

嘉南藥理科技大學專題研究計畫成果報告

多重反應值最佳化之反應曲面分析

計畫類別：個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：90-HA-09

執行期間：90年1月1日至90年12月31日

計畫主持人：陳俞成

共同主持人：

計畫參與人員：

執行單位：嘉南藥理科技大學醫務管理系

中華民國 91 年 2 月 28 日

# 嘉南藥理科技大學專題研究計畫成果報告

## 多重反應值最佳化之反應曲面分析

### Multiple Responses Optimization in Response Surface Analysis

計畫編號：90-HA-09

執行期限：90年1月1日至90年12月31日

主持人：陳俞成 嘉南藥理科技大學醫務管理學系

Email:ycchen@mail.chna.edu.tw

#### 一、中文摘要

在產品及製程改善過程，通常可轉化成一個最佳化的求解問題，反應曲面分析技巧的運用具有相當成效。於實務中常常碰到多重反應值之現象，欲同時兼顧各反應值來達到最佳化狀況，勢必作相當程度之妥協。

當多重反應變數之個數較少時，將各反應值對自變數建立之等高線重疊畫在一起，通常可以得到可行之解。雙重反應值法(Dual Response Approach, Myers and Carter, 1973)將反應值區分為主要及次要兩類，在限定次要反應值的情形下，求取使主要反應值最佳化的條件。Biles(1975)將此想法推廣到超過兩個反應值的情況；而 Derringer and Suich(1980)利用想望函數(a desirability function)將各反應值對應之想望值取幾何平均數，將問題轉換成單一的複合反應值，再根據此複合反應值求取使其達到最大值的條件；Khuri and Conlon(1981)測量距離理想最佳化點靠近程度之距離函數，求取使得距離函數達到最小時的條件；而 Ma and Lin(1999)將各反應值建構之反應曲面作線性組合，求取距離各自反應曲面最佳化點距離之條件。

上述各種方法均未考慮當各多重反應變數之間存在相關性時如何求解最佳化之條件，本研究中將探討在不同的相關性下，如何將相關性的訊息運用於求解反應曲面分析中多重反應值之最佳化條件。

**關鍵詞：**反應曲面分析、最佳化、多重反應

#### Abstract

For improvement of quality of industry products and processes, the use of response surface analysis is quite effective. In many practical situations, multiple responses are usually observed and there is a need to reach some type of compromise as far as optimum conditions are concerned.

The overlaying of contour plots along with separate response surface analysis often gives workable solutions as long as the number of responses is not too great. Dual response approach (Myers and Carter, 1973) assumed that the two responses can be categorized as primary and secondary. Then optimizing the primary response is subject to a constraint on the secondary response. Biles(1975) extended dual response approach concept to more than two responses. More over, Derringer and Suich(1980) made use of a desirability function to develop a single composite response which is the geometric mean of the desirabilities of the individual response to build into the optimization procedure. In addition, Khuri and Conlon(1981) introduced a measure of closeness to the ideal optimum based on a distance function. One then finds conditions on independent variables that minimize this distance function over all the experimental region. Ma and Lin(1999) construct the linear combination of the response surface functions of the separated response and minimize the distance among the corresponding local optimum of the response surface functions.

Until now, the correlation between the response was not concerned. In this study, how to embed the information of correlations to the optimization procedure in response surface analysis will be study.

**Keywords:** Response surface analysis, Optimization, Multiple responses

## 二、緣由與目的

反應曲面分析用於改善產品及製程品質是相當有效的工具。在實際情況中，一個產品或製程的反應變數往往超過兩個以上，例如消費性產品除了將品味當成反應變數外，也必須考慮其產生的有害副產品；在製藥或生物醫藥界，主要關心藥物的效能，也不可忽略可能產生的嚴重副作用。因此，多重反應變數在實務上是相當常見的問題。

反應曲面法是一個序貫程序，通常當我們於遠離反應曲面最佳化之位置執行實驗蒐集數據，此時系統反應之曲率較小，而以線性模式估計是適合的。在此狀況下，我們的目的將是引導實驗者快速且有效的往最佳化之位置移動。一旦我們位於最佳化之位置附近執行實驗蒐集數據，利用二次多項式來估計系統反應曲面將是必要的，然後再於此模式中分析定位其最佳化之位置。

在利用線性模式估計反應曲面階段，執行實驗之設計可運用正交一階設計，如 $2^k$ 因子及 $2^k$ 部份因子系列之設計。而利用二次多項式來估計系統反應曲面時，最廣為使用之設計是中心組合設計(the central composite design)。此設計是由 $2^k$ 因子或 $2^k$ 部份因子再增添 $2k$ 主軸點與 $n_0$ 個中心點組合而成。中研院統計科學研究所鄭少為博士於國立成功大學統計系演講時曾提到，透過經驗豐富之工程師合作進行實驗時，有大部份的情形是知道最佳化可能發生之位置，而且執行一次實驗，往往會嚴重干擾製程之運作，因此，直接在最佳化可能發生之位置設計一個 $3^k$ 因子或 $3^k$ 部份因子實驗，可以減少作一次實驗之時間與預算，對傳統反應曲面法來說，是一項革新。

然而，不論是傳統反應曲面法或鄭博士所提之改革法，進行資料分析時，均會面臨到以二次多項式模式建立之經驗模式，是否足以反應真正模式之特性的問題。因此，是否能找出一個合適的經驗模式是值得關注的課題。

讓資料本身選取最足以代表其特性的函數關係，是無母數統計函數估計興起之動機。平滑核方法提供一個發現資料蘊含資訊結構的簡單方法，結合平滑核方法於反應曲面法之資料分析中，可望能找出恰當反應真正情況的模式。

由於反應曲面法在實驗設計分析之運用上具有重要性與廣泛性，若能解決此法所面對之難題，於實務上將有顯著貢獻。透過無母數統計平滑核方法估計反應曲面，取代傳統二次多項式模式之估計，是一項新嘗試。

## 三、結果與討論

在實驗設計分析運用反應曲面法具有重要性與廣泛性，傳統之反應曲面法是一個序貫程序，首先於遠離反應曲面最佳化之位置執行實驗蒐集數據，此時以線性模式估計反應曲面，引導實驗者快速且有效的往最佳化之位置移動；一旦位於最佳化之位置附近執行中心組合設計實驗蒐集數據，則利

用二次多項式來估計系統反應曲面，並據此模式以最陡上升法分析其最佳化位置發生之條件。若依中研院統計所鄭少為博士提議，則位於最佳化之位置附近執行 $3^k$ 因子或 $3^k$ 部份因子實驗，再利用二次多項式來估計系統反應曲面，並據此模式來分析其最佳化位置發生之條件。

臺灣大學數學系鄭明燕教授所發展之梯度樹估計，係利用無母數統計函數估計之技巧，建構樹圖來描述散佈圖中點間之關係。於樣本空間中，對應於資料之最陡上升曲線之集合表現即稱為梯度樹。根據此法可將資料分類，並找出樣本空間中之相對極值位置所在。然而，實務上常面臨之問題是，經由實驗蒐集之資料多屬小樣本資料，根據這些資料直接運用梯度樹估計法，往往會面臨估計結果不穩定之現象。

本研究建議以無母數統計函數估計系統反應曲面替換利用二次多項式來估計系統反應曲面，使用最近鄰域法之平滑核建構由位於最佳化之位置附近執行實驗蒐集數據所反應之經驗模式。根據此模式，將各維度之自變量上、下限間作成 $n$ 等分，若有 $d$ 個自變量，我們將可產生 $(n+1)^d$ 個資料點，此時在使用臺灣大學數學系鄭明燕教授所發展之梯度樹估計法，來求取此模式所反應之相對極值點發生位置，這些極值點所在位置即為我們所欲尋找之最佳化條件。

於模式估計時，所掌握之樣本愈多，通常能夠得到愈準確之估計，然而，我們在此處是透過少數樣本點建構之經驗模式，重新產生資料點，是否依然保有此特性，目前仍未知。另外，我們為了計算方便，將各維度之自變量上、下限間作成 $n$ 等分，此舉是否能有效反應出模式特性，使得利用梯度樹估計法能求取最佳化條件之效率最好，是我們未回答的一個問題；是否能利用模式特性反應區間切割的方法，以助於最佳化條件之求取效率，是一個值得關心的問題。

## 四、計畫成果自評

本研究內容與原計畫相符程度大約為百分之六十五左右，達成預期目標情況約為百分之五十左右，於應用上提出一個實務可行之解。

## 五、參考文獻

- [1] Biles, W. E. (1975), "A Response Surface Method for Experimental Optimization of Multiresponse Processes," *Industrial and Engineering Chemistry-Process Design and Development*, 14, 152-158.
- [2] Box, G. E. P. and Draper, N. R. (1987) *Empirical Model-Building and Response Surface*. New York: John Wiley & Sons.

- [3] Box, G. E. P., Hunter, W. G. and Hunter, J. S. (1978) Statistics for experimenters. An Introduction to Design, Data Analysis, and Model Building. New York: Wiley.
- [4] Del Castillo, E., and Montgomery, D.C.(1993), "A Nonlinear Programming Solution to the Dual Response Problem," *Journal of Quality Technology*, 25, 199-204.
- [5] Derringer, G., and Suich, R. (1980), "Simultaneous Optimization of Several Response Variables," *Journal of Quality Technology*, 12, 214-219.
- [6] Khuri, A.I., and Conlon, M. (1981), "Simultaneous Optimization of Multiple Responses Represented by Polynomial Functions," *Technometrics*, 23, 363-375.
- [7] Khuri, A.I., and Conlon, M. (1987) *Response Surfaces*, Marcel Dekker, New York.
- [8] Lind, E.E., Goldin, J., and Hickman, J.B.(1960), "Fitting Yield and Cost Response Surface," *Chemical Engineering Progress*, 56,62.
- [9] Ma. M.C., and Lin, D.K.J.(1999), personal communication.
- [10] Myers, R.H., and Carter, W.H., Jr. (1973), "Response Surface Techniques for Dual Response System," *Technometrics*, 15, 301-317.
- [11] Myers, R.H., and Montgomery, D.C. (1995) *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, New York.