

品質與可靠度工程實驗室

Quality and Reliability Engineering Lab.

Ch6 二階反應曲面法-實驗設計

授課教授: 童超塵 老師

實驗室網址 永久: http://campusweb.yuntech.edu.tw/~qre/index.ht

目前: http://140.125.88.116/QRE

議程

- 1. 二階反應曲面實驗設計簡介
- 2. 中央合成設計
- 3. Box-Behnken設計
- 4. 最佳化準則設計
- 5. 隨機產生設計
- 6. 二階反應曲面實驗設計之比較

6.1 二階反應曲面實驗設計簡介

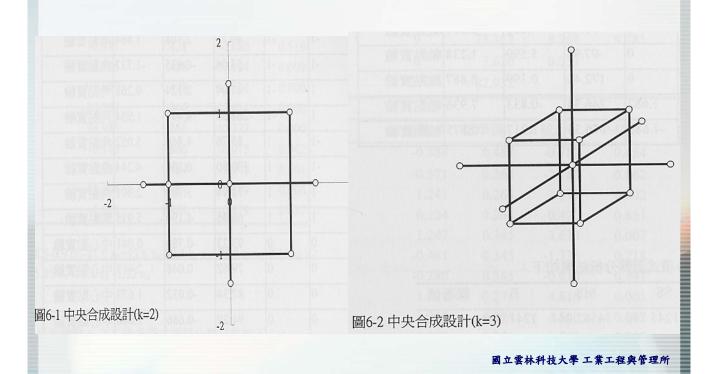
- •二階近似函數有1+2k+k(k-1)/2個參數,因此至少需 1+2k+k(k-1)/2個設計點,且因有二次曲率項,所以因子 至少要有三水準。如k=2,3,4,5,6,7則至少需6, 10,15,21,28,36個設計點。
 - ·二階反應曲面實驗可由一階反應曲面實驗擴充得到,以節省實驗成本。
 - 本章將介紹四種二階反應曲面實驗設計:
 - ▶中央合成設計
 - ▶Box-Behnken設計
 - ▶最佳化準則設計
 - ▶隨機產生設計

國立雲林科技大學工業工程與管理所

1. 中央合成設計

- 中央合成設計原理:估計係數變異之最小化 中央合成設計由下列三種實驗構成:
 - 1. 角點實驗:因為二階模型含二因子交互作用,因 此須採解析度V以上之因子設計實驗。
 - 軸點實驗:因為二階模型含二次曲率作用,因此 在軸線上距中心點α處(二端)進行實驗。又為 了使實驗設計具有可旋性,須令α=√F,其中F 為角點實驗之因子設計實驗數。
 - 3. 中心點實驗:因為要使中心點之預測變異合理 化,因此要有重複實驗的中心點實驗。一般而 言,重複實驗次數 (n_c) 取3至5。

以2因子與3因子為例,其中央合成設計的實驗點分佈 如下圖



 例題6.1 二階模型實驗設計1:中央合成設計 延續例題5.4半導體晶圓問題,假設經過一

階反應曲面法之參數優化過程後,得到一個最佳設計點,該點曲率效果顯著,故須改採二階反應曲面法之參數優化策略。此外為了滿足其它次要的品質特性需求,實驗時的反應變數多出二個。試以該點為中心點,以中央合成設計法作

- 1. 實驗設計
- 2. 模型建構

• (1) 實驗設計

例題5.4之一階模式實驗設計為具中心點實驗 (n_c=4)之因子實驗設計,故只要再增加軸點實驗,就可構成二階模式實驗設計之中央合成設計。軸點實驗的參數

 $\alpha = \sqrt[4]{F} = \sqrt[4]{8} = 1.682$

實驗設計如下表第2-4行,實驗數據假設如下表第5-7行:

No.	x,	x_2	<i>x</i> ₃	<i>y</i> 1	y ₂	y_s	說明
1	-1	-1	-1	49.75	2.108	1.864	角點實驗
2	1	-1	-1	58.06	-0.635	-1.737	角點實驗
3	-1	1	-1	47.04	2.124	0.268	角點實驗
4	1	1	-1	-268.53	4.401	1.934	角點實驗
5	-1	-1	1	85.76	4.860	5.052	角點實驗
6	1	-1	1	390.50	0.304	4.244	角點實驗
7	-1	1	1	78.98	3.789	2.001	角點實驗
8	1	1	1	66.86	4.190	5.935	角點實驗
9	0	0	0	93.23	-0.780	0.041	中心點實驗
10	0	0	0	79.62	0.046	2.415	中心點實驗
11	0	0	0	87.34	-0.032	1.673	中心點實驗
12	0	0	0	94.29	-0.686	1.080	中心點實驗
13	1.682	- 0	0	72.30	2.167	1.636	軸點實驗
14	-1.682	0	0	71.48	4.059	2.379	軸點實驗
15	0	1.682	0	-97.95	5.599	1.238	軸點實驗
16	0	-1.682	0	172.40	0.199	0.867	軸點實驗
17	0	0	1.682	246.34	-0.833	7.936	軸點實驗
18	0	0	-1.682	-76.33	1.217	0.875	軸點實驗

(2) 模型建構

反應變數 yı 之二階多項式迴歸分析結果如下:

	自由度	SS	MS	F	顯著值
迴歸	9	311245.746	34582.861	1241.010	0.000
殘差	8	222.934	27.867		
總和	17	311468.680			

(5.2)	係數	標準誤	t 統計	P-値
截距	88.606	2.636	33.619	0.000
x_{I}	-0.971	1.428	-0.680	0.516
x_2	-81.595	1.428	-57.124	0.000
x_3	93.607	1.428	65.534	0.000
x_1x_2	-80.093	1.866	-42.914	0.000
x_1x_3	74.985	1.866	40.177	0.000
$x_{2}x_{3}$	-0.140	1.866	-0.075	0.942
x_1^2	-5.851	1.484	-3.942	0.004
x_2^2	-18.104	1.484	-12.199	0.000
x_3^2	-1.215	1.484	-0.819	0.437

 y_i =88.6-0.97 x_i -81.6 x_2 +93.6 x_3 -80.1 x_1 x_2 +75.0 x_1 x_3 -0.14 x_2 x_3 +技大學 工業工程與管理所 -5.85 x_1^2 -18.1 x_2^2 -1.22 x_3^2

□ 7万 約条由人	y ₂ 之二階多項式迴歸分析結果如下	
IV IIE MENTEN	V2 / 以答えが日子(計画をサイトにを言うまり) ト	
/_//PA	7/K	

	自由度	SS	MS	F	顯著值
迴歸	9	75.312	8.368	8.785	0.003
殘差	8	7.620	0.953		
總和	17	82.932			

	係數	標準誤	t 統計	P-値
截距	-0.384	0.487	-0.787	0.454
X_I	-0.571	0.264	-2.163	0.062
X_2	1.241	0.264	4.699	0.002
X_3	0.124	0.264	0.470	0.651
x_1x_2	1.247	0.345	3.614	0.007
x_1x_3	-0.461	0.345	-1.336	0.218
x_2x_3	-0.280	0.345	-0.810	0.441
x_1^2	1.321	0.274	4.816	0.001
x_2^2	1.246	0.274	4.540	0.002
x_3^2	0.289	0.274	1.053	0.323

學理所

反應變數 y₃ 之二階多項式迴歸分析結果如下:

	自由度	SS	MS	F	顯著值
迴歸	9	85.945	9.549	20.467	0.000
殘差	8	3.733	0.467		
總和	17	89.678			

	係數	標準誤	t 統計	P-値
截距	1.308	0.341	3.835	0.005
x_{l}	-0.004	0.185	-0.023	0.982
x2	0.098	0.185	0.530	0.610
<i>x</i> ₃	1.961	0.185	10.609	0.000
x_1x_2	1.251	0.241	5.181	0.001
x_1x_3	0.633	0.241	2.620	0.031
x_2x_3	-0.430	0.241	-1.779	0.113
x_l^2	0.225	0.192	1.169	0.276
x_2^2	-0.113	0.192	-0.589	0.572
x_3^2	1.072	0.192	5.583	0.001

 y_3 =1.31+0.10 x_2 +1.96 x_3 +1.25 x_1 x_2 +0.63 x_1 x_3 -0.43 x_2 x_3 +0.255 x_1^2 -0.113 x_2^2 +1.072 x_3^2

工業工程與管理所

•中央合成設計性質:預測變異之分怖與可旋性

預測變異可用前章(5-6)式求得

$$Var\left[\hat{y}(x)\right] = x^{(m)'}(X'X)^{-1}x^{(m)} \bullet \sigma^2$$

可旋性是指預測變異Vary(x) 在距中心點等距處等值,這樣的分佈十分合理,是實驗者樂於看到的性質。中央合成設計具有可旋性或近似可旋性的性質。

•中央合成設計變形:面心式中央合成設計

面心式中央合成設計是中央合成設計的變形,它 將實驗分佈在立方體內,故軸點實驗是位在軸線上距中 心點距離1處(二端)。當正規的中央合成設計之軸點實 驗超過可行實驗範圍時,面心式中央合成設計是其替代 方案。

• 中央合成設計區集:因子區集與軸區

二階實驗設計同樣也有區集設計問題,其設計要訣是將實驗分成因 子區集與軸區集二部分。例如二因子二區集之設計如下:

因子	區集		軸區组	集
x_1	x_2		x_1	x_2
-1	-1		$-\sqrt{2}$	0
-1	1	- A - 1	$\sqrt{2}$	0
1	-1	01 0	0	$-\sqrt{2}$
1	1		0	$\sqrt{2}$
0	0	01 16	0	0
0	0	4 2	0	0

三因子三區集之設計如下:

因子區	集1	28 [2,37	因子區集	₹2	2,000	軸區集	VII M	No SEE
x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	<i>x</i> ₃
-1	-1	-1	1	-1	-1	$-\alpha$	0	0
1	1	-1	-1	1	-1	α	0	0
1	-1	1	-1	-1	1	0	$-\alpha$	0
-1	1	1	1	1	1	0	α	0
0	0	0	0	0	0	0	0	$-\alpha$
0	0	0	0	0	0	0	0	α
						0	0	0
						0	0	0
						0	0	0

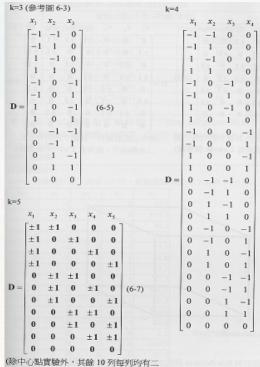
科技大學 工業工程與管理所

• 其它更複雜的區集設計可查表,如下表

因子數目(k)	2	3	4	5	5: ¹ / ₂ 部份	6	$6:\frac{1}{2}$ 部份	7	$7:\frac{1}{2}$ 部份
			因子	區集					
因子部份點數	4	8	16	32	16	64	32	128	64
因子部份區集數	1	2	2	4	1	8	2	16	8
每部份點數	4	4	8	8	16	8	16	8	8
每部份加入之中心		140	- 3.533	1	100				
點數	3	2	2	2	6	1	4	1	1
每部份總點數	7	6	10	10	22	9	20	9	9
			軸	區集					
軸部份點數	4	6	8	10	10	12	12	14	14
加入之中心點數	3	2	2	4	1	6	2	11	4
軸部份總點數	7	8	10	14	11	18	14	25	18
正交區集 α 値	1.414	1.633	2.000	2.366	2.000	2.828	2.366	3.364	2.828
可旋性區集 α 値	1.414	1.682	2.000	2.378	2.000	2.828	2.378	3.333	2.828
總點數	14	20	30	54	33	90	54	169	90

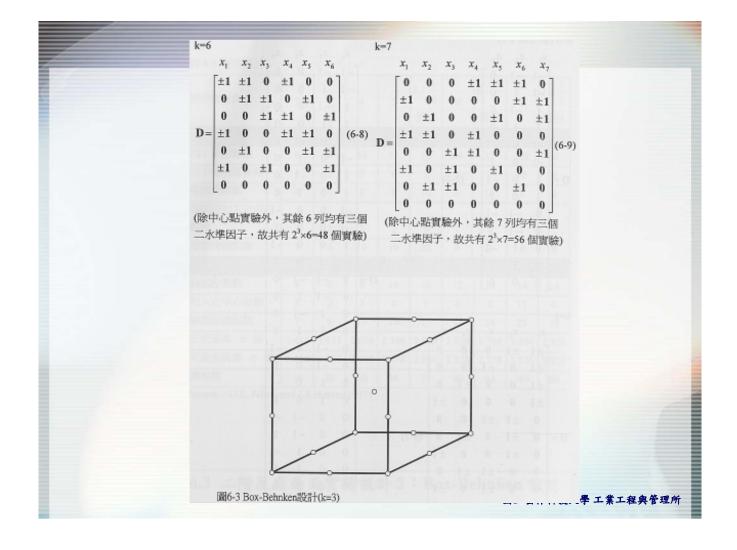
3. Box-Behnken設計

Box-Behnken設計是除了中央合成設計外,另一種重要的二階反應曲面實驗設計,當因子數k為3至7時其設計如下:



個二水準因子,故共有 22×10=40 個實驗)

國立雲林科技大學工業工程與管理所



中央合成設計與Box-Behnken設計之比較如下表所示, 可以看出二者的實驗次數大致接近。

	實驗次數(不含中心點實驗)						
因子數	中央合成設計	Box-Behnken 設計					
2	8 (=2 ² +2×2)	無此設計					
3	14 (=2 ³ +2×3)	12					
4	24 (=2 ⁴ +2×4)	24					
5	26 (=2 ⁵⁻¹ +2×5)	40					
6	44 (=2 ⁶⁻¹ +2×6)	48					
7	78 (=2 ⁷⁻¹ +2×7)	56					

國立雲林科技大學工業工程與管理所

• 例題6.2 二階模型實驗設計2:Box-Behnken設計

延續例題6.1半導體晶圓問題,但改採Box-Behnken設計。試作

- 1. 實驗設計
- 2. 模型建構

• (1) 實驗設計

n_c = 4,實驗設計如下表第2-4行,實驗數據假設如下表第五

行(只以y₁為例)

No.	x_1	x_2	<i>x</i> ₃	<i>y</i> ₁	
1	-1	-1	0	62.6	
2	-1	1	0	175.2	
3	1	-1	0	84.1	
4	1	1	0	72.7	
5	-1	0	-1	75.5	
6	-1	0	1	-81.6	
7	1	0	-1	-14.7	
8	1	0	1	53.3	
9	0	-1	-1	391.5	
10	0	-1	1	89.5	
11	0	1	-1	230.9	
12	0	1	1	62.6	
13	0	0	0	1.2	
14	0	0	0	-269.5	
15	0	0	. 0	97.3	
16	0	0	0	79.9	雲林科技大學 工業工程與管理所

• (2) 模型建構

反應變數y₁之二階多項式迴歸分析結果如下:

	自由度	SS	MS	F	顯著值
迴歸	9	168652.1	18739.13	482.726	7.01E-08
殘差	6	232.9163	38.81938		
總和	15	168885			

	係數	標準誤	t 統計	P-値
截距	86.906	3.115	27.896	1.4E-07
x_I	-2.638	2.202	-1.197	0.276154
x_2	-80.505	2.202	-36.546	2.8E-08
x_3	91.222	2.202	41.411	1.33E-08
x_1x_2	-79.758	3.115	-25.602	2.34E-07
x_1x_3	76.312	3.115	24.496	3.04E-07
x_2x_3	-4.717	3.115	-1.514	0.180727
x_1^2	-6.494	3.115	-2.084	0.082195
x_2^2	-17.051	3.115	-5.473	0.001553
x_3^2	-1.784	3.115	-0.572	0.587658

 $y_{l} = 88.9 - 2.6x_{l} - 80.5x_{2} + 91.2x_{3} - 79.8x_{l}x_{2} + 76.3x_{l}x_{3} - 4.7x_{2}x_{3} - 6.5x_{l}^{2} - 17.1x_{2}^{2} - 1.8x_{3}^{2} = \text{\#Implies}$

4. 最佳化準則設計

- · 當實驗預算十分有限的情況下,前二節所提的方法可能都無法實施。例如五因子之二階實驗設計,假設中心點實驗重複次數5次,由表6-2知,至少要進行26+5=31次實驗。如果實驗預算只允許作25次實驗,這時需仰賴電腦依一定的準則來設計實驗。
- 本章前面曾提到二階函數有1+2k+k(k-1)/2個參數, 因此至少需1+2k+k(k-1)/2個設計點,故k=5則至少需21個 設計點。因此以25次實驗來建構二階反應曲面是可行 的,它尚保存自由度25-21=4之誤差方差估計能力。

國立雲林科技大學工業工程與管理所

 反應曲面實驗設計的目的在於以最少的實驗次數,獲 致最精確的模型。最精確模型的定義很多,但一個比 較簡單實用的定義為「估計係數變異Var b最小的模型」:

Min var b

由迴歸分析一章可知估計係數協方差的公式如下:

Cov b= σ^{2} (X'X) -1

其中 σ2=殘差之變異數

X=實驗數據所構成的矩陣(實驗矩陣)

例如假設模型爲

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon$$

則

$$\mathbf{b} = \begin{cases} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_{12} \\ b_{11} \\ b_{22} \end{cases} \qquad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}x_{12} & x_{11}^2 & x_{12}^2 \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}x_{22} & x_{21}^2 & x_{22}^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n1}x_{n2} & x_{n1}^2 & x_{n2}^2 \end{bmatrix}$$
(6-13)

其中 x_{ij} = 爲第 i 筆數據之第 j 個自變數之值。一個具有 p 個項(不含常數項)的多項式函數模型之實驗矩陣 X 具有 p+1 個 n 維向量,n 爲實驗回合。其中第一個向量爲 1 構成之常數向量,其餘 p 個向量爲各個因子構成之變數向量。

估計係數變異 Var b 即 Cov b 的對角元素,故由(6-12)式可知模型變異 Var b 要越小,則(X'X) $^{-1}$ 對角元素要越小;(X'X) $^{-1}$ 對角元素要越小,則 X'X 的行列值要越大。所謂 D-最佳化準則(D-Optimality)實驗設計即行列值最大化實驗設計:

 $Max | \mathbf{X}' \mathbf{X} |$ (6-14)

•除了D-最佳化準則外,也有學者提出A-最佳化準則, G-最佳化準則, Q-最佳化準則,簡述如下:

▶A-最佳化準則:以最小化最大Varb為目標,以最小化矩陣之反矩陣的跡(trace)為方法。

▶G-最佳化準則,以最小化實驗範圍內最大預測 變異 (Var [ŷ(x)] 為目標

▶Q-最佳化準則,以最小化實驗範圍內平均預測變異 (Var[ŷ(x)] 為目標

一般而言,仍以D-最佳化準則最簡潔易懂。

• 例題6.3 二階模型實驗設計3:最佳化準則設計

延續例題6.1半導體晶圓問題,但因經費限制, 只能作14次實驗,試以D最佳化準則作

- 1. 實驗設計
- 2. 模型建構

國立雲林科技大學工業工程與管理所

• (1) 實驗設計

電腦產生實驗設計之輸入參數包括:

模型:二階模型

實驗數:14

候選實驗設計點:27(每個實驗因子均有-1,0,1等

三個值,採三水準全因子實驗,共有33=27)

實驗範圍:範圍為±1之矩形

設計準則:D最佳化準則

•實驗設計如表第2-4行,實驗數據假設如表第5行(只以y₁為

例)

No.	x_I	x_2	<i>x</i> ₃	y _I
1	1	1	1	67.9
2	0	0	1	65.8
3	-1	0	0	220.5
4	-1	-1	0	-100.7
5	-1	-1	1	63.7
6	1 13	0	-1	97.2
7	0	1	0	-92.5
8	-1	1	-1	246.2
9	1	-1	1	54.1
10	-1	1	1	242.4
11	1	-1	0	-96.8
12	0	-1	-1	72.6
13	0	0	-1	89.4
14	1	1	-1	81.0支大學工業工程與管理

• (2)模型建構

反應變數y₁之二階多項式迴歸分析結果如下:

	- 一世のカイエートンロウチ パ してん ロフィー	_	
		-	
Cherses.	之二階多項式迴歸分析結果如门	100	•

				1-2.1	
	自由度	SS	MS	F	顯著值
迴歸	9	291238.2	32359.79	1925.894	6.58E-07
殘差	4	67.20993	16.80248		
總和	13	291305.4			

	係數	標準誤	t 統計	P-値
截距	86.85796	3.243702	26.77742	1.16E-05
x_1	-2.68785	1.348095	-1.99381	0.11694
x_2	-82.6136	1.3499	-61.1998	4.27E-07
x_3	88.49723	1.395183	63.43055	3.7E-07
x_1x_2	-84.2708	1.509888	-55.8126	6.17E-07
x_1x_3	74.80769	1.694476	44.14798	1.57E-06
x_2x_3	3.215601	1.692306	1.90013	0.130219
x_l^2	-1.79685	2.751056	-0.65315	0.5493
x_2^2	-18.1257	2.611336	-6.94116	0.002263
x_3^2	-0.5624	2.558826	-0.21979	0.836798

- 採用D-最佳化準則的電腦產生之實驗設計有下列缺點:
 - 1. 模型錯估時,所產生的模型會有較大的誤差,故較 不強健。
 - 2. 未考慮預測變異分佈之性質(例如可旋性),因此 預測變異分佈情形可能不是很理想。
 - 3. 常未選用中心點實驗,因此在中心點處可能有大的 預測變異。

國立雲林科技大學工業工程與管理所

5. 隨機產生設計

- 二階反應曲面實驗設計也可用隨機產生的方式得到,但這種設計效率甚低,因為在相同的實驗次數下,所獲致的模型最不精確。
- 例題6.4 二階模型實驗設計4:隨機產生之實驗設計 延續例題6.3半導體晶圓問題,但改採隨機產生之實驗設計。

(1)實驗設計

實驗設計如表第2-4行,實驗數據假設如表第5行(只以

y1為例)

No.	x_1	x_2	. x ₃	<i>y</i> ₁
1	1	-1	0	218.9
2	0	1	-1	-111.7
3	0	0	-1	2.5
4	-1	-1	-1	47.2
5	0	0	0	82.9
6	-1	1	1	74.1
7	0	1	0	-5.7
8	1	0	0	73.5
9	0	0	1	179.8
10	1	-1	1	398.6
11	-1	-1	0	75.6
12	1	0	1	251.4
13	0	-1	-1	48.1
14	0	-1	1	238.2

國立雲林科技大學 工業工程與管理所

(2) 模型建構

反應變數y1之二階多項式迴歸分析結果如下:

	自由度	SS	MS	F	顯著值
迴歸	9	222442.9	24715.88	304.73	2.62E-05
殘差	4	324.43	81.1075		
總和	13	222767.4			

				H (C.9)	
	係數	標準誤	t 統計	P-値	
截距	91.10518	7.328426	12.43175	0.000241	
X_I	-8.71472	7.894329	-1.10392	0.331568	
x_2	-80.7986	3.825583	-21.1206	2.97E-05	
x_3	93.33818	3.983833	23.42924	1.97E-05	
x_1x_2	-83.6732	8.511478	-9.83063	0.0006	
x_1x_3	84.78301	8.543919	9.923198	0.000579	
x_2x_3	-3.55892	5.128757	-0.69391	0.525927	
x_l^2	-5.39143	6.525584	-0.8262	0.455123	
x_2^2	-22.0773	7.229045	-3.05397	0.037881	
x_3^2	-5.10002	6.504004	-0.78414	0.476793	

6. 二階反應曲面實驗設計之比較

- 本章以半導體晶圓問題為例,以四種方法作
 - 二階實驗設計,包括:
 - ▶例題6.1 中央合成設計
 - ▶例題6.2 Box-Behnken設計
 - ▶例題6.3 最佳化準則設計
 - ▶例題6.4 隨機產生設計
 - 比較例題6.1~6.4如下

國立雲林科技大學工業工程與管理所

• 1.迴歸係數之比較

由下表得知,隨機產生設計所得之迴歸係數與其它三種方法有明顯差距,可能較不準確。表 迴歸係數之比較

1	中央合成	Box-Behnken	D-最佳化	隨機產生
	設計	設計	準則設計	設計
截距	88.6	86.9	86.9	91.1
x_I	-1.0	-2.6	-2.7	-8.7
x_2	-81.6	-80.5	-82.6	-80.8
x_3	93.6	91.2	88.5	93.3
x_1x_2	-80.1	-79.8	-84.3	-83.7
x_1x_3	75.0	76.3	74.8	84.8
x_2x_3	-0.1	-4.7	3.2	-3.6
x_l^2	-5.9	-6.5	-1.8	-5.4
x_2^2	-18.1	-17.1	-18.1	-22.1
x_3^2	-1.2	-1.8	-0.6	-5.1

· 2.迴歸係數顯著性(t統計量)之比較

由下表得知,隨機產生設計所得之迴歸係數t統計量遠低於其它 三種方法,較不顯著。

表迴歸係數t統計量之比較

	中央合成	Box-Behnken	D-最佳化	隨機產生
	設計	設計	準則設計	設計
截距	33.6	27.9	26.8	12.4
x_I	-0.7	-1.2	-2.0	-1.1
x_2	-57.1	-36.5	-61.2	-21.1
x_3	65.5	41.4	63.4	23.4
x_1x_2	-42.9	-25.6	-55.8	-9.8
x_1x_3	40.2	24.5	44.1	9.9
x_2x_3	-0.1	-1.5	1.9	-0.7
x_1^2	-3.9	-2.1	-0.7	-0.8
x_{2}^{2}	-12.2	-5.5	-6.9	-3.1
x_3^2	-0.8	-0.6	-0.2	-0.8

國立雲林科技大學工業工程與管理所

· 3.迴歸模型顯著性(F統計量)之比較

由下表得知,隨機產生設計所得之迴歸模型顯著性明顯低於實驗數目同為14之D-最佳化準則設計。至於中央合成設計、Box-Behnken設計、D-最佳化準則設計三者實驗數目不同,由於實驗數目大者,迴歸模型的F統計量愈高,故不能直接比較F統計量。但從顯著值P來看,中央合成設計最顯著,其次依序為Box-Behnken設計、D-最佳化準則設計、隨機產生設計。

表 迴歸模型顯著性 (F統計量) 之比較

	中央合成 設計	Box-Behnken 設計		隨機產生 設計
實驗數	18	16	14	14
F統計量	1241	483	1926	305
顯著值P	1.32E-11	7.01E-08	6.58E-07	2.62E-05

THE END