中國統計學報
第32卷第3期
八十三年九月
305–320頁

半哈達瑪矩陣及其在工業上之應用

林共進

美國田納西大學統計系

摘　要

半哈達瑪矩陣(half fraction Hadamard matrix)可用來作為超飽和設計(supersaturated design)。所謂超飽和設計指的是實驗中因子(factor)的個數多於實驗的次數。此種實驗設計在因子個數多,且其目的又僅在於區別出少數幾個關鍵性的因子時特別有用。本文提出的方法,係利用N階的哈達瑪矩陣,而取得做$N/2$次實驗來檢驗$N-2$個因子的超飽和設計;並以一個具體實例討論超飽和設計在工業上的價值,以及幾種其資料分析的方法。

關鍵詞: 超飽和設計,濾選實驗,隨機平衡設計。

美國數學會分類索引: 主要62K15。

1. 引言

品質管理在工業上一直扮演著重要的角色,這在過去十年中尤其顯著。在品管的過程中,工程人員憑著專業知識,摸索出一套適用於現有設備的生產方式,但由於缺乏科學化的統計方法,往往事倍功半,付出極大的實驗代價,卻得不到良好的生產結果。研究一個產品的生產過程,首先面對的問題便是因子的選擇,唯有過濾出真正對品質具重要影響的因子,才能對症下藥,從而優化生產過程及產品。基本的專業知識與現場工作經驗的結合判斷,常常導致一群數目龐大的可能性因子(potential factors),但其中往往只有少數幾個重要的因子是真正具有效用。故在推導工程模型或統計模型之前,有個重要的先行工作,那就是要在此繁瑣複雜的生產流程中,如何挑選出幾個具有效用的真因子(active factors)—即所謂的濾選過程(screening)。傳統的濾選過程上,由於缺乏有效率的實驗設計知識,多由專家系統所主導,因而忽略了數據法則(empirical evidence)。

比較科學化的統計實驗設計,係透過事前的巧妙安排,而能在少量的實驗中獲取大量的訊息,進而能有效地判斷出最具關鍵性的因子,以爲下一階段的品質工程奠立良好的基礎。過去最常用的濾選設計,首推主效應設計(main-effect design)。所謂主效應設計,顧名思義,係暫時忽略了交互作用的存在,並且使用一次線性模型;由於祇有主效應需要估計,故實驗的次數相對地降低。譬如,在二水準的情況下,只需要 $N = k + 1$ 次實驗,就可以估計所有 k 個因子的主效應。這種一次線性模型的主效應設計,在統計文獻上討論的相當多。

工業上的濾選問題比較特殊,其可能性因子的數目往往相當大,即使採用最經濟的主效應設計,其實驗的數目亦十分龐大。值得注意的是,濾選實驗的目的僅在於判別因子的重要與否,當真因子的數目很少時,逐一估計每個主效應並不切實際,此猶如在100個外觀相同的硬幣中,想找出一、二個重量不同者,而逐一的量測每個硬幣的重量是沒有必要的。

一種高效率的設計,命名爲超飽和設計,可以用來解決工業上龐大因子群的問題。所謂超飽和設計基本上是一個部分實施的因子設計(fractional factorial design),做 n 次實驗(也就是 n 個觀測值)來研究 k 個因子。在此比較特殊的是 $n < k + 1$。這種設計在真因子個數少時,可以有效地判別出這些真因子,同時

可以省下大筆的實驗成本。與統計文獻上的其它方法相比較,本文所提出的設計,不但構造方法簡單而且有效率。

本文之結構如下:第2節簡介哈達瑪矩陣、半哈達瑪矩陣的形成及其與超飽和設計的關係;第3節以一個實例來說明其價值及超飽和設計的資料分析方法;第4節則討論一些半哈達瑪矩陣的數學性質,並與其它相關設計作了一個比較。

2. 半哈達瑪矩陣

一 N 階的哈達瑪矩陣是一個 $N \times N$ 的方陣,設爲 H,滿足 $H' \cdot H = N \cdot I$,式中 I 爲單位矩陣,而方陣 H 的元素皆爲 $+1$ 或 -1,其存在的必要條件爲 N 必須爲4的倍數。因爲哈達瑪矩陣中任意兩行(column)均正交(orthogonal),故在實驗設計法中,自然地被應用於一次正交實驗,其中每一行代表著一個實驗因子,每一列(row)則代表著各個因子所組合成的實驗。當因子間的交互作用(interactions)較薄弱時,此設計可以準確地估計所有的主效應。有時亦稱這種設計爲“正交飽和設計”(orthogonal saturated design),因爲一個 N 階的哈達瑪矩陣可以用來檢驗 $N-1$ 個因子。這種設計的應用非常廣泛,文獻上的記載也很多(參閱 Hedayat and Wallis (1978))。

表1列出12階的哈達瑪設計,依據各行列的組合,每列代表每次實驗的安排(共有12次實驗),每行則代表一個特定的實驗因子(除行1外,計有11行,亦即檢驗11個因子)。如前所述,此設計通過12次實驗,可以估計11個因子的主效應,同時由於正交的關係,除了第一行全爲 $+1$ 外,每一行(即每一因子)均含有 $N/2 = 6$ 個高水準(以“+”代表)與 $N/2 = 6$ 個低水準(以“−”代表)。

假如選擇第11號因子爲分類行,則根據此行所對應的高水準(+)或低水準(−),我們可以把一個哈達瑪矩陣分割成兩個“半哈達瑪矩陣”,如表2所示,將表1中第2、3、5、6、7、11列(對應於“+”號)收集一起,再去除掉分類行,我們即可得到一個 6×11 的矩陣,而此矩陣可用來檢驗10個因子,但卻僅做了6次實驗。

一般而言,對任意一個哈達瑪矩陣,我們可選擇任一行爲分類行,依照此行所對應的高、低水準,將此矩陣切割成兩個半哈達瑪矩陣,這兩個半哈達瑪矩

陣是同構(isomorphism)。取其中任一個半哈達瑪矩陣,去除掉分類行,我們便得到了一個超飽和設計,可用來檢驗$n = N - 2$個因子,但只需作$k = N/2$次實驗。

選擇不同的分類行,是否會導致不同性質的超飽和設計呢?針對這個問題,我們檢驗了所有的可能性,結果證實本方法所取得的超飽和設計基本上是唯一的,這與分類行的選取無關(除了$N = 52$的情況外,將於下討論)。值得注意的是,多數的哈達瑪矩陣是利用循環結構(cyclic structure)而成的,在這種情況下,行與行之間存有交叉平衡性質,分類行的選取是不會造成任何差異的。

在$N \leq 60$的哈達瑪矩陣中,唯一的例外是$N = 52$的情況。我們來看52次試驗被構建的情形(見Plackett and Burman (1946) p.323),係經由交換5個10×10的符號區塊,再加上於每一區塊中第一行爲$(+,-,+,-,\cdots,+,-)$者。使用第一行爲分類行之結果,會產生25個高相關的配對(每一區塊爲5個,相關數爲22/26)。若使用其它任何行,則祇有第一行會產生相關數22/26。所以本文建議去掉第一行後,使用任意之其它行爲分類行,則於26次的試驗中,可得到一個具有49行的超飽和實驗,其最高相關數僅有5/13。

3. 實例

Williams (1968)研究一個複雜的管絨生產過程,希望能在千頭萬緒中,找出對管絨黏度真正發揮影響的因子。專業人員經過一番討論後列舉出24個相關的因子, Williams做了百餘次的實驗,包括了隨機平衡設計(random balance designs)實驗、28次的Plackett and Burman設計及部分實施因子設計的實驗,其中28次的Plackett and Burman設計及其實驗結果刊登在Box and Draper (1987)中,其結論推斷因子15、10、20和4是最重要的。

本節利用此一實際案例來說明半哈達瑪矩陣的價值及使用。事實上,利用本文之設計僅需14次實驗即可達到相同的實驗目的,且經過這14次實驗的結果,所得到分析的推論和Williams的推斷基本上是一致的。

根據Williams所做的28次實驗(參閱Box and Draper (1987) p.175),我們利用一個未被使用的正交行$(+-++\ -+-+\ ++--\ +---\ +---\ -+++\ +--+)'$做爲分類行,可以獲得表3的半哈達瑪矩陣及其實驗結果,表中仍保

有24號因子,但只有14個實驗值。下面我們介紹幾種分析此超飽和實驗的方法。

如何分析這種因子個數多於實驗次數的數據呢?我們介紹幾種簡易而直接的方法,並且混合使用這方法來達到最佳的預測結果。

(1) 圖示法

圖1顯示最直接明瞭的圖示法。由於每個因子都只有兩個水準,我們將實驗觀察值直接對水準圖示出來(對每個因子而言,計有7個對應於高水準與7個對應於低水準)。如果主效應很大,則可預期某一水準的7個點會較另一水準的7個點來得大,如圖中所示的第15號因子,即有顯著的主效應。一般而言,此圖若能配合Tukey (1959)所提出的"統計數法" (total count)來檢定,則愈能顯示其效用。

(2) 統計數法

所謂的統計數法是指兩個計數的總和;第一個計數是其中一群的觀察值大於另一群所有觀察值的個數;另一個計數則是其中一群的觀察值小於另一群所有觀察值的個數。當某因子的統計數大於7時(相當於α=5%水準),我們就認定其主效應存在。在圖1中亦列出這些統計數,並由其中可看出,第15號因子(統計數=14)的主效應是絕對地存在;此外,第8號及第17號因子(統計數=6)的主效應也應該存在,這些方法加強了一個直覺而簡單的推斷。而且觀察值愈多,其效果亦愈可靠。

(3) 逐步迴歸分析法

較正式的分析方法,係指用逐步迴歸分析法(stepwise regression, 可參考Draper and Smith (1981) p.307)所得到的結果。現將其列於表4,表中列出每一階段引進的因子、其估計效應以及t-比值(t-ratio)。從表4可以看出第15、12、20、4、10等號因子是最重要的(R^2 = 0.973),這與Williams (1968)做了近百次實驗後的推論是一致的,但在此卻僅做了14次的實驗。

如上所言,圖示法與統計數法僅提供一個簡單便捷的直觀推論,在n值較小時,其推論遠不如逐步迴歸分析法可靠。事實上,對超飽和實驗的測試方法,文獻上的探討並不多。有關準確的資料分析方法是值得進一步探討研究的課

題。

4. 基本性質與比較

表5中列示了Satterthwaite (1959)的隨機平衡設計及Booth and Cox (1962)的設計與超飽和設計(見Lin (1993))間之比較,此二類設計為現有文獻中所僅有可與超飽和設計比較者。為公平起見,我們採用Booth and Cox所提出的準則,以均數$E(s^2)$作為比較之基準,其中$E(s^2) = \sum s_{ij}^2/\binom{k}{2}$ (式中$s_{ij} = \sum_u x_{iu}x_{ju}$為$k$行設計中之任二行($x_i$與$x_j$)的內積(inner product))。直觀上,可以看出$E(s^2)$是用來測量非正交性,其值是愈小愈好。

表5的上半部分,是本設計與Booth and Cox (1962)的7個設計間的比較(參見Lin (1993)),其中本設計可於$N/2$的實驗中,最多檢驗出$N-2$個因子,所以本設計並不能與Booth and Cox的兩個設計(設計III與IV)相比較。隨機平衡設計的$E(s^2)$值為$n^2/(n-1)$(詳見Booth and Cox (1962) p.494)。而在所有情形下,利用半哈達瑪矩陣所得的設計,其導得的$E(s^2)$值接近$(2n+3)/4$,由此$E(s^2)$值來判斷,本設計較其它方式為佳。當$k < N-2$個因子時,可以在$N-2$行中任意的使用k行,因為其$E(s^2)$值均相近且不錯。表5的下半部分,係比較其它所有$n = N/2 \le 30$的設計,其最後一行表示在設計中任兩行的最大內積,一般而言,此值愈小愈好。

部分哈達瑪矩陣($N = 2n = 16$、32、40、56)並未列示於表5中,這些設計係由摺疊方式(foldover)所構建。一般而言,吾人可利用現成的$N/2$階哈達瑪矩陣,經由摺疊法來取得N階的哈達瑪矩陣。換言之,當N是8的倍數時,一個N階的哈達瑪矩陣可以寫成

$$\begin{bmatrix} H_{N/2} & H_{N/2} \\ H_{N/2} & -H_{N/2} \end{bmatrix},$$

此摺疊設計之半分割形成二等價行之集合,故不能將其分界折半造出超飽和設計。

表6詳述$N \le 60$的半哈達瑪矩陣的基本性質,其中如前s_{ij}是任兩行x_i和x_j的內積。值得一提的是s_{ij}的次數分佈並不對稱,所以$\mathrm{Var}(s)$並不等於$E(s^2)$,Booth and Cox (1962)文中的推論並不正確。當此矩陣用來作為超飽和設計

時,僅需做$n = N/2$次實驗,但卻可以檢驗$k = N - 2$個因子 。

已知次數$N \leq 12$的哈達瑪矩陣均爲唯一,但當次數大於12時則不一定 。例如, Hall (1961, 1965)證明$N = 16$時有5個 、$N = 20$時有3個非等價的哈達瑪矩陣 。Plackett and Burman (1946)設計可視爲哈達瑪矩陣中之特例 。我們也研究了其它非等價之哈達瑪矩陣 。

Hall (1965)所給之所有非等價的哈達瑪矩陣均已查驗過,但均未產生任何不同構的超飽和設計 。換言之,本文所給的設計是唯一的 。對$N = 28$的情形,由 Hedayat and Wallis (1978) p.1223 所給H_{28}的結果,與 28 次之 Plackett and Burman 設計是一致的 。本文同時也檢驗列示於 Wallis et al.(1972) 附錄 K 的 Williamson (四個方形)形態之偏哈達瑪矩陣 。(某些偏哈達瑪矩陣亦列示於 Hedayat and Wallis (1978); 其表 4 中對於$n = 7$的第二進入點,應爲 $+++--++$) 。至於$N = 28$與$N = 52$的矩陣分別有3個與6個,並無發現任何新的結果,這些矩陣在理論方面應進一步探討,特別是N爲8的倍數時 。

5. 結語

本文利用哈達瑪矩陣特殊的性質,導出一系列的超飽和設計 。在實際應用上,超飽和設計可以節省大筆的實驗代價,但使用者必須體認到超飽和設計僅適用於真因子的個數爲少量時,否則其分析結果的可靠性會受到影響 。當然,這可以從一 、二次考證性實驗(confirmation experiment)中來證實 。當實驗相信真因子爲少量而可能性因子個數龐大時,超飽和設計是值得推展的 。本文利用半哈達瑪矩陣所得的設計,證實比目前統計文獻記載之所有超飽和設計都來得優秀 。

本文主要精神在於介紹半哈達瑪矩陣的一些基本性質,並將其應用在超飽和設計上 。針對超飽和設計,近年來探討的十分熱烈 。不同性質的超飽和設計,可藉由不同方式來架構,半哈達瑪矩陣只是其中之一種方法而已 。關於有系統的介紹和比較一系列的超飽和設計,請參閱 Lin (1994) 。

另外,從本文可以延伸出一些有趣的研究課題,諸如:

(1)使用分類行的方法來等分割多水準的正交表頭,其結果如何?

(2)對半哈達瑪矩陣的再切割,如1/4(或1/8)哈達瑪矩陣,其性質如何?

這些問題牽涉到組合學的一些有趣性質,值得更深入探討。

誌謝詞:作者感謝評審委員精闢的建議,使本文更充實順暢。本研究由美國國家科學基金會 (National Science Foundation) 支持。另外,撰文和準備工作由行政院主計處羅國華先生協助,在此一併致謝。

表1. 12階的哈達瑪矩陣

Run	I	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	+	+	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−
2	+	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	+
3	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	+	+
4	+	+	+	+	−	−	−	+	−	+	+	−
5	+	+	+	−	−	−	+	−	+	+	−	+
6	+	+	−	−	−	+	−	+	+	−	+	+
7	+	−	−	−	+	−	+	+	−	+	+	+
8	+	−	−	+	−	+	+	−	+	+	+	−
9	+	−	+	−	+	+	−	+	+	+	−	−
10	+	+	−	+	+	−	+	+	+	−	−	−
11	+	−	+	+	−	+	+	+	−	−	−	+
12	+	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−

表2. 從12階的哈達瑪矩陣(表1)所推導出的超飽和設計

Run	I	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	觀測值
1	+	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	y_1
2	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	+	y_2
3	+	+	+	−	−	−	+	−	+	+	−	y_3
4	+	+	−	−	−	+	−	+	+	−	+	y_4
5	+	−	−	−	+	−	+	+	−	+	+	y_5
6	+	−	+	+	−	+	+	+	−	−	−	y_6

表3. William(1968)資料的半分割

Run	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	+	+	+	−	−	−	+	+	+	+	+	−	+	−	−
2	+	−	−	−	−	−	+	+	+	−	−	−	+	+	+
3	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	+	+	+
4	+	+	−	+	−	+	−	−	−	+	+	−	+	−	+
5	−	−	+	+	+	+	−	+	+	−	−	−	+	−	+
6	−	−	+	+	+	+	+	−	+	+	+	−	−	+	+
7	−	−	−	−	+	−	−	+	−	+	−	+	+	+	−
8	−	+	+	−	−	+	−	+	−	+	−	−	−	−	−
9	−	−	−	−	−	+	+	−	−	−	+	+	−	−	+
10	+	+	+	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	+	+
11	−	+	−	+	+	−	−	+	+	−	+	−	−	+	−
12	+	−	−	−	+	+	+	−	+	+	+	+	+	−	−
13	+	+	+	+	+	−	+	−	+	−	−	+	−	−	−
14	−	−	+	−	−	−	−	−	−	−	+	+	−	+	−

Run	16	17	18	19	20	21	22	23	24	Response
1	+	+	−	−	+	−	−	−	+	133
2	+	−	+	−	−	+	+	−	−	62
3	+	+	−	−	−	−	+	+	−	45
4	+	−	+	+	+	−	−	−	−	52
5	+	+	−	−	+	−	+	+	+	56
6	−	+	+	+	+	+	+	−	−	47
7	+	+	+	+	−	+	−	−	+	88
8	−	−	−	+	−	+	+	+	−	193
9	−	+	+	−	−	−	−	+	+	32
10	−	+	−	+	−	+	−	−	+	53
11	−	−	+	+	−	−	−	+	+	276
12	+	−	−	+	+	+	+	+	+	145
13	−	−	+	−	+	+	−	+	−	130
14	−	−	−	−	+	−	+	−	−	127

表4. 對表3中資料的逐步(前向)選擇

	Entering variables						
步驟	15	12	20	4	10		R^2
1	−53.2 (−4.54)					43.9	0.63
2	−56.4 (−5.42)	−22.3 (−2.14)				38.5	0.74
3	−60.5 (−7.75)	−26.4 (−3.38)	−24.8 (−3.17)			28.5	0.87
4	−70.5 (−12.96)	−25.3 (−5.19)	−29.2 (−5.86)	22.1 (4.09)		17.8	0.95
5	−71.3 (−15.96)	−26.8 (−6.63)	−28.0 (−6.80)	20.7 (4.64)	−9.4 (−2.33)	14.5	0.97

註: 1. 表中之數字均爲估計效應與其 t- 比值。

2. 每一步驟之常數項爲 102.8。

表5. 各種設計之$E(s^2)$值的比較

n	k	Random Balance (1959)	Booth and Cox (1962)	HFHM# (1993)	HFHM# Largest $\lvert s_{ij}\rvert/n$
12	22	13.09	–	6.85	0.333
	16	13.09	7.06	6.27	
	18	13.09	9.68	6.59	
	24	13.09	10.26	–	
18	34	19.06	–	9.82	0.333
	24	19.06	13.04	9.22	
	30	19.06	15.34	9.74	
	36	19.06	16.44	–	
24	46	25.04	–	12.80	0.333
	30	25.04	12.06	11.59	
6	10	7.20	–	4.00	0.333
10	18	11.11	–	5.88	0.600
14	26	15.07	–	7.84	0.429
22	42	23.05	–	11.80	0.273
26	49	27.04	–	13.80	0.385
30	58	31.03	–	15.79	0.200

註: HFHM爲Half Fraction Hadamard Matrices之簡稱 。

表6. 半哈達瑪矩陣的一些基本性質

A. N 非8的倍數($N \le 60$)

N	實驗次數 $n = N/2$	因子個數 $k = N - 2$	s_{ij} 的次數 -6	-2	2	6	成對行之個數	最大的相關值 $\lvert s_{ij}\rvert/n$
12	6	10		30	15		45	0.333
20	10	18	9	81	63	0	153	0.600
28	14	26	39	130	156	0	325	0.429
36	18	34	78	225	234	24	561	0.333
44	22	42	147	315	336	63	861	0.273
60	30	58	348	609	435	261	1653	0.200

B. $N = 24$ 與 $N = 48$

N	實驗次數 $n = N/2$	因子個數 $k = N - 2$	s_{ij} 的次數 -8	-4	0	4	8	成對行之個數	最大的相關值 $\lvert s_{ij}\rvert/n$
24	12	22		66	132	33		45	0.333
48	24	46	69	276	414	276	0	153	0.600

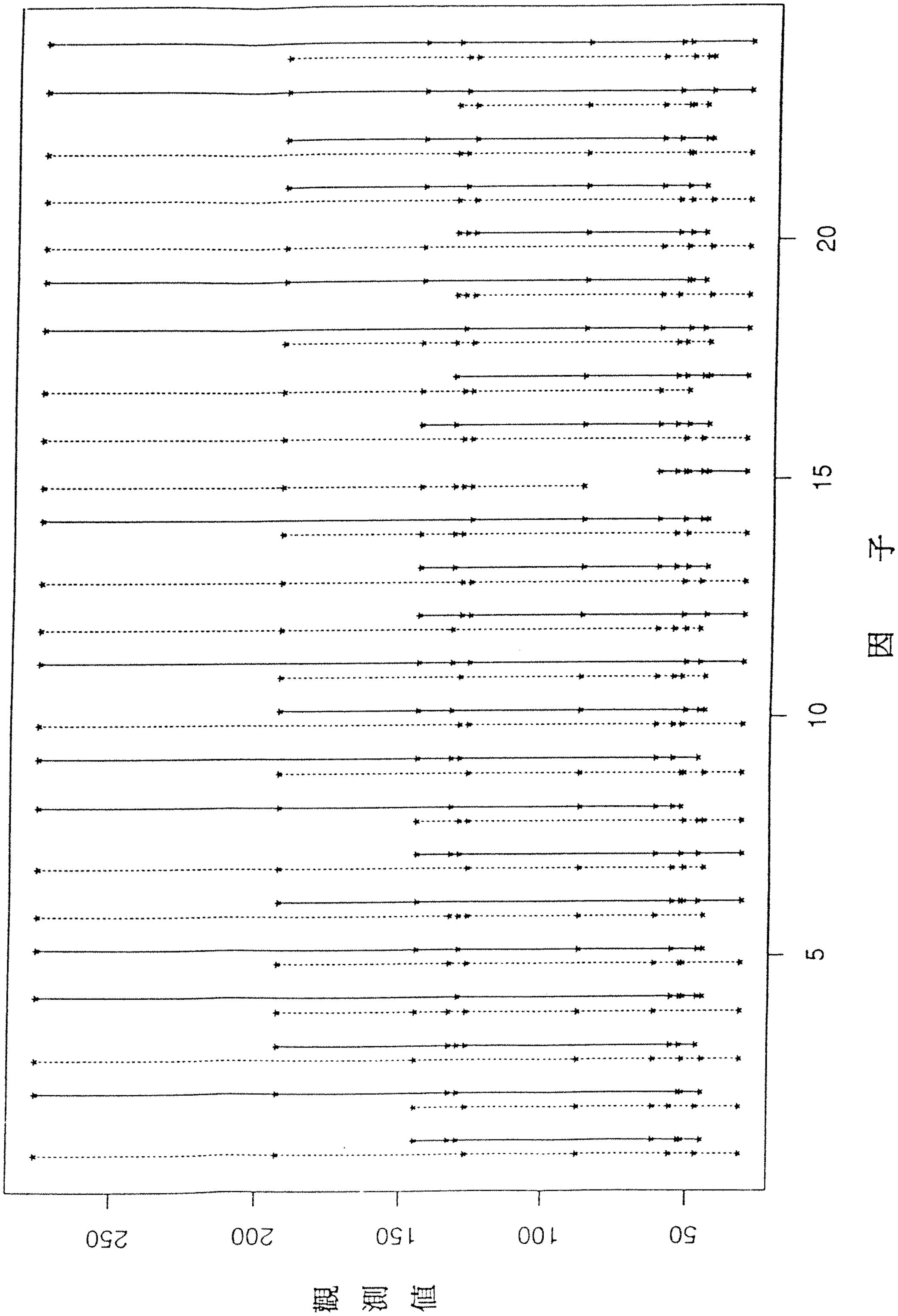

圖 1. 各因子於每一水準的之散佈圖
Tukey (1959) 之統計數法檢定

參考文獻

Booth, K. H. V. and Cox, D. R. (1962). Some systematic supersaturated designs. *Technometrics* **4**, 489-495.

Box, G. E. P. and Draper, N. R. (1987). Empirical Model-Building and Response Surfaces. John Wiley & Sons, New York.

Draper, N. R. and Smith, H. (1981). Applied Regression Analysis, 2nd. ed. John Wiley & Sons, New York.

Hall, M. J. (1961). Hadamard matrix of order 16. *Jet Propulsion Lab. Research Summary* **1**, 21-26.

Hall, M. J. (1965). Hadamard matrix of order 20. *Jet Propulsion Lab. Technical Report* **1**, 32-76.

Hedayat, A. and Wallis, W. D. (1978). Hadamard matrices and their applications. *Ann. Statist.* **6**, 1184-1238.

Lin, D. K. J. (1993). A new class of supersaturated design. *Technometrics* **35**, 28-31.

Lin, D. K. J. (1994). Supersaturated design using Hadamard matrix. IBM Research Report No. RC19470.

Plackett, R. L. and Burman, J. P. (1946). The design of optimum multi-factorial experiments. *Biometrika* **33**, 303-325.

Satterthwaite, F. (1959). Random balance experimentation. *Technometrics* **1**, 111-137 (with discussion).

Tukey, J. W. (1959). A quick compact two-sample test to Duck-worth's specifications. *Technometrics* **1**, 31-48.

Wallis, W. D., Street, A. P. and Wallis, J. S. (1972). Combinatorics: Room Squares, Sum-Free Sets, Hadamard Matrices. Springer-Verlag, Berlin.

Williams, K. R. (1968). Designed experiments. *Rubber Age* **100**, 65-71.

[民國82年6月29日收稿,民國83年6月1日修訂]

Half Fraction Hadamard Matrix and its Applications in Industry

Dennis K. J. Lin

Department of Statistics
University of Tennessee
Knoxville, TN 37922, USA.

ABSTRACT

Half fraction Hadamard Matrix is used to construct supersaturated design in which the number of factors under investigation exceeds the number of observations. When a Hadamard matrix of order N is used, such a design can investigate $k = N - 2$ factors in $n = N/2$ runs. These designs are recommended only when the proportion of the active factors is small. A real data example is used to illustrate its usefulness. Data analysis methods of such a supersaturated design are also discussed.

Key words and phrases: Supersaturated design, screening experiment, random balance design.

AMS 1991 subject classifications: Primary 62K15.