$Z_1A, Z_2B, XZ_1C$中某幾個的交乘項落在不合格定義對比, 而若選$XZ_1D, YZ_1D$, 其與$Z_1A$的交乘項會屬於不合格區塊效應, 直到$YZ_2D$與$Z_1A$、$Z_2B$、$XZ_2C$中任幾個的交乘項屬於合格集合, 同理第五行直到$XYZ_2E$屬於合格集合。故設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = XZ_2, D = YZ_2, E = XYZ_2,$$

其定義對比為$I = BCDE$,

各階層所落入的效應如表5.2。我們由表5.2可注意到需求集皆落入特徵值最小階層, 而特徵值最小階層除了需求集之效應外, 尚有ABC, ABD, BCD落入。以上所得

僅為一組合格的設計鍵, 若欲搜尋其他不同設計鍵, 可由我們所提出演算法步驟4再往下搜尋。

5.1.2　分群法

若實驗者希望需求集裡所有的效應落到特徵值最小的階層, 則在搜尋設計鍵時, 我們可利用需求集找第k層限制型態之方式來加速搜尋。處理結構為完全因子設計, 只要$p \leq n_k - 1$時, 必定會存在設計鍵使得需求集裡的效應落到特徵值最小階層。在此先假設區塊結構為$2^{\beta_1}/2^{\beta_2}/\cdots/2^{\beta_k}(U_1/U_2/\cdots/U_{k-1}/V)$、處理結構為$m$個2水準的因子, 當我們得到第$k$層最小限制型態後, 便可利用定理4寫出第$k$層最佳限制型態, 其中第$k$層最佳限制型態有$n_k - 1$群 ($n_k = 2^{\beta_k}$), 且假設每一個群體裡有$a_i$個因子, 亦即其限制型態為

$$\{\{A_{1,1}, \ldots, A_{1,a_1}\}, \ldots, \{A_{n_k-1,1}, \ldots, A_{n_k-1,a_{n_k-1}}\}\},$$

且$\sum_{i=1}^{i=n_k-1} a_i = m$。可得到其中一組設計鍵如下: 由於$n_k = 2^{\beta_k}$, 所以我們將$\beta_k$個因子設計鍵設為$A_{i1} = V_i, i = 1, \ldots, \beta_k$, 其餘$m - \beta_k$個因子, 其設計鍵必須包含$U$的部份, 若令$A_{ij} = U_{ij}V_i, i = 1, \ldots, \beta_k, j = 2, \ldots, a_i$, 以及$A_{ij} = U_{ij}V_i, i = \beta_k + 1, \ldots, 2^{\beta_k} - 1, j = 1, \ldots, a_i$, 且該$m$個因子設計鍵中混同區塊效應$U, V$的部分滿足下列的式子:

(i) $V_i \neq V_j \; 1 \leq i \leq n_k - 1$

(ii) $U_{ij} \neq U_{lk}$, $U_{ij}U_{lk} \neq U_{rs} \ldots$

(iii) $V_i \neq I, U_{ij} \neq I$

滿足 (i)(ii)(iii) 時, 其所找到的設計鍵可將需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層裡。

倘若處理結構為部份因子設計, 在此介紹一個部份因子設計之因子可分為兩群, 該兩群為基礎因子 (basic factor) 與額外因子 (added factor), 其中若部分因子設計投影到基礎因子則形成完全因子設計, 而額外因子可由基礎因子構成定義對比來生成。我們先找出基礎因子之設計鍵, 其次再利用基礎因子構成定義對比來找額外因子之設計鍵。在找出基礎因子之設計鍵時, 我們可利用需求集來找出出現頻率較高的因子為

基礎因子, 若需求集裡因子出現頻率相近, 則任找$m^* = \sum_{i=1}^{i=k} \beta_i$個因子為基礎因子, 其中在需求集裡僅由$m^*$個基礎因子的效應所形成的集合, 我們稱之為基礎需求集。剩下$m-m^*$額外因子, 我們在搜尋其設計鍵的過程中, 須先定義額外因子之不合格第k層區塊效應, 若需求集為所有m個主效應及某些2階交互項, 則有關某一個額外因子在需求集裡的2階交互項, 其非該額外因子之因子混同區塊效應中V的部份為額外因子之不合格第k層區塊成分, 舉例來說, 若需求集為

$$\{A_1, \ldots, A_m, A_1A_i, A_2A_i, A_iA_j\},$$

且假設A_1, A_2為基礎因子、A_i, A_j為額外因子, 若$A_1 = U_1V_1, A_2 = U_2V_2$, 則$A_i$中$V_i$的不合格第$k$層區塊成分為$\{V_1, V_2, V_j\}$。其設計部分因子之設計程序如下:

步驟0: 由原始需求集寫出第k層最小限制型態, 由第k層最小限制型態之群體數判斷是否$p \leq n_k - 1$。若$p > n_k - 1$時, 依據區塊結構的順序改變區塊結構並增加n_k的個數。

步驟1: 找出m^*個基礎因子並寫下基礎需求集, 利用基礎需求集找出第k層最佳限制型態後, 使用分群法寫出基礎因子的設計鍵。

步驟2: 利用步驟1所得到基礎因子的設計鍵, 寫下會落在特徵值最小階層, 且不在需求集的基礎因子所構成的效應與其對應的區塊效應。

步驟3: 寫下額外因子之不合格第k層區塊成分, 並利用原始需求集得知第k層最小限制型態, 使用定理4得到合格定義對比。

步驟4: 將額外因子指派到會落在特徵值最小階層且不在需求集基礎因子構成的效應, 其中額外因子設計鍵第k層區塊成分不能指派到不合格第k層區塊成分。且額外因子指派到不在需求集裡且落到第k層的效應, 其所造成定義對比須是合格定義對比。若無法找出合格設計鍵, 回到步驟1, 改變區塊結構。

例子5.2: 假設區塊結構為2/4/2、處理結構為5個2水準因子, 需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AB, AC, AD, AE\}.$$

由需求集得知第k層最小限制型態之群體數為2群, 其結構為$\{\{A\},\{B,C,D,E\}\}$, 由於$p > n_k - 1$, 故依據區塊結構的順序並增加n_k, 其改變後的區塊結構為$2/2/4(X/Y/Z)$。因為$2\times 2\times 4 = 2^4 = 2^{5-1}$, 所以該設計有4個基礎因子及1個額外因子, 在需求集的效應裡A出現頻率最高, 故選A當基礎因子, 其餘因子出現頻率相似, 在此選B,C,D當基礎因子、E當額外因子。有關基礎因子A,B,C,D在需求集裡的效應為

$$\{A,B,C,D,AB,AC,AD\},$$

此為基礎需求集。在此基礎需求集上應用定理4可得第k層最佳限制型態為$\{\{A\},\{B\},\{C,D\}\}$, 由於$n_3 = 4 = 2^2$, 所以從第k層最佳限制型態中選$A = Z_1, B = Z_2$; 而$C = U_cZ_1Z_2, D = U_dZ_1Z_2$, 在$U_c \neq U_d$且$U_c, U_d \neq I$的情況下, 我們可得能讓基礎需求集落入特徵值最小階層的一組基礎因子設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = XZ_1Z_2, D = YZ_1Z_2.$$

利用定理1得知不在需求集並落入最小階層的效應為

$$BC = XZ_1, BD = YZ_1, ACD = XYZ_1, BCD = XYZ_2, ABCD = XYZ_1Z_2,$$

由於額外因子E僅與基礎因子A所形成2階交互項屬於需求集, 且因A因子混同區塊效應為Z_1, 故E的不合格第k層區塊成份為$\{Z_1\}$, 亦即E不能指派到其區塊效應包含Z_1的基礎因子效應, 即BC, BD, ACD, 亦即E只能指派到$BCD, ABCD$。利用原始需求集之第k層最小限制型態得知合格定義對比為

$$BCD, BCE, CDE, BDE, BCDE, ABCD, ACDE, ABCE, ABCDE,$$

因$BCDE, ABCDE$皆屬於合格定義對比, 故$E = BCD = XYZ_2$或$E = ABCD = XYZ_1Z_2$皆可讓需求集裡所有的效應落入特徵值最小階層。若選$E = BCD = XYZ_2$, 我們可得知該設計的設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = XZ_1Z_2, D = YZ_1Z_2, E = XYZ_2,$$

其定義對比為$I = BCDE$, 各階層所落的效應如表5.3。若選$E = ABCD = XYZ_1Z_2$, 我們可得知該設計的設計鍵為

$$A = Z_1, B = Z_2, C = XZ_1Z_2, D = YZ_1Z_2, E = XYZ_1Z_2,$$

其定義對比為$I = ABCDE$, 各階層所落的效應如表5.4。

表 5.3: 不同階層所落入的處裡效應

階層	自由度	處理效應
S_1	1	ABC
S_2	2	ABD,CD
S_3	12	A,B,C,D,E,AB,AC,AD,AE,BC,BD,ACD

表 5.4: 不同階層所落入的處裡效應

階層	自由度	處理效應
S_1	1	DE
S_2	2	CE,CD
S_3	12	A,B,C,D,E,AB,AC,AD,AE,BC,BD,BE

5.1.3 兩種搜尋方法優缺點

不論是利用搜尋表法或是使用分群法都可找到能讓需求集的效應落到特徵值最小階層的設計, 此兩種方法皆可得到所有合格的設計, 但分群法會比搜尋表法較快速搜尋到依精準 minimum N-aberration準則的較佳設計鍵。以例子5.1及例子5.2而言, 若定義對比皆為$I = BCDE$情況下, 利用例子5.1-搜尋表所得到設計鍵, 落在第1層與第2層的效應皆為2階交互項 (BC, BD, CD); 然而利用分群方式所得到設計鍵, 落在第1層與第2層的效應僅有1個2階交互項 (CD)。若利用第4章4.2節精準準則來比較來比較這兩個設計, 由於需求集裡所有效應皆落到特徵值最小階層且定義對比皆為$I = BCDE$, 故$B_{1k} = 9, B_{1k-1} = 0$。然而搜尋表法所得到的第一個設計$B_{2k} = 0$, 而分群法所得到的第一個設計$B_{2k} = 2$, 故依照精準準則得知後者所得設計優於前者。其次, 若允許定義對比可變動的情況下, 例子5.2使用分群方式可得到的設計$B_{2k} = 3$, 因此, 利用分群方式所搜尋的設計鍵比搜尋表所得到設計鍵較快速得到較佳的設計鍵。

在另一方面, 搜尋表法可適用的區塊結構不僅只有巢狀區塊結構, 對於交叉區塊結構 (crossing plot structure) 或是巢狀與交叉混合的區塊結構也適用。但是搜尋表法在搜尋過程對於所產生設計鍵須檢查是否屬於不合格集合, 所以搜尋表在搜尋過程較為複雜, 搜尋時間也較長。而利用分群方式所得到設計鍵只適用於區塊結構為巢狀區塊結構; 在搜尋過程由於可直接得到完全因子設計的設計鍵, 故比搜尋表少搜尋一部分的因子設計鍵, 因此搜尋時間較搜尋表短。利用搜尋表與分群方式所搜尋的設計鍵

表 5.5: 搜尋表法與分群法比較

	搜尋表法	分群法
適用區塊結構	巢狀或交叉區塊結構	巢狀區塊結構
搜尋時間 (過程)	較長	較短
所得設計鍵與 精準 minimum N-aberration 準則的關係	無關聯	有關聯

之結果比較如表5.5。

5.2 區塊結構不變

在前一節中, 不論在搜尋表法或分群法所搜尋的設計鍵是建立在允許區塊結構可改變的情況下, 利用該演算法找出可讓需求集裡所有的效應落到特徵值最小階層之設計鍵。然而由於在搜尋表或分群法所得到的設計鍵並無法直接找到依照精度 minimum N-aberration準則最佳的設計, 在本節中, 我們在成本、時間或其他因素之限制致使區塊結構不允許改變的情況下, 依照精度 minimum N-aberration準則, 提出一套可直接獲得最佳設計鍵之演算法。

5.2.1 程序-限制型態法

我們利用指定不同的效應落入不同的階層, 並依各階層該落入的效應集合所形成的限制型態來選取設計鍵。其詳細的演算步驟如下:

步驟**0:** 由需求集得知第k層最小限制型態, 並由其所得到群體數判斷需求集裡的所有效應是否能落到特徵值最小階層, 亦即判斷$p \leq n_k - 1$。

步驟**1**(第k層)**:** 若$p \leq n_k - 1$, 使用定理4得到第k層最佳限制型態; 若$p > n_k - 1$, 使用定理5得到第k層最佳限制型態。若處理結構為部份因子設計時, 檢查需求集中的效應落入第k層的個數是否大於第k層自由度, 當該個數比自由度多時, 依照定理5方式選取下一個限制型態; 當該個數等於或小於自由度時, 依照所得第k層限制型態安排每一個群體的第k層區塊成份, 因此我們可得到每個因子設計鍵中第k層區塊成份。

步驟2(第$k-1$層**):** 將剩下未落入第k層的效應寫出, 並由未落入第k層的需求集效應寫出第$k-1$層限制型態, 若有足夠自由度時, 將未落入第k層的剩下2階交互項效應寫出第$k-1$層限制型態, 並綜合上述的第$k-1$層限制型態寫出所有可能的限制型態。在眾多限制型態中選出可將$B_{3k-1}, B_{4k-1}, \ldots, B_{mk-1}$的值最大化, 即可得知第$k-1$層限制型態。若處理結構為部份因子設計時, 檢查未落入第k層的需求集裡的效應落入第$k-1$層的個數是否大於第$k-1$層自由度, 當該個數比自由度多時, 依照定理5方式選取下一個限制型態; 當該個數等於或小於自由度時, 依照所得第$k-1$層限制型態安排每一個群體的第$k-1$層區塊成份, 因此我們可得到每個因子設計鍵中第$k-1$層區塊成份。

步驟3(N_2最小化**):** 利用 Franklin 與 Bailey(1977) 提出的搜尋表找出合格的定義對比子群。找出合格定義對比子群後, 計算N_2且找出最小的N_2, 刪除不能估計在步驟1及步驟2的第k層及第$k-1$層效應的最小N_2定義對比子群。檢查步驟1及步驟2所得到第k層及第$k-1$層區塊成份是否形成最小N_2之合格定義對比子群, 若無法形成最小N_2的合格定義對比子群, 則回到步驟1及步驟2修改第k層及第$k-1$層區塊成份, 倘若修改第k層及第$k-1$層區塊成份仍然無法形成最小N_2的合格定義對比子群, 則回到步驟1改限制型態。其次將造成$N_2 \neq 0$之需求集裡的效應寫出, 觀察該效應是否落入第k層或第$k-1$層, 若該效應未落入第k層或第$k-1$層, 則利用其效應寫出第$k-2$層限制型態及區塊成份的安排。

步驟4(第$k-j$層**):** $j=2$, 將剩下未落入的效應寫出, 若仍然有需求集及2階交互項未落入第$k-j+1$後階層時, 由需求集、剩下2階交互項未落入的效應寫出第$k-j$層限制型態, 且在$j=2$結合步驟3所寫出的第$k-2$層限制型態及區塊成份的安排, 在$j>2$結合步驟5所寫出的第$k-j-1$層限制型態及區塊成份的安排。其次再從眾多限制型態中選出可將$B_{3k-j}, B_{4k-j}, \ldots, B_{mk-j}$最大化。若處理結構為部分因子設計時, 須檢查第$k-j$層限制型態可將需求集裡剩下未落入的效應落入第$k-j$層的個數是否大於第$k-j$層自由度。若該個數大於第$k-j$層自由度時, 則利用定理5方式選取下一個限制型態。當該個數等於或小於自由度時, 依照所得第$k-j$層限制型態安排每一個群體的第$k-j$層區塊成份, 因此我們可得到每個因子設計鍵中第$k-j$層區塊成份。

步驟5(N_{j+1}最小化**):** 由步驟3所得到最小N_2的合格定義對比子群中, 計算N_{j+1}並找

出最小的N_{j+1}, 刪除不能估計在步驟4中落入第$k-j$層效應的最小N_{j+1}定義對比子群。檢查步驟4所得到第$k-j$層區塊成份是否形成最小的N_{j+1}之合格定義對比子群, 若無法形成最小N_{j+1}的合格定義對比子群, 則回到步驟4修改第$k-j$層區塊成份, 倘若修改第$k-j$層區塊成份仍然無法形成最小N_{j+1}的合格定義對比子群, 則回到步驟4改限制型態。其次將造成$N_{j+1}\neq 0$之需求集裡的效應寫出, 並由其效應寫出第$k-j-1$層限制型態及區塊成份的安排。

步驟**6:** 令$j=j+1$, 回到步驟4, 直到$j=k-1$即可得到最佳設計鍵。

定義對比已事先決定時 (例如處理結構為完全因子設計), 則上述步驟3與步驟5可忽略, 此時該演算法得到即為區塊結構不變下依照精度準則的最佳設計鍵。

5.2.2　過程合理化

在區塊結構為$n_1/n_2/\cdots/n_{k-1}/n_k(U_1/U_2/\cdots/U_{k-1}/V)$ 及處理結構有m個2水準因子時, 每個因子的設計鍵可寫為$A_i=U_{1i}U_{2i}\cdots U_{k-1i}V_{ki}$, 由設計鍵形式得知其每一層區塊成份的選取與別層區塊成份的選取無關。

依照精度 minimum N-aberration 準則得知該準則先將B_{1k}最大化, 由於每一層區塊成份的安排是無關的, 故第k層限制型態須依序將

$$B_{1k}, B_{2k}, \ldots, B_{mk}$$

最大化, 若處理結構為部份因子設計且第k層自由度小於需求集落入第k層的個數時, 代表需求集裡的效應會互為別名, 因此會造成需求集裡某些效應無法估計, 故我們須合併某些群體, 且其合併方式依照定理5方式得到另一個限制型態。當我們得到需求集落入第k層的個數不大於第k層自由度之最佳限制型態時, 將其每一個群體安排第k層區塊成份。精準 minimum N-aberration準則中其次是將B_{1k-1}最大化, 因每一層區塊成份的安排是無關的, 故對第$k-1$層限制型態須依序將

$$B_{1k-1}, B_{2k-1}, \ldots, B_{mk-1}$$

最大化, 同理, 在處理結構為部分因子設計情況且第$k-1$層自由度小於需求集落入第$k-1$層的個數時, 代表需求集裡的效應會互為別名, 因此會造成需求集裡某些效應無法估計, 故我們須合併某些群體, 且其合併方式依照定理5方式得到另一個限制型

態。當我們得到需求集落入第$k-1$層的個數不大於第$k-1$層自由度之最佳限制型態時, 將其每一個群體安排第$k-1$層區塊成份。

依照精度 minimum N-aberration 準則, 接下來是將N_2最小化, 所以我們先計算每一組合格定義對比子群的N_2, 再找最小N_2。再依序對$C_{2k}, C_{2k-1}, \ldots C_{21}$最大化, 因第$k$層及第$k-1$層限制型態固定, 故將造成$N_2 \neq 0$之需求集裡的效應寫出, 若其效應不落入第$k$層及第$k-1$層, 利用其效應寫出第$k-2$層限制型態及區塊成份的安排。同理, 對第$k-j$層限制型態可依序將$B_{1k-j}, B_{2k-j}, \ldots, B_{mk-j}$最大化, N_{j+1}最小化後, 再將需求集與$j+1$交互項互為別名的效應依序最大化, j從2開始直到$j=k-1$停止分群。

5.2.3　例子

以下我們舉兩個例子來說明, 在處理結構為完全因子設計及部分因子設計的情況下, 如何應用該程序得到最佳的設計鍵。

例子5.3(完全因子設計): 當區塊結構為$2/4/4/2(W/X/Y/Z)$ 以及處理結構為6個2水準的因子, 需求集為

$$\{A, B, C, D, E, F, AB, AC, AD, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, CF\}.$$

步驟0: 利用需求集得知第k層最小限制型態為$\{\{A\}, \{B, C\}, \{D, E, F\}\}$, 其群體數$p=3$, 因$p > n_k - 1$, 故該區塊結構無法讓需求集裡所有效應落入最後一層。

步驟1(第4層): 因$p > n_k - 1$, 利用定理5得知第4層最佳型態為

$$\{\{A, B, C\}, \{D, E, F\}\},$$

並將$\{A, B, C\}$第4層區塊成份分配為I、$\{D, E, F\}$第4層區塊成份分配為Z。

步驟2(第3層): 因為$\{A, B, C\}$的第4層區塊成份為I, 故需求集的效應未能落入特徵值最小的階層有

$$\{A, B, C, AB, AC\},$$

利用此集合我們可將$\{A, B, C\}$分群, 其可分成$\{\{A\}, \{B, C\}\}$或是分成$\{\{A\}, \{B\}, \{C\}\}$。由於主效應A, B, C屬於需求集且為了將A, B, C落入第3層, 故A, B, C第3層區塊成份不能指派到I。因為第3層包含I有4個區塊成份, 且希望將未在需求集的2階交互

表 5.6: 不同效應落入不同階層的個數

	S_1	S_2	S_3	S_4
需求集合	0	0	5	10
2階交互項	0	0	4	2
3階交互項	0	4	6	10
4階交互項	1	2	6	6
5階交互項	0	0	3	3
6階交互項	0	0	0	1

項BC, DE, DF, EF落入第3層, 所以第3層限制型態可分成

$$\{\{A, D\}, \{B, E\}, \{C, F\}\}, \{\{A, F\}, \{B, D\}, \{C, E\}\}, \ldots, \{\{F\}, \{A, D\}, \{B, E\}, \{C\}\},$$

我們希望從眾多個第3層限制型態能依序將B_{33}, B_{43}, B_{53}最大化, 但這些第3層限制型態的B_{33}, B_{43}, B_{53}個數皆一樣, 因此我們可從這些限制型態任選一個, 若第3層限制型態選$\{\{F\}, \{A, D\}, \{B, E\}, \{C\}\}$, 將$\{F\}$第3層區塊成份分配為$I$、$\{A, D\}$第3層區塊成份分配為$Y_1$、{B,E}第3層區塊成份分配為$Y_2$, 以及$\{C\}$第3層區塊成份分配為$Y_1Y_2$。

步驟3(第2層): 剩下尚未安排至第3、4層的3階交互項及4階交互項有

$$\{ABC, ADF, BEF, CDE, ABDE, BCDF, ACEF\},$$

利用此集合可得到第2層限制型態可為

$$\{\{A, B, C\}, \{D, E, F\}\}, \{\{A, E\}, \{B, D\}, \{C, F\}\}, \{\{A, B, D\}, \{C, E, F\}\} \ldots,$$

然而這些第2層限制型態的B_{32}, B_{42}個數皆一樣, 若第2層限制型態選$\{\{A, B, D\}, \{C, E, F\}\}$, 則將$\{A, B, D\}$第2層區塊成份分配為$X_1$、$\{C, E, F\}$第2層區塊成份分配為$X_2$。

步驟4(第1層): 剩下1個4階交互項$BCDF$, 故第1層限制型態可為$\{\{A, B\}, \{C, D, F\}\}$, 並將$\{A, B\}$第1層區塊成份分配為$I$、$\{C, D, F\}$第1層區塊成份分配到$W$。

由步驟1到步驟4得知6個因子的設計鍵為

$$A = X_1Y_1, B = X_2Y_2, C = WX_1X_2Y_1Y_2, D = WX_2Y_1Z, E = X_1Y_2Z, F = WX_1X_2Z.$$

各層所落的效應個數如表5.6。

例子5.4(部分因子設計): 在例子5.2中, 區塊結構為$2/4/2(X/Y/Z)$、處理結構為5個2水準因子, 需求集為

$$\{A, B, C, D, E, AB, AC, AD, AE\},$$

由需求集得知第3層最小限制型態為$\{\{A\}, \{B, C, D, E\}\}$, 因$p > n_k - 1$, 所以目前區塊結構無法將需求集裡所有的效應落入特徵值最小的階層裡。由定理5得知第3層最佳限制型態為$\{\{A\}, \{B, C, D, E\}\}$且有一個群體需分配到$I$, $\{A\}$第3層區塊成份分配到I及$\{B, C, D, E\}$第3層區塊成份分配到Z, 可將B_{1k}最大化, 而需求集裡落入第3層的效應為$B, C, D, E, AB, AC, AD, AE$, 亦即$B_{1k} = 8$等於第3層自由度 ($8=2 \times 4 \times (2-1)$)。

其次, 我們希望將$B_{12}, B_{22}, \ldots$最大化, 因第2層自由度為6(=2×(4-1)), 且需求集裡未落入第3層僅有A效應, 故$B_{12} = 1, B_{22} = 5(= 6 - 1)$, 因此第2層限制型態可為

$$\{\{A, B\}, \{C, D\}, \{E\}\}, \{\{A, C\}, \{B, D\}, \{E\}\}, \ldots,$$

若我們選$\{\{A, C\}, \{B, D\}, \{E\}\}$為第2層限制型態, 且將$\{A, C\}$第2層區塊成份分配到$Y_1$、$\{B, D\}$第2層區塊成份分配到$Y_2$及$\{E\}$第2層區塊成份分配到$Y_1Y_2$。由於第3層最小限制型態具唯一性, 因此由定理6得知合格定義對比為

$$BCD, BCE, CDE, BDE, BCDE, ABCD, ACDE, ABCE, ABCDE,$$

然而$BCDE, ABCDE$的$N_2 = 0$, 而$BCDE$會有2階交互項彼此互為別名, 故$B_{22} < 5$, 因此不選$BCDE$為定義對比。我們選$ABCDE$, 但第2層限制型態中區塊成份安排無法得到$ABCDE$的定義對比, 故修改第2層限制型態的區塊成份, 將$\{A, C\}$第2層區塊成份分配到Y_1、$\{B, D\}$第2層區塊成份分配到Y_2及$\{E\}$第2層區塊成份分配到I。第1層自由度為1, 我們只能將$B_{21} = 1$放入第1層,

又在第3層及第2層限制型態得知BD未落入第3層及第2層, 故我們將BD放入第1層, 其第1層限制型態為

$$\{\{B\}, \{A, C, D, E\}\},$$

將$\{B\}$第1層區塊成份分配到I、$\{A, C, D, E\}$第1層區塊成份分配到X, 且第1層限制型態中區塊成份安排可得到$ABCDE$的定義對比。故該組設計鍵為

$$A = XY_1, B = Y_2Z, C = XY_1Z, D = XY_2Z, E = XZ,$$

表 5.7: 不同階層所落入的處理效應

階層	自由度	處理效應
S_1	1	BD
S_2	6	A,BC,BE,CD,CE,DE
S_3	8	B,C,D,E,AB,AC,AD,AE

各階層所落的效應如表5.7。

第 6 章
結論

當實驗裡有區塊結構時, 其各階層估計效應的精確度不盡相同, 一般而言, 實驗者希望能精確估計實驗者所指定的需求集, 因此我們的研究重點主要在尋找能精確估計需求集裡效應的設計鍵。本文假設在區塊結構為$n_1/\cdots/n_k$且$n_1,\ldots,n_k$皆為2的冪次方、處理結構為m個2水準因子, 且假設需求集為所有主效應及某些2階交互項, 其所得到結果如下:

1. 評判設計鍵可否將需求集裡所有效應落到特徵值最小階層

   利用第3章所描述兩種分群結構-第k層分群型態及第k層限制型態, 若第k層最小限制型態包含在第k層分群型態裡, 則該組設計鍵可讓需求集裡所有效應落到特徵值最小階層。

2. 對於給定的區塊結構, 評判是否存在設計鍵讓需求集裡所有效應皆落到特徵值最小階層

   利用第3章的其中一種分群結構-第k層最小限制型態, 第k層最小限制型態之群體數p與區塊結構裡最後一層的個數n_k, 若滿足$p \leq n_k - 1$的關係, 則目前區塊結構即可存在讓需求集裡所有效應皆落到特徵值最小階層的設計鍵。

3. 最佳的第k層限制型態

   當存在許多第k層限制型態皆能讓需求集裡所有效應落到最後一層時, 為了讓更多不在需求集中的2階交互項落入特徵值最小階層, 其第k層最佳限制型態的群體數應為$n_k - 1$群且每個群體群內個數應相似。若第k層最小限制型態不滿

足$p \leq n_k - 1$時, 則我們須將原本p群合併成n_k群, 且儘量讓每個群體群內個數相似。

4. 區塊結構的優劣

   當$n_1 n_2 \cdots n_k$固定時, 對於不同區塊結構於各階層估計處理效應不盡相同, 為了增加估計效應精確度的個數, 本文在第4章提出了越底層自由度越大的區塊結構越優。

5. 評判設計鍵準則

   當$n_1 n_2 \cdots n_k$固定, 在處理結構、區塊結構、設計鍵可變動的情況下, 我們在第4章發展了精準 minimum N-aberration準則, 其內容為依序將B_{1k}, B_{1k-1}最大化,N_2最小化,$C_{2k}, C_{2k-1} \ldots, C_{21}, B_{2k}, B_{1k-2}, B_{2k-1}$最大化,$N_3$最小化, C_{3k} ,$C_{3k-1}, \ldots, C_{31}, B_{3k}, B_{1k-3}, B_{2k-2}, B_{3k-1}$最大化,$N_4$最小化. . .。

6. 搜尋設計鍵

   在允許區塊結構可改變情況下, 我們提出演算法來搜尋讓需求集裡所有效應落到特徵值最小階層的設計鍵, 其搜尋此類設計鍵的方法有兩種-搜尋表法與分群法。若以搜尋的時間來考量, 分群法搜尋時間較短且能得到較佳的設計鍵。在不允許區塊結構改變情況下, 利用評判設計鍵準則搜尋最佳的設計鍵, 搜尋程序由每一層所希望落入的效應得到每一層的限制型態, 其限制型態先從最底層寫起。

本篇論文所發展的演算法與 Franklin 與 Bailey(1977) 所發展的演算法最大差異在於本論文考慮了需求集裡效應有不同的估計精確度的問題。另一方面, 對於評判設計的優劣, Ke 與 Tang(2003) 提出 minimum N-abberation來評判無區塊結構之可估計需求集定義對比子群, 而本文提出精準 minimum N-aberration 準則來評判有區塊結構的設計鍵, 且在$n_1 n_2 \cdots n_k$固定下, 排列不同區塊結構的優劣。在最佳設計方面, Franklin與 Bailey(1977) 所發展的演算法僅能估計需求集, 對於最佳設計, 需先得知所有能估計需求集的設計, 其次再利用 Ke 與 Tang(2003) 所提出 minimum N-abberation 得到最佳設計, 本文為了減少搜尋時間, 發展一套可直接得到最佳設計鍵的演算法。

參考文獻

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

[**2**]Cheng, S.-W. and Wu, C.F.J.(2002). "Choice of optimal blocking schemes in two-level and three-level designs," *Technometrics*, 44, 269-277.

[**3**]Franklin, M.F. and Bailey, R.A.(1977). "Selection of defining contrasts and confounded effects in two-level experiments," *Appl.Statist.*, 26, 321-326.

[**4**]Franklin, M.F.(1985). "Selection of defining contrasts and confounded effects in p^{n-m} factorial experiments," *Technometrics*, 27, 165-172.

[**5**]Greenfield, A.A.(1975). "Selection of defining contrast in two-level experiments," *Appl.Statist.*, 25, 64-67.

[**6**]Greenfield, A.A.(1977). "Selection of defining contrast in two-level experiments-a modification," *Appl.Statist.*, 27, 78.

[**7**]Ke, W. and Tang, B.(2003). "Selecting 2^{n-m} designs using a minimum abberation criterion when some two-factor interactions are important," *Technometrics*, 45, 352-360.

[**8**]Nelder, J.A.(1965). "The analysis of randomized experiments with orthogonal block structure.I.Block structure and the null analysis of variance," *Proceedings of the Royal Society of London.Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 283, 147-162.

[**9**]Patterson, H. D. and Bailey, R. A.(1978). "Design keys for factorial experiments," *Appl.Statist.*, 27, 335-343.

[**10**]Wu, C.F.J. and Chen, Y.(1992). "A graph-aided method for planning two-level experiments when certain interactions are important," *Technometrics*, 34, 162-175.