

1.

(a)

Design A 特性

1. 總共 8 個自由度, 其中不同的因子設定有 4 個, 可估計 3 個效應與截距項。剩餘的 4 個自由度可估計 error variance。
2. 每個因子都只有兩水準, 故無法作 curvature check。

Design B 特性

1. 總共 8 個自由度, 其中不同的因子設定有 5 個, 可估計 4 個效應與截距項, 這 4 個效應包含一個 joint quadratic effect。剩餘的 3 個自由度可估計 error variance。
2. 每個因子都有三水準, 可利用 joint quadratic effect 作 curvature check。
3. Error variance 的估計都來自於中心點, model 要服從 constant variance 的假設估計才會準確。

(b)

由於一天可執行 4 個設定, 若懷疑有 day-to-day effect 則需在模型中加入一兩水準的 block factor, 其 block size 為 4。對 design A 而言, 一個 block 可容納 1 個 2^2 , 故在適當安排下 block effect 必可與所有效應直交, 即加入 block effect 不會影響到其餘效應的估計值。對 design B 而言, 能夠用來估計 linear MEs 與 2fi's 的自由度完全來自這 8 個設定中的 2^2 部份。若第一天執行 2^2 的部份, 第二天作 4 個中心點, 則 block effect 與 I,A,B,AB 都直交。不過如此 block effect 會與 joint quadratic effect 產生混淆。

4.

(a)

考慮 2nd order model 加入 block effect : $y \sim \text{block} + A + B + C + AB + BC + AC + A^2 + B^2 + C^2$

計算這 11 個效應(10+截距)的 correlation matrix 如下：

	I	A	B	C	AB	AC	BC	A ²	B ²	C ²	block
I	1.0000	0	0	0	0	0	0	0.6237	0.6237	0.6256	-0.2000
A	0.0000	1	0	0	0	0	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
B	0.0000	0	1	0	0	0	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	0.0000	0	0	1	0	0	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
AB	0.0000	0	0	0	1	0	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
AC	0.0000	0	0	0	0	1	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
BC	0.0000	0	0	0	0	0	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
A ²	0.6237	0	0	0	0	0	0	1.0000	0.3343	0.3369	-0.1077
B ²	0.6237	0	0	0	0	0	0	0.3343	1.0000	0.3369	-0.1077
C ²	0.6256	0	0	0	0	0	0	0.3369	0.3369	1.0000	-0.1116
block	-0.2000	0	0	0	0	0	0	-0.1077	-0.1077	-0.1116	1.0000

故此設計並未達到 orthogonal blocking, 該 block effect 與截距以及 A,B,C 的二次效應有 partial confounding。

(b)

將第 7 個設定移除後配適(a)的模型得：

```

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  2.198789    0.620263   3.545 0.007565 **
block         0.049523    0.363261   0.136 0.894929
A             1.126643    0.454455   2.479 0.038165 *
B             0.785710    0.454455   1.729 0.122085
C             0.001632    0.455800   0.004 0.997232
A2          2.708204    0.403642   6.709 0.000151 ***
B2         -0.052744    0.403642  -0.131 0.899262
C2         -0.135186    0.407586  -0.332 0.748657
A:B           1.480952    0.633967   2.336 0.047712 *
A:C          -0.177548    0.633967  -0.280 0.786538
B:C           0.188548    0.633967   0.297 0.773730
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.502 on 8 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8941,    Adjusted R-squared:  0.7617
F-statistic: 6.753 on 10 and 8 DF,  p-value: 0.006195

```

其中顯著的效應為 A, A², AB, 故重要的因子為 A 與 B, 其中以 A 影響較大, 其透過線性與二次主效應以及與 B 的交互作用來影響反應值。B 只透過與 A 的交互作用在影響反應值。block effect 不顯著, 表示無 day-to-day effect。此分析即論與原始分析一致。

6.

(a)

對此 2^2 design 配適模型 $y \sim x_1 + x_2 + x_1x_2$ 如下：

Call:

`lm(formula = y ~ x1 + x2 + x1:x2)`

Residuals:

ALL 4 residuals are 0: no residual degrees of freedom!

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	31.5	NA	NA	NA
x1	6.5	NA	NA	NA
x2	5.0	NA	NA	NA
x1:x2	1.0	NA	NA	NA

Residual standard error: NaN on 0 degrees of freedom

Multiple R-squared: 1, Adjusted R-squared:

F-statistic: NaN on 3 and 0 DF, p-value: NA

ME of 1 爲 6.5, ME of 2 爲 5.0, 2fi's 爲 1.0, the steepest ascent direction 爲 (6.5,5.0)=(1,0.769), 即 x_1 增加 1 單位時 x_2 要增加 0.769 單位。Table 10.14 爲

Run	x_1	x_2	Bleach	Temp	y
1	1.0	0.769	6	83.846	43
2	1.5	$1.5 \times 0.769 = \mathbf{1.153}$	7	85.769	47
3	2.0	$2.0 \times 0.769 = \mathbf{1.538}$	8	87.692	49
4	2.5	$2.5 \times 0.769 = \mathbf{1.923}$	9	89.615	54
5	3.0	$3.0 \times 0.769 = \mathbf{2.307}$	10	91.538	59
6	3.5	$3.5 \times 0.769 = \mathbf{2.692}$	11	93.461	66
7	4.0	$4.0 \times 0.769 = \mathbf{3.076}$	12	95.384	70
8	4.5	$4.5 \times 0.769 = \mathbf{3.461}$	13	97.307	73
9	5.0	$5.0 \times 0.769 = \mathbf{3.846}$	14	99.230	69
10	5.5	$5.5 \times 0.769 = \mathbf{4.230}$	15	101.153	61

觀察 Run 1 到 Run 10 可發現 Run 8 的 $y=73$ 爲這 10 個設定中最大的, 且 Run 9 開始 y 就遞減, 故取 Run 8 爲下一次實驗的中心點。

(b)

配適模型 $y \sim x_1 + x_2 + x_1 x_2 + x_1^2 + x_2^2$ 如下：

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	90.0009	2.3897	37.662	4.12e-05 ***
x1	-1.2804	0.8449	-1.515	0.227
x2	-1.2374	0.8449	-1.465	0.239
I(x1^2)	-3.1262	1.4013	-2.231	0.112
I(x2^2)	-0.1253	1.4013	-0.089	0.934
x1:x2	-0.5000	1.1948	-0.418	0.704

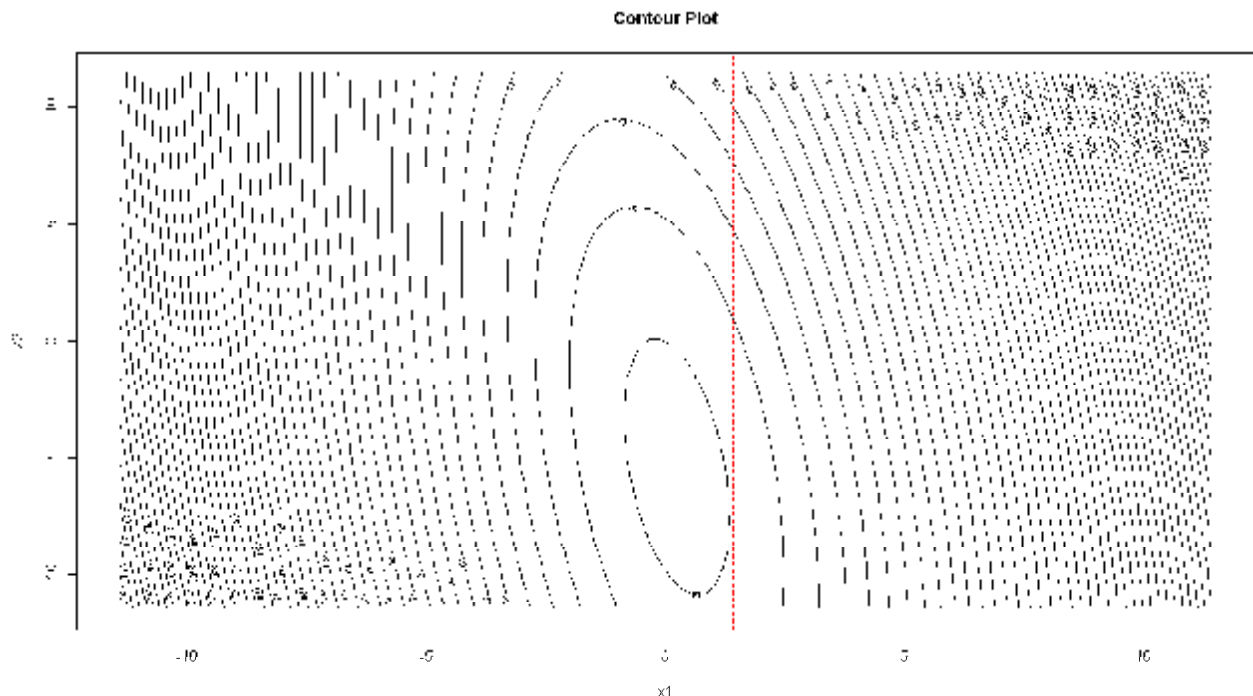
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.39 on 3 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.8073, Adjusted R-squared: 0.4861

F-statistic: 2.513 on 5 and 3 DF, p-value: 0.2392

對配適出的曲面畫等高線圖如下：



其中紅色虛線圍住的區域為實驗區間，最大值落在 $(x_1, x_2) = (0, -1.414)$ ，故推薦此設定。

12.

(a)

此為一 Box-Behnken design, 其中任兩個因子都搭配一次 2^2 design, 其餘因子此時設為中心點。共 $C(4,2)*4=24$ 個點, 再加上 3 個中心點形成 27 點的 design。由於一個 4 因子的 2nd model 只需要 15 個自由度即可, 故此處多出 $27-15=12$ 個自由度。若採用 CCD 可將 run size 降低到 17, 較為經濟。

(b)

對 Cr 配適 2nd order model 如下：

```

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.2133333   0.0418359    5.099 0.000262 ***
A            -0.0045833   0.0209179   -0.219 0.830247
B            -0.0074167   0.0209179   -0.355 0.729072
C            -0.0001667   0.0209179   -0.008 0.993774
D            -0.0026667   0.0209179   -0.127 0.900670
I(A^2)       -0.0514167   0.0313769   -1.639 0.127215
I(B^2)       -0.0591667   0.0313769   -1.886 0.083773 .
I(C^2)       -0.0590417   0.0313769   -1.882 0.084351 .
I(D^2)        0.0477083   0.0313769    1.520 0.154290
A:B          -0.0077500   0.0362309   -0.214 0.834212
A:C          -0.0070000   0.0362309   -0.193 0.850030
A:D           0.0025000   0.0362309    0.069 0.946125
B:C           0.0100000   0.0362309    0.276 0.787238
B:D           0.0670000   0.0362309    1.849 0.089195 .
C:D           0.0175000   0.0362309    0.483 0.637779
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.07246 on 12 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6049,    Adjusted R-squared:  0.144
F-statistic: 1.312 on 14 and 12 DF,  p-value: 0.3219

```

此 fitted model $R^2=0.60$ 且效應都不顯著, 有可能是有重要因子未選入或是實驗區間不夠大。接著執行 canonical analysis, 可得 stationary point 與 eigenvalues 如下：

```

> eigen(B)$values# eigenvalues
[1]  0.08285375 -0.04672827 -0.06504680 -0.09299535
> -0.5*solve(B)%*%b# stationary point
      [,1]
[1,] -0.04298792
[2,] -0.01011839
[3,]  0.01365054
[4,]  0.03940299

```

由於 eigenvalues 有正有負, 故此 stationary point 為一 saddle point。

對 A1 配適 2nd order model 如下：

```

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.003700   0.031733   0.117   0.9091
A            -0.001967   0.015866  -0.124   0.9034
B            -0.007375   0.015866  -0.465   0.6504
C            -0.026542   0.015866  -1.673   0.1202
D             0.024167   0.015866   1.523   0.1536
I(A^2)       -0.005467   0.023800  -0.230   0.8222
I(B^2)       -0.005804   0.023800  -0.244   0.8114
I(C^2)        0.035121   0.023800   1.476   0.1658
I(D^2)        0.017533   0.023800   0.737   0.4755
A:B          -0.010825   0.027482  -0.394   0.7006
A:C           0.001150   0.027482   0.042   0.9673
A:D           0.000025   0.027482   0.001   0.9993
B:C           0.003775   0.027482   0.137   0.8930
B:D          -0.001725   0.027482  -0.063   0.9510
C:D          -0.073800   0.027482  -2.685   0.0198 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.05496 on 12 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.575,    Adjusted R-squared:  0.07912
F-statistic:  1.16 on 14 and 12 DF,  p-value: 0.4028

```

此 fitted model $R^2=0.58$ 且效應幾乎都不顯著，有可能是有重要因子未選入或是實驗區間不夠大。接著執行 canonical analysis, 可得 stationary point 與 eigenvalues 如下：

```

> eigen(B)$values# eigenvalues
[1]  0.100798722  0.005142879 -0.016498023 -0.048060244
> -0.5*solve(B)%*%b# stationary point
      [,1]
[1,] -0.3210613
[2,]  0.0852527
[3,]  0.1338932
[4,] -0.1167451

```

由於 eigenvalues 有正有負，故此 stationary point 爲一 saddle point。

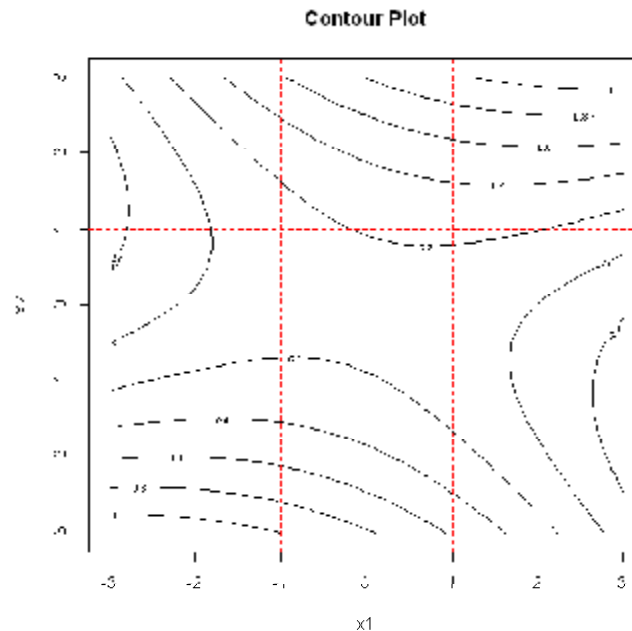
(c)

Contour plot

Response: Cr

從(A,B,C,D)中任選兩因子 x_1, x_2 , 並挑選以下 model 中 R^2 最大的來作圖：

$$y \sim x_1 + x_2 + x_1^2 + x_2^2 + x_1 x_2$$

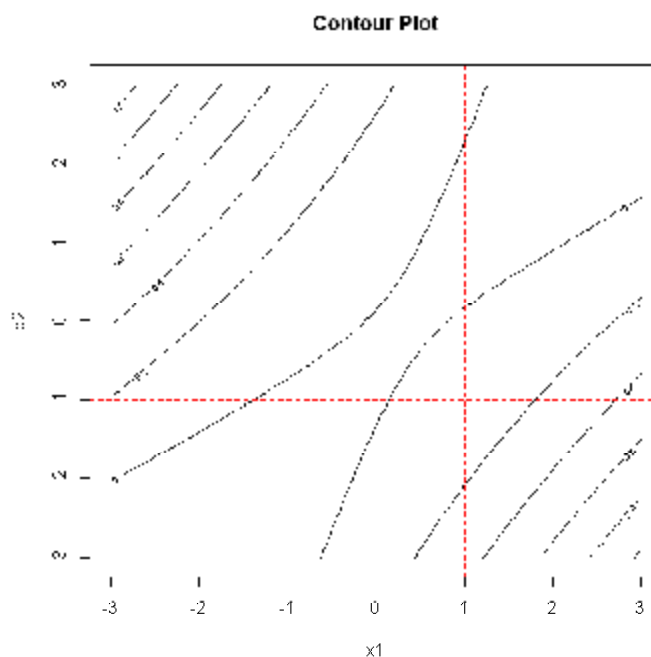
當 $x_1=B, x_2=D$ 時, $R^2=0.43$ 為 6 種組合中最大的。Contour plot 如下：

當(B,D)=(1,0)時可得最小的 Cr 為 0.1007257, 故推薦此設定。

Response: AI

從(A,B,C,D)中任選兩因子 x_1, x_2 , 並挑選以下 model 中 R^2 最大的來作圖：

$$y \sim x_1 + x_2 + x_1^2 + x_2^2 + x_1 x_2$$

當 $x_1=C, x_2=D$ 時, $R^2=0.55$ 為 6 種組合中最大的。Contour plot 如下：

當(C,D)=(1,1)時可得最小的 AI, 故推薦此設定。

Desirability function

使用如下的 desirability function :

$$d_i = \exp\{-|y_i|^2\},$$

$$d = (d_1 d_2)^{0.5}$$

當(A,B,C,D)=(-1,1,0,-1)、(0,1,0,-1)、(1,1,0,-1)時, desirability=0.9949328, 故推薦這三個設定。