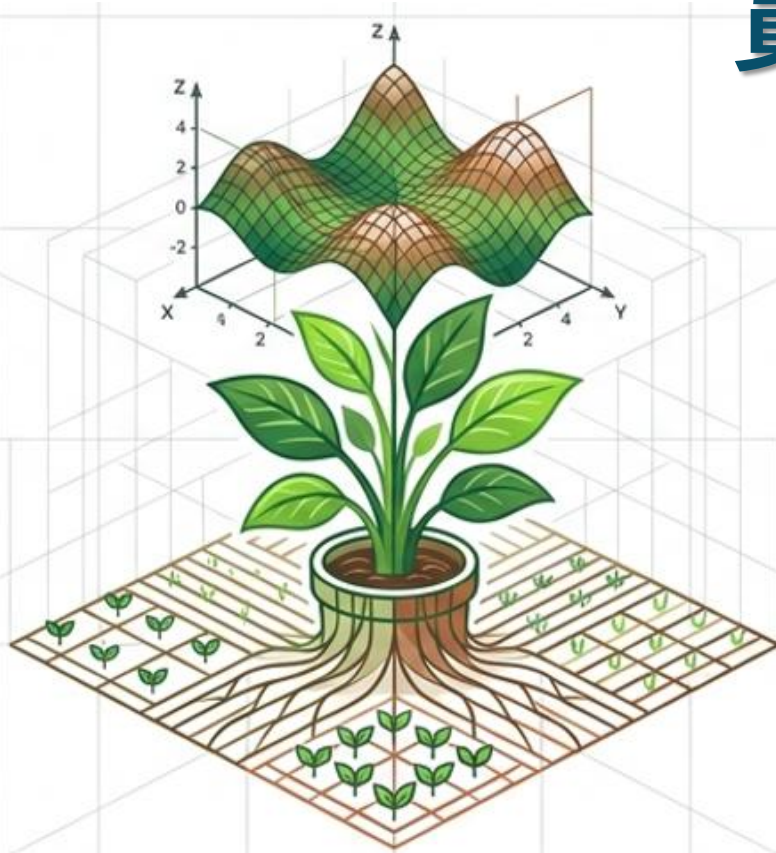


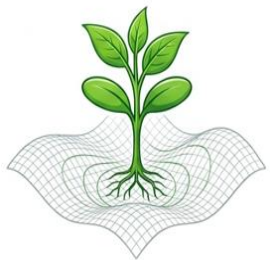
農業科研反應曲面法(RSM) 實務指南



從配方製程、溫室盆栽到田間操作的數據優化與試驗設計策略，
鎖定最佳「農業處方」

呂秀英

iyiing3899@gmail.com



大綱

- 一、RSM分析流程總覽：從問題定義到實際驗證
- 二、RSM設計方法比較：FFD, CCD, BBD, DOD
- 三、農業RSM設計策略：從農產品製程到田間操作優化
- 四、當RSM走入溫室與田間：自然雜訊的挑戰與策略
- 五、反應曲面模型：擬合、診斷及驗證
- 六、農業RSM多反應最佳化策略：滿意度函數應用
- 七、潛在因子預前篩選術：PB設計分析與視覺化
- 八、RSM支援分析工具：綜合評比

一、RSM分析流程總覽：從問題定義到實際驗證



真實世界的試驗往往充滿曲線。
線性模型：錯失真實高峰。



RSM 透過二次多項式回歸，將實際收集的反應值(Y)與因子(X)擬合出能真實反映地形的數學方程式，捕捉系統的彎曲效應。

- 反應曲面法 (Response Surface Methodology, RSM) 由 1951 年 Box 和 Wilson 首創，用以發展、改善、優化製程的統計與數學技術，最終目標在尋找科學系統、產品或製程的最佳條件。
- 已普及電子機械、農業、化學工業、生物科技、材料科學、食品科學及工業製程改善等各項研究領域。
- 以食品配方優化為例，RSM 幫助研究者：
 1. 探討連續變數的多個因子 (factor, 如成分比例、加工溫度等) 對一個或多個反應值 (response, 如口感、保質期等) 的影響，以了解其主效應和交感作用。
 2. 找到最佳配方組合或製程條件，以達到產品或製程的優化。

典型的RSM流程

試驗設計

- 定義因子和反應

操作的因子 (X)

如:成分比例、加工溫度等

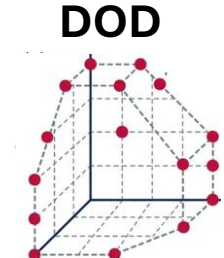
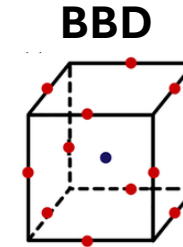
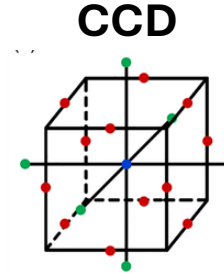
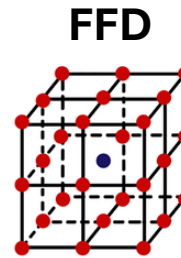
擬找出最適條件

反應值 (Y)

如:口感、保質期等

- 選擇設計方法

1.常見設計

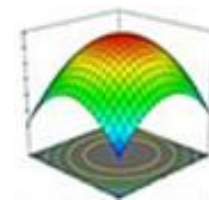


2.模式建構

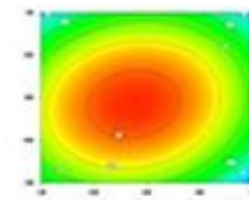
(多元二次多項式回歸)

$$Y = \beta_0 + \underbrace{\sum \beta_i X_i}_{\text{主效應}} + \underbrace{\sum \beta_{ii} X_i^2}_{\text{二次效應}} + \underbrace{\sum \sum \beta_{ij} X_i X_j}_{\text{交感效應}} + \varepsilon$$

3.分析與最佳化



3D反應曲面圖



2D等高線圖

執行試驗

測量反應數據

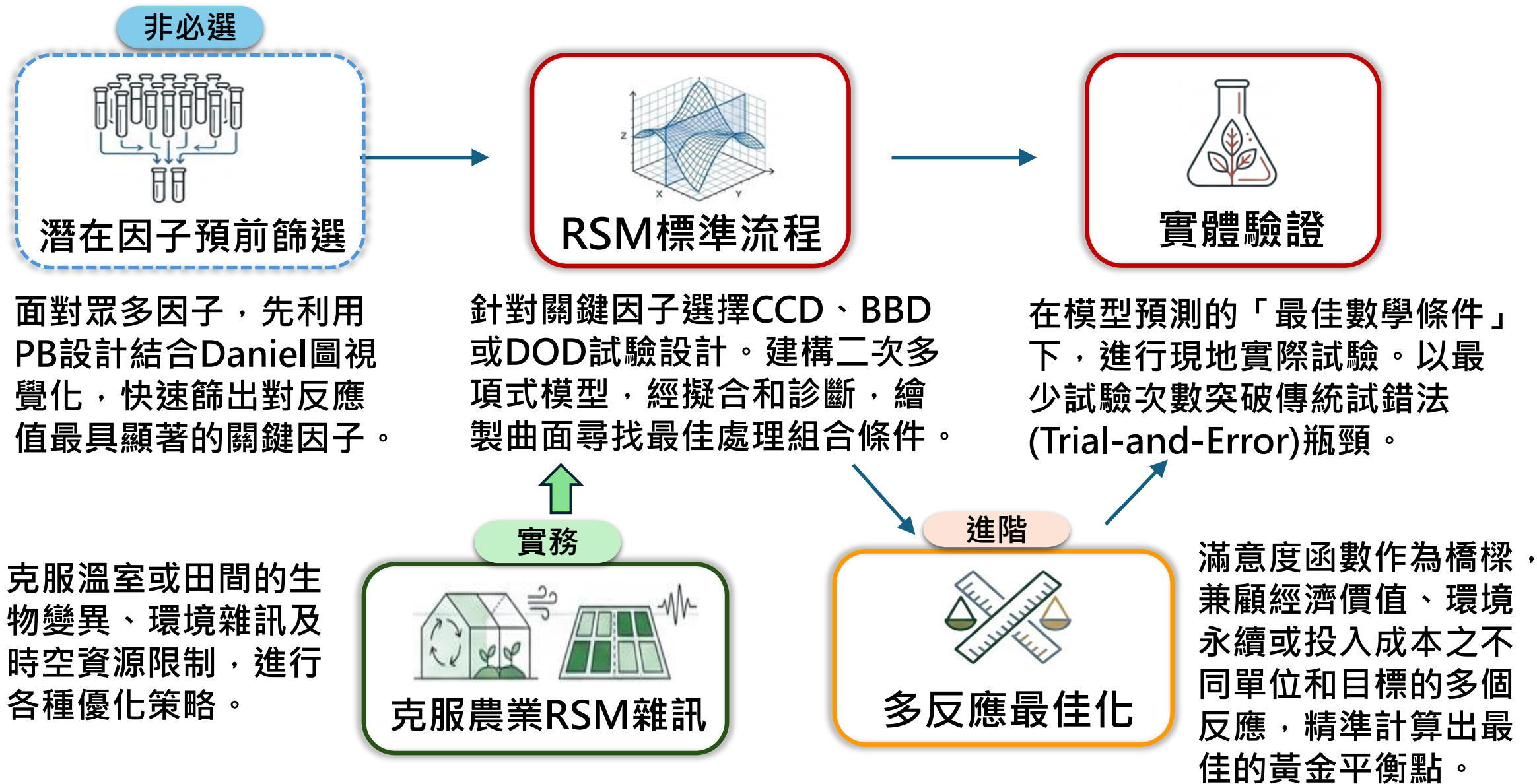
反應曲面 的擬合與診斷

資料分析：模型的
擬合、診斷及解讀

模型驗證

實地驗證模型，找出最適操作條件並確保高度再現性

農業RSM實務藍圖

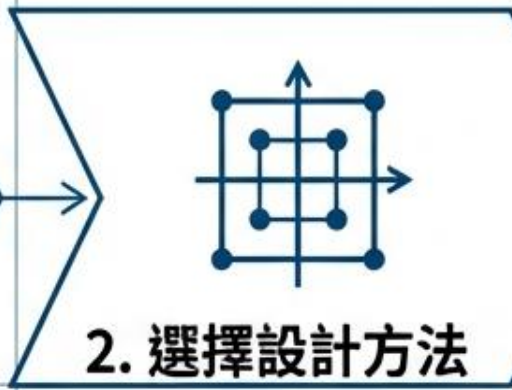


二、RSM 設計方法比較：FFD, CCD, BBD, DOD

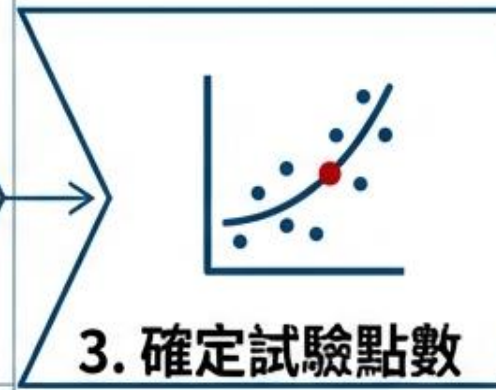
取得 RSM 數據前，要先有好的試驗設計



定義影響反應值(response)的因子(factor)，並設定每個因子的變級(level, 通常是最小值和最大值)。



根據需求選擇適當的試驗設計，如 CCD、BBD 或 DOD。



計算所需點數(通常 15-30 組)，以確保模型能描述主效應、二次效應及交感效應。



降低機差和系統性偏差，以提高結果可靠度。

在「規劃設計方案」、「執行RSM建模」時 定義因子的**變級**，強烈建議用**編碼值**而非實際自然值

自然值(Natural value)：
實務世界的溝通橋樑

數字	Tempeature(X1,oC)	Time(X2,min)	Tickness(X3,mm)
	140	3	1
	160	5	3
文字	Tempeature(X1)	Time(X2)	Tickness(X3)
	Low	3min	1mm
	High	5min	3mm

優點：

- 符合真實世界的物理意義，有利現場操作。
- 評估最佳解是否符合設備的硬體物理極限，確保操作可行性。
- 有利呈現與溝通。

若切換成自然值進行RSM建模，診斷共線性的VIF (變方膨脹因子)指標會隨單位更改(如小時改成分鐘)而產生劇烈暴走，導致無法正確判斷模型的穩定性。

編碼值(Coded value)：
統計建模的黃金標準

Tempeature(X1)	Time(X2)	Tickness(X3)
-1	-1	-1
1	1	1

優點：

- 符合「**正交**」原則的編碼值可消除不同因子間因為「物理單位與數值級距不同」造成的權重失衡。
- 同時能顯著降低多項式回歸中另人頭痛的多重共線性問題，確保能精準計算p值和評估顯著性。
- 編碼值建模的係數可直接相互比較，以此衡量各因子對反應值的相對影響程度 (係數絕對值越大，代表該因子對結果的影響越顯著)。

統計學上，RSM 設計和建模強烈建議 (甚至要求) 必須使用編碼值。

統計與實務的雙軌平行世界：RSM 數值切換的核心應用

流程階段	推薦使用	主要考量
試驗設計(DoE)	編碼值	確保試驗矩陣的均衡與正交性。
RSM建模	編碼值	比較因子間的相對重要性、減少數值誤差。
多反應最佳化	自然值	獲得具備實際操作意義的設定點。
結果呈現	自然值	讓決策者與工程師易於解讀與執行。

- 在實務操作中，大多數現代統計軟體（如 Design-Expert, Minitab, JMP）在後端運算時會自動處理編碼轉換，只需在輸入原始資料時確保單位正確，軟體便會在建模時自動將其編碼，並在優化報告中自動將其轉回自然值顯示。
- 若是手動使用編寫的程式碼（如 R或 Python套件），建議先以編碼值建模，取得模型係數和輸出預測值後，再透過變換公式回推成自然值。

DoE / RSM 的通則：自然值管實務，編碼值管分析。

統計與物理量的精確互換機制與實戰計算

核心雙向轉換公式

$$X_{\text{coded}} = (X_{\text{natural}} - X_{\text{center}}) \div \frac{1}{2}(\text{Range})$$

$$X_{\text{natural}} = X_{\text{center}} + (X_{\text{coded}} \times \frac{1}{2}(\text{Range}))$$

實戰計算：水稻烘乾參數設定

若試驗因子的溫度範圍(全距, Range)是下限160°C到上限180°C (自然值) , 則

中心點 $X_{\text{center}} = (160+180)/2 = 170^{\circ}\text{C}$, 半全距 $\text{HalfRange} = (180-160)/2 = 10^{\circ}\text{C}$ 。

範例 A：求編碼值 X_{coded}

情境：現場實際操作溫度為 165°C。

計算： $(165 - 170) / 10 = \mathbf{-0.5}$
(軟體輸入值)

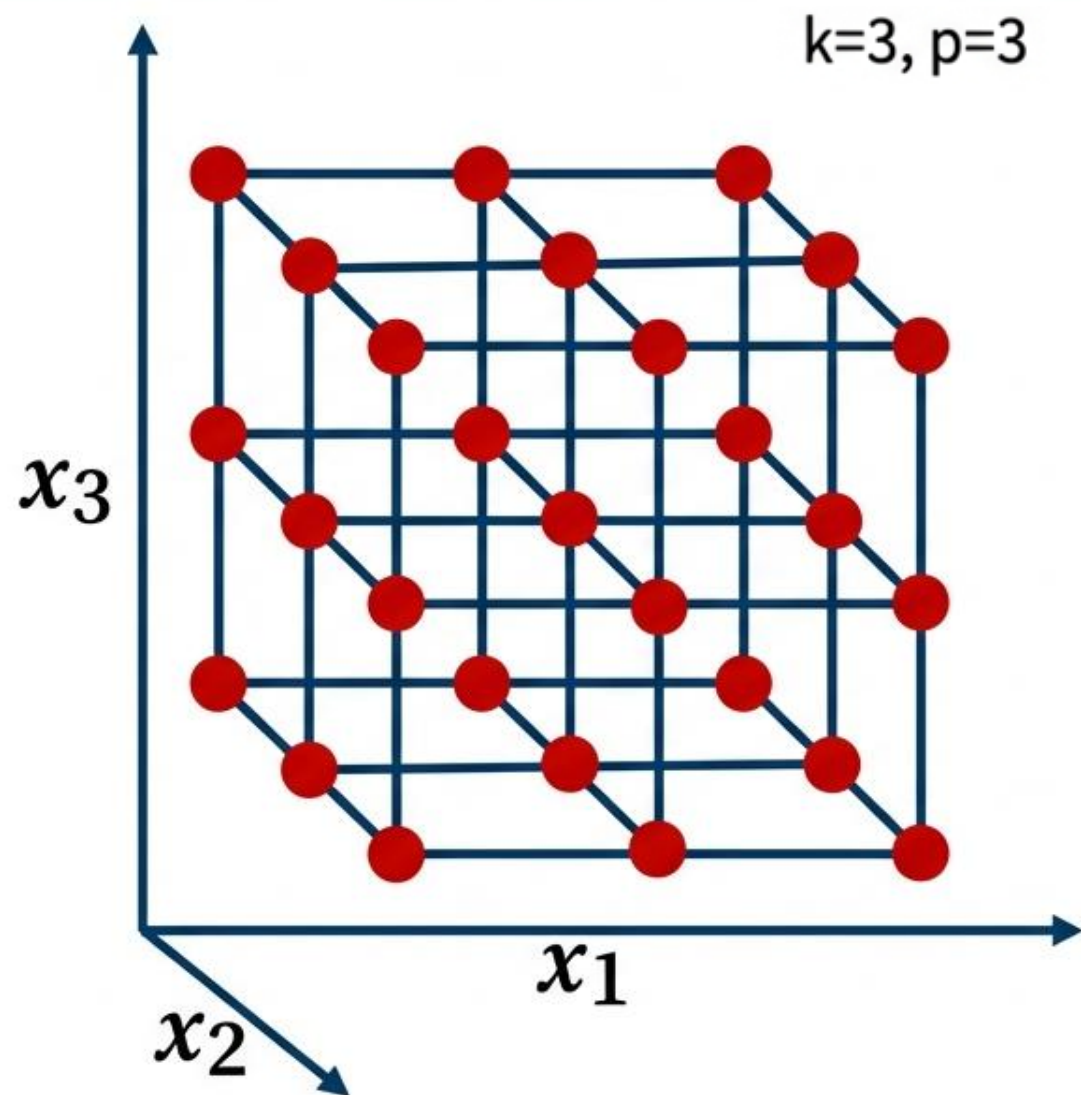
範例 B：反推自然值 X_{natural}

情境：軟體優化建議最佳編碼值為 +0.85。

計算： $170 + (0.85 \times 10) = \mathbf{178.5^{\circ}\text{C}}$
(機台設定值)

核心意義：確保優化結果能準確對應回溫室或產線的真實設定。

全因子設計 (Full Factorial Design, FFD)



試驗條件組合總數: $N = p^k$

(k = 因子數, p = 變級數)

Example: 3因子 ($k = 3$), 3變級 ($p = 3$) $\rightarrow 3^3 = 27$ 組

定義

所有因子在所有指定變級下的所有試驗條件組合。

優點

可完整呈現主效應、二次效應、交感效應，確保數據充分利用。

缺點

試驗點數呈指數型增加。當因子較多時，成本與時間消耗極大。

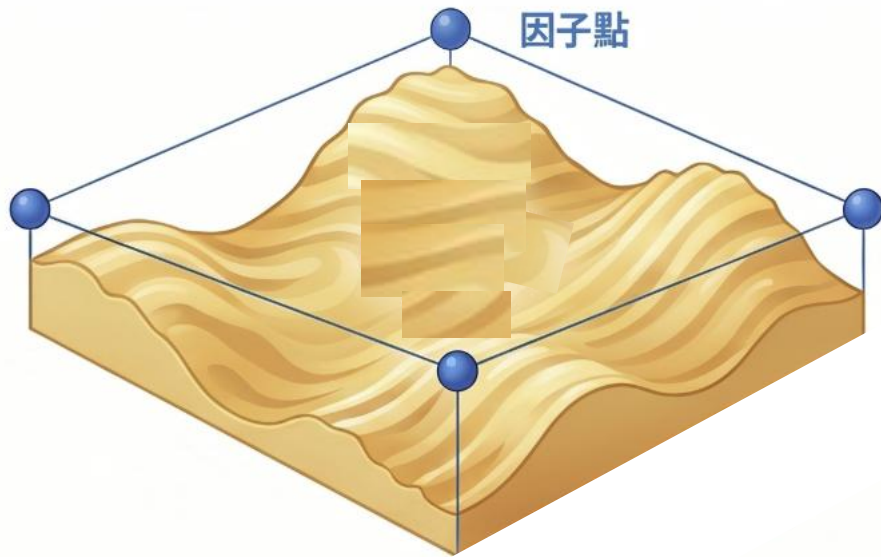
適用情境

因子數量較少 ($< 4-5$ 個) 且變級數較低 (2或3個) 的初步探索性試驗或變數篩選。

FFD 核心原理 – 「暴力美學」的實踐

不做任何妥協，老老實實把所有可能的因子組合，全部地毯式地做過一遍！
FFD通常作為進入RSM曲線優化前的奠基石與前哨兵（如作為 CCD 的基礎立方體結構、或 DOD 的候選試驗組合選點基礎）！

以尋找「薯片黃金酥脆點」為例



因子點：網羅疆界的所有頂點

位於立方體角落，用於看清單獨調整因子的主效應，以及最強大的交互作用。

- 設定油炸溫度與時間的最小值與最大值（如 140 與 160 °C、3 與 5 分鐘），2 因子的重要點位就是立方體的全部 $2^2 = 4$ 個角落，共形成建立地圖的基礎線性趨勢。
- 若再加上第 3 個因子切片厚度的最小值與最大值（如 1 與 3 mm），則有 $2^3 = 8$ 個因子點。

FFD 是傳統的「全因子設計」概念，若要估計試驗機差，還需要重複次數。這會讓試驗的因子條件組合倍增，因此 RSM 極少用到 FFD。

範例

試驗條件組合總數: $N = p^k$

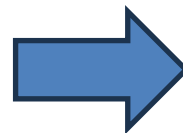
(k = 因子數, p = 變級數)

Example: 3因子 ($k = 3$), 3變級 ($p = 3$) $\rightarrow 3^3 = 27$ 組

3 因子($k=2$) , 2 變級($p=2$) $\rightarrow 2^3 = 8$ 組

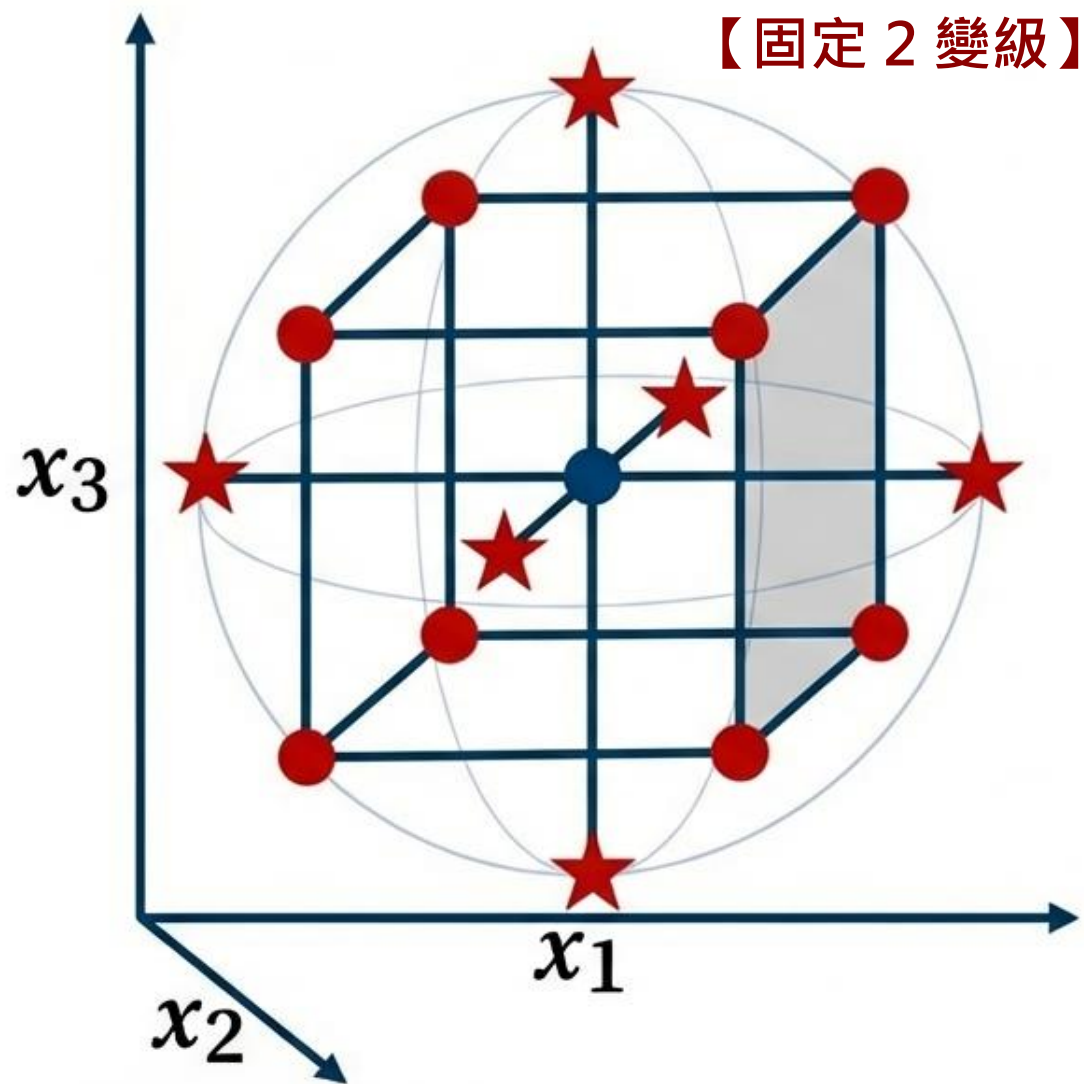
3 因子(X_1, X_2, X_3) , 下、上限的2變級編碼值各為 -1,1 , 則 FFD 生成共 8 組試驗條件組合的設計方案 (無重複) :

#	III X_1	III X_2	III X_3
1	1	1	-1
2	1	-1	-1
3	1	-1	1
4	-1	-1	1
5	1	1	1
6	-1	1	-1
7	-1	-1	-1
8	-1	1	1



- 若無重複, 便無法估算出試驗機差。
- 若指定重複次數=3, 則試驗條件組合總數 = $8 \times 3 = 24$ 組

中心複合設計 (Central Composite Design, CCD)



試驗條件組合總數: $N = 2^k + 2k + C_p$
(2^k = 全因子, $2k$ = 軸點, C_p = 中心點)
Example: 3因子 ($k = 3$) $\rightarrow 8 + 6 + 3 = 17$ 組

定義

結合全因子設計 (2^k) 與額外的軸點 (Axial Points) 和中心點。

優點

RSM中最常用設計。具備「旋轉性」(Rotatable)，在整個設計空間具有良好的預測能力，能探索設計區域邊界。

缺點

軸點試驗 可能超出因子實際可行的操作範圍 (不安全或不切實際)。

關鍵參數

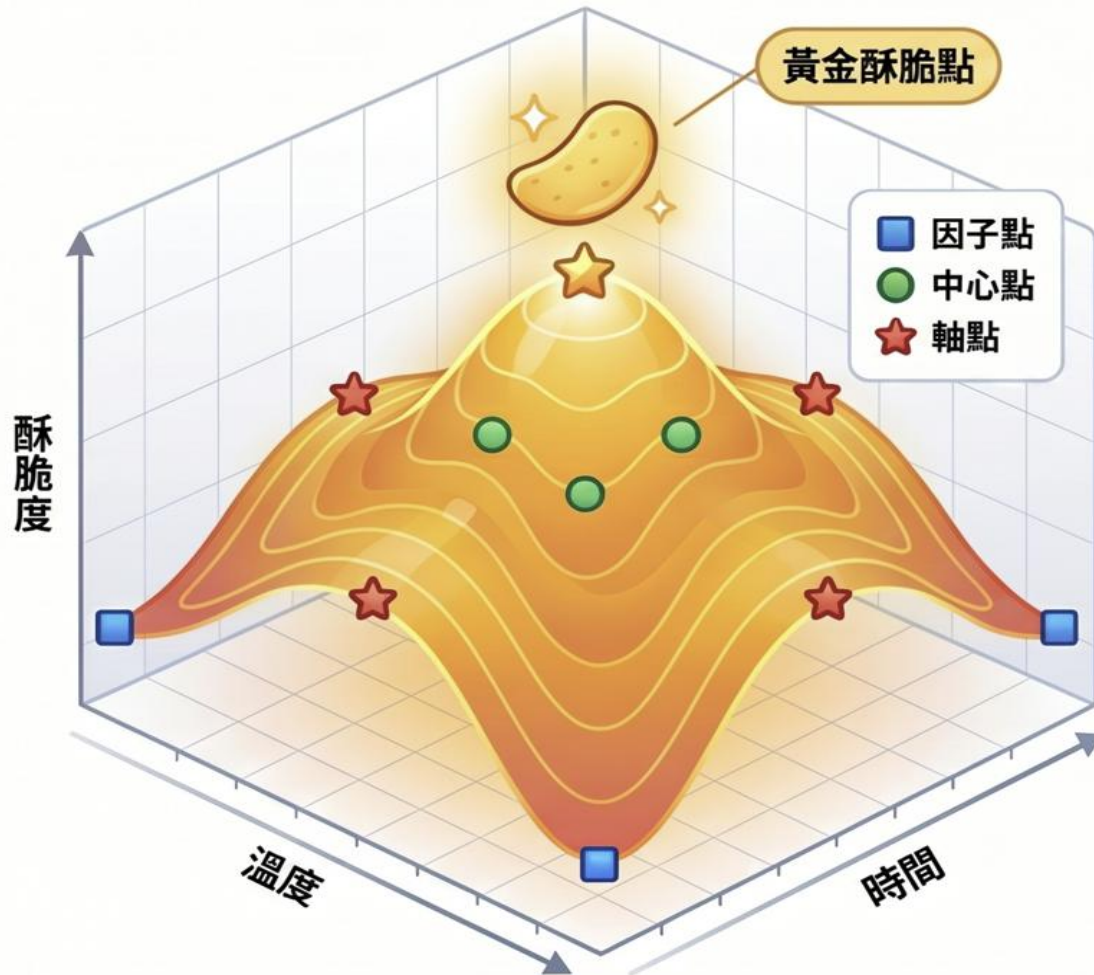
軸點距離 $\alpha = (2^k)^{1/4}$ 。

此為CCD標準設定-
Rotatable(旋轉性設計)方式；仍有其他 α
計算方式可供選擇。

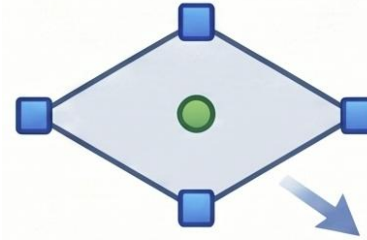
CCD 核心原理 – 旗艦級的「雷達天線」

在 FFD 的基礎上，往外伸出雷達天線，是產業界最愛的積木式彈性設計。

以尋找「薯片黃金酥脆點」為例



因子點：劃定基本邊界 (立方體最外圍的角落點)



設定油炸溫度與時間的最小值與最大值 (如140與160°C、3與5分鐘)，建立地圖的基本線性趨勢。

軸點：探查數據彎曲度 (星號點)



跨出邊界探查極端值 (如130/170°C、2/6分鐘)，找出數據是否有拋物線弧度 (如太久會焦、太短不脆)。

中心點：實驗的定海神針



在中間值 (如150°C、4分鐘) 重複試驗 3~5次，用以計算設備誤差並穩定地圖中心預測。

軸點距離(α)的計算方式

CCD 必須指定 α 值，這決定了試驗空間的範圍。

α 值計算有三種選擇方式

1. Rotatable (旋轉性設計)：

透過 $\alpha = (2^k)^{1/4}$ 計算公式，如 3 因子結構，輸入 $\alpha = 1.6818$ 。這是 CCD 的標準設定，能確保空間中各方向的預測誤差皆一致。

2. Orthogonal (區集正交性設計)：

為維持數學上的「區集正交特性」，由系統自動計算出最佳的值（ α 值會根據區集數與區集內點位配置而微幅變動），能確保因子主效應與交感效應在估計上是獨立的。

2. 自訂 α 值，如 Face-Centered (面中心設計, CCF)：

使用時機只在不想要試驗條件超出 -1 到 1 的範圍（例如 A 因子最高只能調到 1，不能調到 1.6818），CCF 設定 $\alpha = 1$ ，軸點會落在立方體的面。

中心點的功能與意義 (The Function of Center Points)

為什麼要重複測量中心點？

- ✓ **反映試驗機差**：重複測量提供機差估計 (Pure Error)，檢定模型是否過度擬合。
- ✓ **檢驗二次效應**：判斷反應是否存在曲面趨勢 (Curvature)。
- ✓ **穩定性核查**：偵測機器、原料或操作條件是否隨時間發生漂移。

1 點: 僅供參考，無法計算誤差。

2 點: 可初步判斷異常，但適用性有限。

3 點 (推薦)

能進行模型配合度檢定 (Lack-of-fit test)。大多數軟體 (JMP, Minitab) 與教科書的標準建議。

CCD：通常 ≥ 3 個 (有時 4-5 個)

BBD：通常 3-4 個

範例

試驗條件組合總數: $N = 2^k + 2k + C_p$

(2^k = 全因子, $2k$ = 軸點, C_p = 中心點)

Example: 3因子 ($k = 3$) $\rightarrow 8 + 6 + 3 = 17$ 組

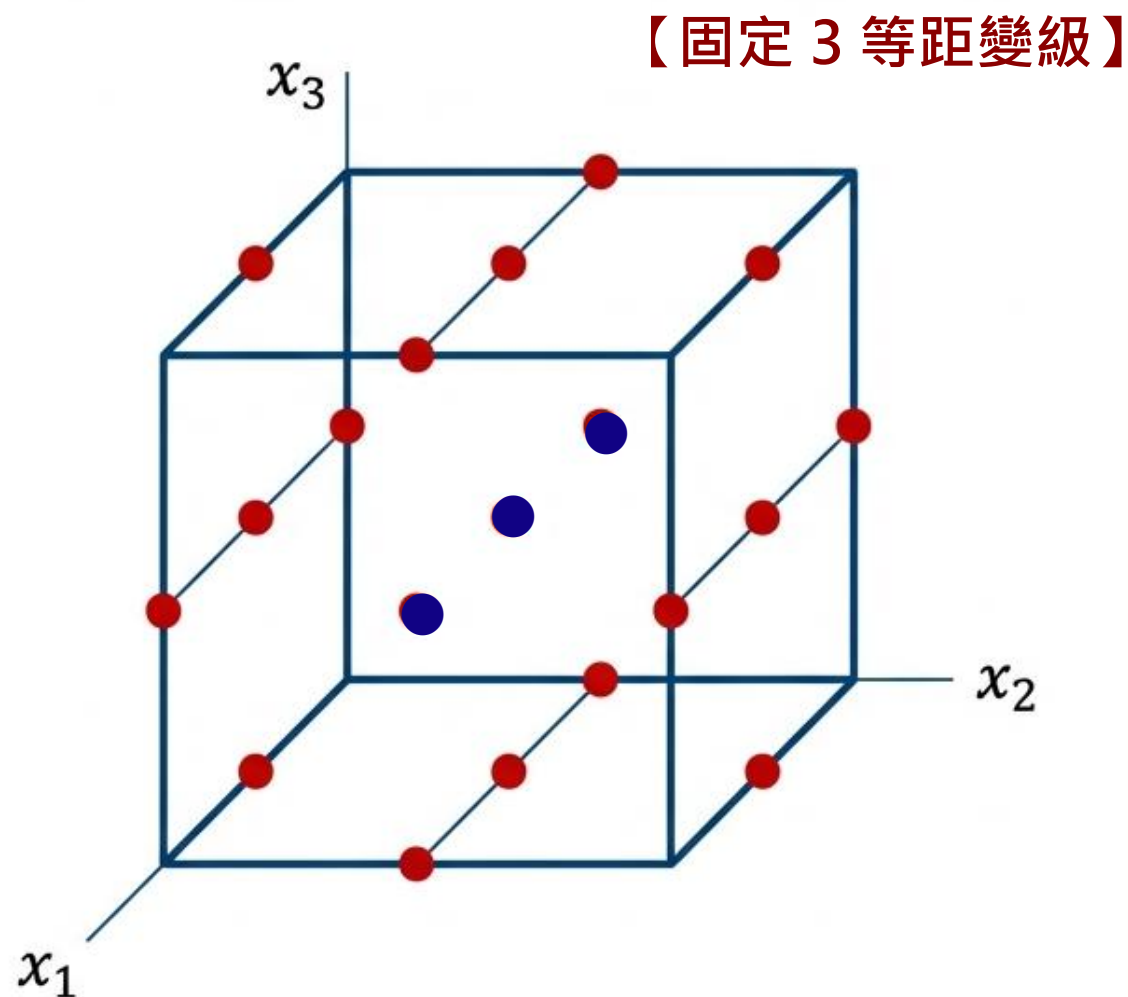
假設 3 因子 (X1, X2, X3), 變級編碼值各為 -1, 1 (固定 2 變級), 3 中心點, 在無區集場合 (例如試驗能一次做完或無空間變異時), 則 CCD 生成共 17 組試驗條件組合的設計方案:

- 8個因子點。
- 3 個中心點 (自設, 通常3~5)。
- 6個軸點: 3 因子預設會自動產生 6 個軸點, 分別在 $+\alpha$ 與 $-\alpha$ 的位置。在無區集下使用 Rotatable (旋轉性設計) 的計算方法得出 $\alpha = 1.6818$ 。

(此為未逢機化設計順序)

	StdOrder	X1	X2	X3
因子點	1	-1	-1	-1
	2	1	-1	-1
	3	-1	1	-1
	4	1	1	-1
	5	-1	-1	1
	6	1	-1	1
	7	-1	1	1
	8	1	1	1
中心點	9	0	0	0
	10	0	0	0
	11	0	0	0
軸點	12	-1.6818	0	0
	13	1.6818	0	0
	14	0	-1.682	0
	15	0	1.6818	0
	16	0	0	-1.6818
	17	0	0	1.68179

Box-Behnken 設計 (BBD)



試驗條件組合總數： $N = 2k(k - 1) + C_p$

Example: 3因子 ($k = 3$) $\rightarrow 2 \times 3(2) + 3 = 15$ 組

定義

點分布於因子設計空間的「立方體邊緣中點」和中心點（不包含頂點）。

優點

試驗效率高（比CCD少），且無極端值組合，避免難以實現的試驗條件。

缺點

對設計空間「角落」的預測覆蓋較差；因子數必須 ≥ 3 。

適用情境

需擬合二次模型，但希望減少試驗次數、避免極端條件，且預計最佳點位於因子範圍中間時。

BBD 核心原理 – 「安全與中庸」之道

絕對不測試任何極端角落，而是把試驗點位都安排在邊界的「中間點」。
基於BBD的幾何特性，它**至少需要 3 個因子**才能成型喔！

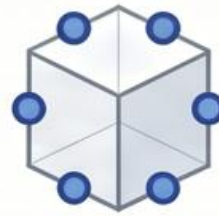
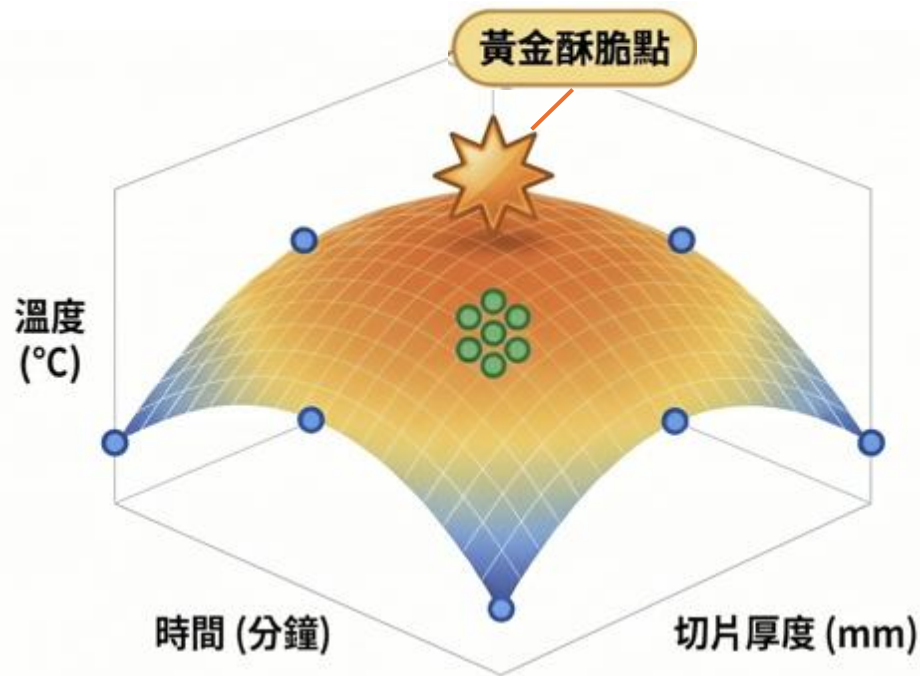
以尋找「薯片黃金酥脆點」為例

假設3因子範圍為

溫度：140°C(低) / 150°C(中) / 160°C(高)

時間：3分鐘(短) / 4分鐘(中) / 5分鐘(長)

厚度：1mm(薄) / 2mm(中) / 3mm(厚)



邊界中點 (稜點, Edge points)

位於正立方體每條邊的中間，確保不同時出現兩個極端條件，安全地測出因子間的交互作用。

設計空間將所有的「8個角落（因子點）」全部拿掉，改成去測量每條邊相對安全的正中間。例如：

- (160°C, 5分鐘, 2mm) — 雖然高溫又炸得久，但好險厚度適中(2mm)，薯片才沒有黑掉。
- (140°C, 3分鐘, 2mm) — 雖然低溫又時間短，但因為厚度適中，不至於完全咬不動。
- (150°C, 5分鐘, 1mm) — 雖然時間長、薯片又薄，但因為溫度拉回溫和的中間值(150°C)，所以沒有燒焦。



中心點

所有條件皆為中庸值的完美組合，重複執行多次以排除環境誤差並穩定 3D 曲面的中心。

BBD的因子數與變級數有嚴格的統計學限制

1. 因子數的限制

- **最低 3 因子**：BBD的基礎門檻，少於 3 個無法構成BBD的設計網格。
- 因子上限：理論上可到 7 因子，但實務上若因子數 > 5，BBD實驗次數會呈指數級爆長。建議先用PB設計預前篩出3~4個關鍵因子後再使用BBD，或考慮改用CCD或DOD。**通常 3~5 因子是BBD最常用的範圍。**

2. 變級數的限制

- **必須「正好為 3 個」**：
 - 1：低水準 (low)
 - 0：中心水準 (center/mid)
 - +1：高水準 (high)
- 若 < 3：BBD數學結構無法計算出「二次項」，也就無法繪製出反應曲面圖。若試驗只需 2 變級，應該回頭選擇 CCD。
- 若 > 3：BBD 矩陣運算會失效。BBD 的設計點組合是透過特定的「不完全區集設計」產生，點的空間位置被固定在 $\{-1, 0, 1\}$ 三個點上。若增加第4個變級，矩陣將不再具備 BBD 的統計優勢。

注意

1. BBD是一種「固定型」的設計，它強制要求中間點必須是最小值與最大值的算術平均值。
2. 使用了 BBD，切記不要去嘗試修改中間變級(0)的值。若發現實驗室設備無法準確維持在這個點位，則該BBD的統計效能就會大幅折損。

範例

試驗條件組合總數： $N = 2k(k - 1) + C_p$

Example: 3因子 ($k = 3$) $\rightarrow 2 \times 3(2) + 3 = 15$ 組

3 因子(X1, X2, X3)，設定變級編碼值各為-1,1。
(BBD 固定為3個等距變級。在軟體系統中只要設定變級編碼值 “-1, 1”，不需要自行定義“-1, 0, 1” 的標籤，軟體系統通常會自動預設為這3個變級。)

BBD生成共 15 組試驗條件組合的設計方案：
12 邊界中點 + 3 中心點（自設，通常建議3~4）。

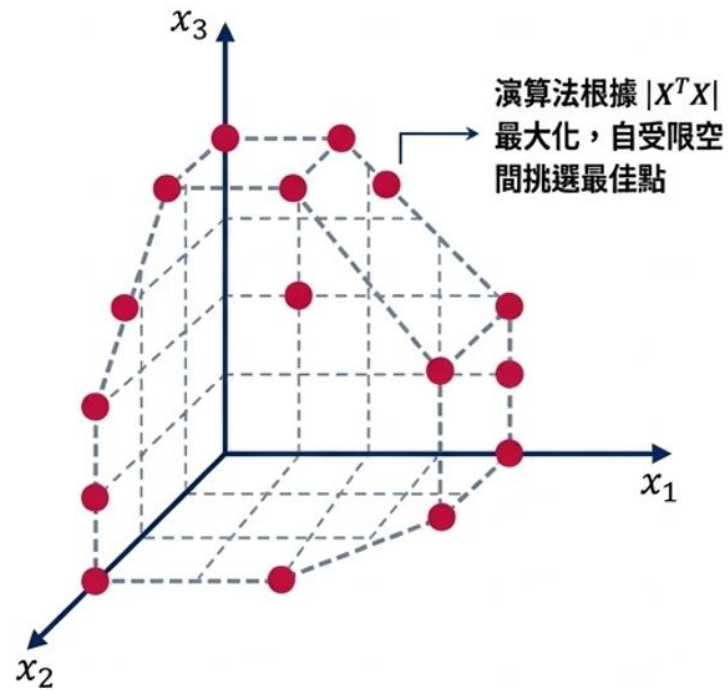
(此為未逢機化設計順序)

邊界中點

中心點

StdOrder	X1	X2	X3
1	-1	-1	0
2	1	-1	0
3	-1	1	0
4	1	1	0
5	-1	0	-1
6	1	0	-1
7	-1	0	1
8	1	0	1
9	0	-1	-1
10	0	1	-1
11	0	-1	1
12	0	1	1
13	0	0	0
14	0	0	0
15	0	0	0

D-最適設計 (D-optimal Design, DOD)



此例 3 因子的二階模型參數總數 p
=1 截距+3 主效應+3 交感項+3 二次項
=10, 並指定重複補充點 $C_{\text{extra}}=6$, 設計
空間內共16個點位。

試驗條件組合總數： $N = p + C_{\text{extra}}$

(p : 模型參數總數, C_{extra} : 自行指定的重複補充點或配適檢定點)

Example(以二階模型為例): 2因子($p=6$) $\rightarrow$ 6~9組; 3因子($p=10$) $\rightarrow$ 10~16組

定義：

基於訊息矩陣行列式值 $|X^T X|$ 最大化原則，透過電腦演算法自龐大的候選試驗點集合（候選池）中動態挑選出最佳化試驗組合。

優點：

- 高度客製與彈性：試驗總次數可自訂。
- 突破空間限度：能輕鬆處理不規則或受阻檔的試驗空間，且可混合連續型與類別型因子 (如品種、配方)。
- 模型導向高效能：針對自訂的一階、二階或非線性模型，精確調配訊息量最大的點位。

缺點：

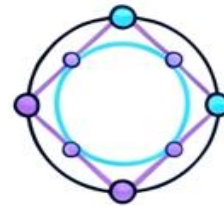
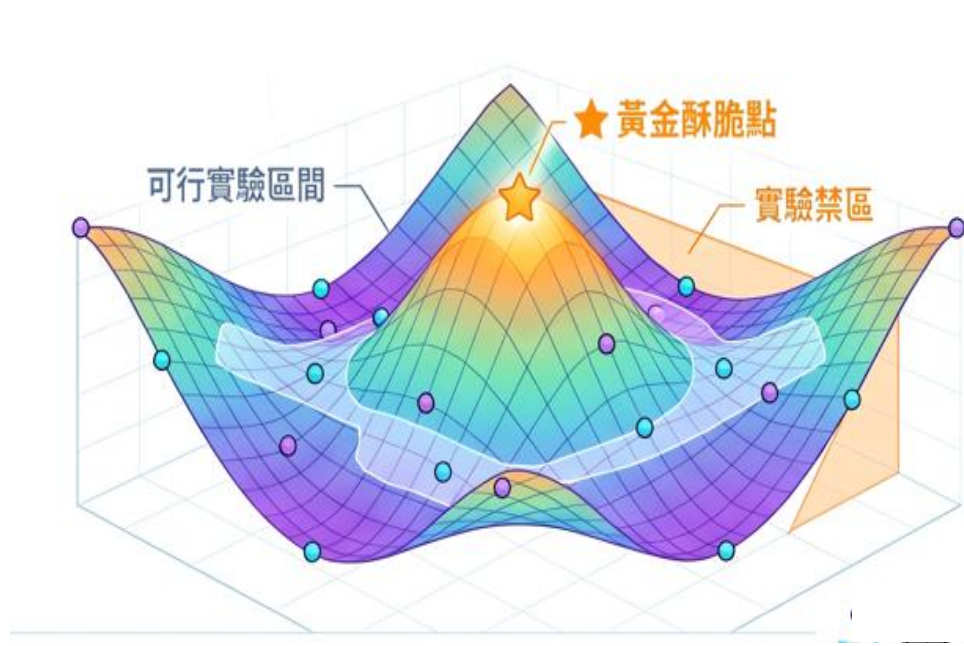
- 模型強倚賴性：選點極度倚賴假設的模型公式；若預設模型與真實系統偏差過大，估計效率會下降。
- 缺乏幾何對稱性：點位分布多集中於邊界或角落，空間鋪滿直觀性較差。
- 需倚賴專業統計軟體演算法生成，無法透過手動或簡單幾何推導建構。

適用情境：

- 試驗資源極度受限、試驗空間受物理或經濟條件限制、或包含類別變數時的最佳解。
- 適合客製化的不對稱研究。

DOD 核心原理 – 穿越限制的「量身打造」

透過電腦演算法，在現實限制 (如禁區與預算) 下精準找出薯片的「黃金酥脆點」。



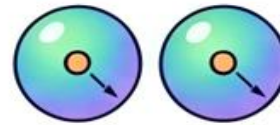
極端邊界點 (Boundary Points)

挑選可行範圍最外圍的頂點，提供最大資訊量槓桿力以估計主要影響。



內部與曲率偵測點 (Interior Points)

填補空間中的資訊缺口，精準預測3D拋物線地圖的弧度與趨勢。



演算法重複點 (Algorithm Replicates)

根據需求自動在中心或高價值邊界點重複試驗，用以估計背景誤差。



DOD 核心原理：打破框架的智慧選擇

排除「試驗禁區」的可行候選池中執行電腦精算

依據領域知識以人工篩選或數學公式過濾，先在候選池避開危險組合(如高溫加超薄片導致起火)，僅在可行區域佈點。

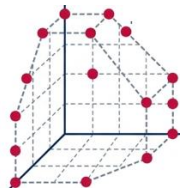
極大化資訊量，最小化誤差

非人工預設，而是由電腦精算在候選池中剩餘點位中挑選出最佳的DOD子集，能提供最大數據槓桿力的客製化組合。

彈性應對預算與變數限制

支持自定義試驗次數 (如僅炸12鍋)，並可混搭品種等類別變數。

D-Optimal Design (DOD) vs. Doehlert Design (DD)

比較項目	D-最適設計 (DOD) 勝	杜勒特設計 (DD)
視覺形象	 不規則分布 (電腦精算選點)	 蜂巢狀 / 同心圓網格 (固定幾何純形擴展)
空間覆蓋與擴充	試驗點多集中於角落與邊界。	試驗點分佈均勻，極易向上動態擴充試驗範圍。
試驗空間限制	可處理不規則邊界、限制區域	必須是標準的球形/標準超立方體空間，無法處理受限邊界。
模型彈性	極高 (一階、二階、非線性、非多項式皆可)。	固定 (二次二階反應曲面模型) → 結構複雜且矩陣缺正交性(模型參數估計值間存在輕微共線性)，解釋性較差。
因子類型	可混合連續型與類別型因子 (如配方、品種)。	僅限連續型因子。
變級數	可自訂各因子不同變級。	在幾何演算法上自動且強制賦予各因子不同的變級數(如 3 因子會被強制分配為 5、7、3 個不同變級，易造成現場實驗操作變繁瑣)。
最佳適用時機	資源受限、試驗空間受限、包含類別變數或客製化設計。	需以極少次數配適二階曲面，且依因子重要性給定不同精細度時。
主流軟體支援度	有	無

傳統的反應曲面設計(如 CCD、BBD) 通常只能處理連續變數，而處理類別型因子正是 DOD 的強項，也允許將連續與類別變數混合在同一個模型中最佳化。

 但是需要特別注意類別因子
沒有平方項或中心點：

- **無曲率概念**：連續變數（如溫度）有大小和連續性，可評估二次效應（曲率）。但類別變數（如不同種類配方、農藥品牌、作物品種等）之間是離散的，無法形成「平滑的曲線」。因此，類別因子永遠只能用一階（主效應）模型表示，在模型公式中絕對不能加入類別因子的平方項。
- **無法定義中心點**：在設定包含類別型因子的 DOD，核心挑戰在於設計空間由連續的超立方體 (Hypercube) 轉變為離散的網格點。

 引入類別型因子在設定與建模要特別注意的關鍵：

1. 自由度的急遽消耗

類別型因子對模型自由度的消耗遠大於連續型因子。通常建議 $N \geq p+4$ ，確保有足夠誤差自由度。

2. 模型矩陣的編碼方式

軟體在處理類別型因子的數學運算時，必須將其轉換為數值，例如虛擬變數編碼 (0/1) 用於有對照組場合；效應編碼 (-1/0/1) 用於將各變級的效應與總平均作比較，確保 ANOVA 分析與係數解讀符合試驗目的。

3. 候選池與演算法選擇

包含多個類別因子的複雜設計，候選點組合會呈指數爆炸，故建議採用「座標交換演算法」。它不需要預先建立龐大的候選池，能更有效在高維度離散/連續混合空間中找到局部最佳解。

4. 交感項的物理意義

在模型設定階段必須明確告訴演算法你預期的反應曲面行為(僅含主效應或包含類別與連續因子的交感)。否則高度依賴模型的 DOD 在最佳化演算法不會主動估計。

DOD包含類別因子的RSM實務作法

1. 當因子是「等級」的類別變數：盡量改以實際測量連續值來表達。例如通風量(高、低) → 通風量(0.01、0.05 m³/s·m²)；每周或每天灌溉一次 → 灌溉頻率每周1或7次, ...等。
2. 當因子是「名義」的類別變數：將「類別 x 連續」交感項放入複回歸模型進行擬合後，通常不點選傳統純連續變數的 RSM 選單，而是將不同類別變數(如品種、農藥品牌、設備型號等)分開來進行RSM分析。

當軟體在處理含有類別變數的 RSM 分析時，其背後的數學模型為：

$$\text{Response (Y)} = \beta_0 + \underbrace{\sum \beta_i X_i + \sum \beta_{ii} X_i^2 + \sum \beta_{ij} X_i X_j}_{\text{連續因子的 RSM 曲面 (弧度與斜率)}} + \underbrace{\sum \gamma_k (\text{Cat}_k)}_{\text{類別因子的截距位移}} + \underbrace{\sum \delta_{ik} (X_i \times \text{Cat}_k)}_{\text{類別與連續因子的形狀/斜率交互作用}}$$

這在幾何與分析上的意義是：軟體實際上是為每一個「類別變級」分別擬合出一張獨立或平行推移的 3D 反應曲面。

- 
- 若交感不顯著：各類別的曲面形狀完全相同(曲率相同)，只是高低不同(截距不同)。
 - 若交感顯著：各類別擁有「完全不同形狀、斜率與最佳點位」的獨立 3D 曲面。

DOD的兩個重要參數：「試驗的規模」與「演算法搜尋的嚴謹度」

決定試驗計畫是否兼具「成本效益」與「統計可靠性」的核心。

參數	建議值 (3 因子)	關鍵影響	數學邏輯
Number of Runs (試驗總次數)	12 ~ 16	決定試驗時間與成本	註 1
Optimization Repeats (最佳化搜尋重複次數)	10 ~ 20	決定設計方案的統計品質	註 2

【註1】在二階模型下，3 個因子最少需要 10 個試驗點位才能解出所有係數。若設為10 次（剛好達到自由度限制），模型沒有容錯能力；若多出 2~6 個點，這些額外的試驗點位可作為重複點或誤差估計點，能大幅提升未來執行RSM的穩定性與模型配適度。

【註2】DOD是透過交換演算法在已建立「候選母體」(用FFD全因子設計) 的大量點位中篩選組合。演算法會從隨機起點開始，重複進行多次搜尋，以避免陷入局部最優解。優化重複次數越高，找到真正統計效率最高的設計之可能性就越大。此參數不影響實驗室的試驗次數（不增加成本），只影響電腦運算時間。在 3 因子規模下，計算 20 次幾乎是瞬間完成，能確保軟體給出的設計方案在統計上是極佳的。

DOD設計方案在統計學上「品質」把關的關鍵評核指標 (上)

衡量DOD品質的核心工具，各自關注模型配適與預測的不同面向。

指標代號 (全名, 統計意義)	核心目標	實務解讀與影響	理想值與評估標準
Dea (D-efficiency , D-效能)	將 D 基準化，計算相對理想完全正交設計的資訊量比例。	衡量因子間的「正交性」或「共線性」風險。是實務上最關鍵的首要指標。	介於 0 到 1 之間。實務上強烈建議應大於 0.7 (70%)。數值過低代表共線性嚴重，會無法準確剝離單一因子的真實效應。
G (G-efficiency , G-效能)	控制試驗設計空間內，最大的預測變方。	衡量「模型預測能力的穩定度」。確保設計空間的邊界或特定角落不會出現預測誤差極大的「盲區」。	介於 0 到 1 之間。數值越高越好，建議至少維持在 0.5 (50%) 以上，以確保全域預測結果的可靠性。
A (A-optimality , A-最適性)	最小化訊息矩陣反矩陣的對角線元素總和（即平均變方）。	衡量「模型參數估計的平均精確度」。數值越小，代表回歸係數的信賴區間越窄，統計檢定力越強。	數值越小越好。為絕對值，受模型參數總數影響。若數值異常膨脹，代表設計中有某些參數極難被準確估計。
D (D-optimality , D-最適性)	最大化訊息矩陣行列式，最小化參數聯合信賴橢球體積。	衡量設計所能提供的「絕對總體資訊量」。	數值越大越好。但此是絕對值，受模型複雜度與試驗次數影響，僅適用於條件完全相同的設計間互相比較。

DOD設計方案在統計學上「品質」 把關的關鍵評核指標 (下)

為何 CCD/BBD 不需要檢視這些統計上的評估指標？

CCD/BBD 決定了因子數和設計類型後，設計點的位置基本上已經固定，無法透過「多跑幾次優化」來改變這些點位以提升效率，屬於「**固定且預定義**」的設計，**不像 DOD 是「彈性搜尋」的設計。**

實務應用

- **優先看 Dea**：這是決定設計「能不能用」的門檻。若 Dea 太低，代表先天體質不良，後續的數據分析會非常痛苦。
- **次要看看 G 與 A**：當有多個 Dea 相近的備選設計時，可挑選 G 較高（預測較穩定無盲區）且 A 較小（參數估計較精準）的方案。
- **D 值僅供參考**：除非是在相同試驗次數與相同模型設定下讓演算法自動尋優，否則不需要太在意 D 值的絕對大小。

範例 1：因子為對稱變級 (變級數相等) – 無排除任何限制條件組合

DOD方案 1: 試驗總次數=13

Run	X1	X2	X3
1	0	1	-1
2	0	-1	0
3	1	-1	-1
4	1	1	0
5	0	0	1
6	-1	0	0
7	1	1	1
8	-1	1	1
9	-1	1	-1
10	-1	-1	-1
11	1	0	-1
12	-1	-1	1
13	1	-1	1

假設三因子各3變級
(編碼值 -1, 0, 1)



設定執行試驗總次數(Run no.)各為
13 次和 16 次兩種設計。

從 13組和 16 組試驗這兩種設計方案的
品質評核指標來看，16組試驗在
預測精度與整體效率上顯著優於 13
組試驗 (Dea 與 G大幅提升)，代價
僅為增加 3 組試驗。

DOD方案 2: 試驗總次數=16

Run	X1	X2	X3
1	0	1	1
2	1	1	1
3	0	1	-1
4	1	1	-1
5	1	-1	-1
6	1	0	0
7	1	-1	1
8	-1	1	1
9	0	0	1
10	-1	1	-1
11	-1	-1	-1
12	-1	0	-1
13	0	-1	0
14	1	1	0
15	-1	-1	1
16	-1	1	0

設計品質指標:

Dea	G	A	D
0.5850	0.6510	3.7264	0.4609

設計品質指標:

Dea	G	A	D
0.7060	0.7420	3.7940	0.4580

如本例三因子各3變級(設定試驗總次數=13，無排除任何條件組合) 的 DOD 品質評核解析如下：

【指標解讀】

- $Dea = 0.5850$ ，相較於理論理想狀態($>70\%$)，58.5%的Dea效率偏低。這是因為 13 點設計為了壓低總點數，將所有點數都用於鋪設幾何骨架，缺乏額外的空間點來稀釋係數間的估計共線性。
- $G = 0.6510$ ，此指標衡量設計空間內「最大預測變方」的均勻度（越接近 1 越均勻）。65.1% 的 G 效率代表預測精度在中心點表現最好，但在試驗區域的幾何外圍邊緣，預測誤差會顯著放大，存在邊緣預測盲區。
- $A = 3.7264$ ，此指標為各回歸係數變方的平均和（越低越好）。3.726 呈現了 13 點設計下的基準波動水平，意味著個別係數的SE相對較大，對數據噪聲的敏感度較高。
- $D = 0.4609$ ，其絕對大小意義較侷限，會受到試驗總次數與模型複雜度的影響，僅供參考。0.4609 屬於中等偏低的數值，代表在僅有 13 個試驗點的幾何限制下，模型的總體資訊涵蓋量剛好達到建立二階曲面的基本門檻。

【結論】

- 該 13 組試驗方案是一個將「試驗規模極小化」的戰略設計。它非常適用於樣品極度昂貴、資材成本高昂或試驗空間受限的極致省錢情境；但由於缺乏純誤差估算能力且邊緣預測變方較高，若用於複雜田間試驗或發表論文，其預測防禦力與統計說服力會相對薄弱。
- 若考量到試驗過程中的不可控變數，建議在資源允許下在設計中將試驗總次數微升至 15 或 16 次。

最優化指標	DOD設計方案 13組試驗	DOD設計方案 16組試驗	評估標準	解讀與勝負
Dea	0.585	0.706	越高越好	16組試驗方案大勝 (+20.7%)。考慮試驗點配置後，16 組設計的資訊矩陣效率明顯較高。
G	0.651	0.742	越高越好	16組試驗方案勝出 (+14.0%)。明顯降低了空間邊緣極端點的最高預測誤差。
A	3.726	3.794	越低越好	16組試驗方案微高 (1.8%)。這是在新增 3 個點（通常為中心點重複或補充點）重新分配資訊權重時的正常波動，微幅上升的影響有限。
D	0.461	0.458	越高越好	持平。兩者在估計整體模型係數的總資訊量上幾乎沒有差異。

【結論】

- 強烈推薦選擇 16 組試驗的DOD設計方案：16 組試驗在預測精度與整體效率上皆明顯優於 13 組試驗 (Dea 與 G 大幅提升)，代價僅為增加 3 組試驗。
- 僅在以下情況考慮 13 組試驗的DOD設計方案：田間或實驗室單一處理組代價極其高昂（如高價抗體、極耗時的田間試驗），且只需要初步估算係數，不需要在曲面邊緣進行高精度的預測推導。

範例 2：因子為對稱變級 (變級數相等) – 排除禁區條件組合

本例三因子各3變級，若在原始候選池內先排除「超薄片在長時間高溫可能起火(160°C, 5min, 1mm)」危險區，在剩餘的 26 個條件組合的自訂候選池內進行 DOD 優選 (設定試驗總次數=16)，所得執行試驗表與品質評核解析如下：

DOD方案 3: 試驗總次數=16 (排除 (160°C, 5min, 1mm) 條件組合

Run	X1	X2	X3	PointType	X1_natural	X2_natural	X3_natural	StdOrder
1	0	1	1	DOptimal	150	5	3	25
2	1	-1	-1	DOptimal	160	3	1	3
3	0	1	-1	DOptimal	150	5	1	8
4	-1	0	0	DOptimal	140	4	2	12
5	1	0	-1	DOptimal	160	4	1	6
6	-1	-1	1	DOptimal	140	3	3	18
7	-1	0	-1	DOptimal	140	4	1	4
8	-1	1	1	DOptimal	140	5	3	24
9	0	-1	0	DOptimal	150	3	2	10
10	1	1	0	DOptimal	160	5	2	17
11	1	1	1	DOptimal	160	5	3	26
12	-1	1	0	DOptimal	140	5	2	15
13	-1	1	-1	DOptimal	140	5	1	7
14	1	-1	1	DOptimal	160	3	3	20
15	-1	-1	-1	DOptimal	140	3	1	1
16	0	0	1	DOptimal	150	4	3	22

指標	數值
Dea	0.6300
G	0.6840
A	3.7186
D	0.4517

【結論】

排除「超薄片在長時間高溫可能起火(160°C, 5min, 1mm)」危險區後，經精算出 16 組試驗的DOD設計方案，其品質指標 Dea 與 G 降低，Dea<0.7 未達及格標準。

建議只要再增加 1 個試驗次數，在受限設計空間內用 17 組試驗的設計品質皆可大幅提升 (Dea=0.73、D=0.76)，使達到及格曲面設計的標準。

但不是試驗次數增加，品質指標就一定越好！

主要原因：

1. 指標本質是「單位試驗效益」(Normalized Efficiency)

Dea與D的數學定義已除以試驗次數(N)，即計算每一組試驗所能貢獻的平均資訊量。當N從17至18，雖然絕對總資訊量可能微增，但因分母變大拉低了整體平均，所能提供的邊際資訊量反而降低。

N	16	17	18	19	20
Dea	0.63	0.73	0.66	0.65	0.84
D	0.68	0.76	0.70	0.70	0.85
A	3.72	3.67	3.90	3.87	3.82
G	0.45	0.45	0.45	0.45	0.45

2. 排除「禁區」破壞了設計空間的幾何對稱性

排除「長時間+高溫+超薄片」危險區後，使得原本規則的超立方體候選空間出現缺角與不規則邊界。在不規則空間中，特定次數(如N=17)剛好能讓演算法挑選出一組邊界點與中心點達到最佳幾何平衡。但當強迫次數增加到18或19時，演算法為滿足硬性指定的點數，被迫在空間內部或非最佳邊界上「補點」，這些額外的點破壞了原本 N=17時建立的高度正交平衡。

3. Dea/D與 A 指標的側重目標不同

Dea和 D 關注的是整體模型參數估計的廣義變方（即信心橢球體的體積，越大越好）。A 關注的是各參數估計值變方的平均值/總和（變方越小越好）。本例N=17 的 A 值優於N=18、19，顯示在 N=17 時的參數估計的平均不確定性反而最低。

4. 演算法的局部最佳搜尋

DOD演算法是在有限的候選池中搜尋極值。在受限空間內不同N值的起始幾何架構不同，演算法收斂到的局部最佳解品質也會有所起伏。

實務決策建議：N=17 是性價比最高且結構最緊湊的選擇。相較於N=16，只多做 1 組試驗，效率大幅跳升，且其表現超越了N=18、19。雖然 N=20 達到了最高的 Dea 和 D，但需要多付出 3 組試驗的成本代價。

範例 3：因子為非對稱變級 (變級數不等) – 無排除任何限制條件組合

假設三因子：X1 有 6 變級 (等距 - 10, 20, 30, 40, 50, 60)
X2 有 5 變級 (不等距 - 1, 3, 5, 10, 20)
X3 有 3 變級 (不等距 - 30, 100, 200)

本例3因子不等變級結構，指定生成共
13 組試驗條件組合的DOD設計方案。

Run	X1	X2	X3	PointType	X1_natural	X2_natural	X3_natural	StdOrder
1	-1	-1	-1	DOptimal	10	1	30	1
2	1	1	1	DOptimal	60	20	200	90
3	0.2	-0.0526	1	DOptimal	40	10	200	82
4	-1	1	-1	DOptimal	10	20	30	25
5	-1	-1	1	DOptimal	10	1	200	61
6	0.2	1	-0.1765	DOptimal	40	20	100	58
7	-1	1	1	DOptimal	10	20	200	85
8	1	1	-1	DOptimal	60	20	30	30
9	1	-1	1	DOptimal	60	1	200	66
10	1	-0.0526	-1	DOptimal	60	10	30	24
11	0.2	-1	-1	DOptimal	40	1	30	4
12	1	-1	-0.1765	DOptimal	60	1	100	36
13	-1	-0.0526	-0.1765	DOptimal	10	10	100	49

設計品質指標:

Dea	G	A	D
0.7810	0.8020	3.7832	0.4618

【結論】

此非對稱 (不等變級) 13 組試驗的DOD
方案同時兼有高 Dea 與高 G，具備極高
的統計說服力與預測可靠度，已達到高優
質曲面設計的標準。

RSM 設計方法差異比較概覽

特徵 (Feature)	FFD	CCD	BBD	DOD
核心技術 (Core Concept)	所有組合 (p^k)	全因子 + 軸點 + 中心點	邊緣中點 (三變級)	邊界點+內部點 (演算法挑選)
優點 (Pros)	簡單直觀，捕捉所有交感效應	預測力強，可旋轉性，適合二次模型	成本較低，避開極端條件 (Safe)	高度靈活，試驗點可自訂
缺點 (Cons)	試驗量指數增長，效率低	軸點可能超出操作範圍 (Unsafe)	不涵蓋角落，外推能力弱	倚賴模型和軟體，幾何不對稱
最佳應用 (Best Use)	初步篩選 (<5因子)	產品與製程的精確優化	資源有限，需避免極端條件	有禁區、預算有限、含類別變數、客製化

選擇設計時，需權衡「試驗成本」、「模型精確度」及「操作安全性」。

取得電腦規劃的最佳設計方案，後續才執行現地試驗，獲取反應值數據

匯出表格：將因子編碼值的設計方案表單 (CCD, BBD 或 DOD，且條件組合順序要隨機化)，新增因子自然值欄位，存成 Excel 檔，列印出來帶去實驗室、溫室或田間。



按表操課：根據因子自然值的條件組合，按照隨機化設計順序 (Run)，依次進行試驗。例如第 1 批次上機/第 1 盆/第 1 小區的試驗單位要用第 1 順序的條件組合，.....以此類推。



數據回填：在 Excel 檔內的反應變數欄位，把每個試驗單位得到的反應數據填進去 (Excel 檔可用原始名稱或另存新檔)。



重新載入分析：試驗全部做完後，把這份完整的 Excel 檔到 RSM 分析平台，執行 RSM 的建模分析！

若資料檔內有多個反應 (Y1, Y2, ...)，每個 Y 要個別進行 RSM。

Randomization (試驗執行順序隨機化) 的必要性

目的：透過打亂試驗執行順序，將「**非試驗因子**」造成的系統性誤差轉化為隨機誤差，防止可能的**時間效應**與**操作順序**干擾結果，確保試驗結果的獨立性與有效性。

特性	無隨機化 (順序執行)	隨機化 (Randomized)
執行邏輯	依序執行 (1, 2, 3, 4)	打亂順序 (3, 1, 4, 2)
環境影響	雜訊集中在特定參數 (產生偏差)	雜訊均攤給所有參數 (視為誤差)
試驗品質	不可靠，結果易被質疑	穩健，符合統計科學標準
儀器/暖機	暖機效應會導致數據漂移	暖機效應被隨機化抵銷

- **強烈建議！對於所有的實體試驗，永遠選擇「隨機化設計順序」。**
- 尤其有設定區集時，能確保軟體將區集 1 點位在區集 1 範圍內打亂，而不會亂跑到區集 2 去。
- 除非以下極端情況下可考慮不勾選：
 - ① 硬體限制極大：若改變一次試驗條件需要拆卸並重新組裝儀器（花費數小時），隨機化會導致試驗時間翻倍。此時可選擇「按順序」進行，但代價是必須更頻繁地執行「基準測試 (Check Standards)」來監控系統漂移。
 - ② 模擬試驗：若只是在電腦上跑虛擬模型，環境變數是固定的，隨機化就未必關鍵。

以 3 因子 CCD 試驗設計表為例

Run
隨機化設計順序
(提供現地依序執行試驗)

stdOrder
未隨機化設計順序
(系統背景產生)

Run	X1	X2	X3	PointType	X1_natural	X2_natural	X3_natural	StdOrder
1	0	0	-1.6818	Axial	150	4	0.31820717	16
2	0	0	0	Center	150	4	2	10
3	1	-1	1	Cube	160	3	3	6
4	-1	-1	1	Cube	140	3	3	5
5	-1.6818	0	0	Axial	133.182072	4	2	12
6	0	0	0	Center	150	4	2	9
7	0	-1.682	0	Axial	150	2.31820717	2	14
8	0	1.6818	0	Axial	150	5.68179283	2	15
9	1	1	-1	Cube	160	5	1	4
10	1	-1	-1	Cube	160	3	1	2
11	-1	1	1	Cube	140	5	3	7
12	0	0	1.68179	Axial	150	4	3.68179283	17
13	1	1	1	Cube	160	5	3	8
14	0	0	0	Center	150	4	2	11
15	-1	1	-1	Cube	140	5	1	3
16	1.6818	0	0	Axial	166.817928	4	2	13
17	-1	-1	-1	Cube	140	3	1	1

三、RSM最佳設計選擇：從農產品製程到田間操作優化

RSM不同設計的目的都是為了找出最佳配方或製程，如農產加工、農藥配方、微生物發酵、農機研發等。但因為幾何結構不同，在實務上面對不同的研發情境，各自有著不可替代的戰略地位。

範例

「健康精緻甘藷片」研發為例。目標是在脆度、營養留存與含油量之間取得完美平衡。

X_1 切片厚度



直接影響產品脆度與含油率。

X_2 低溫真空油炸溫度



影響甘藷天然色素（花青素/類胡蘿蔔素）的留存與色澤。

X_3 脫油機轉速



決定最終產品的含油量。

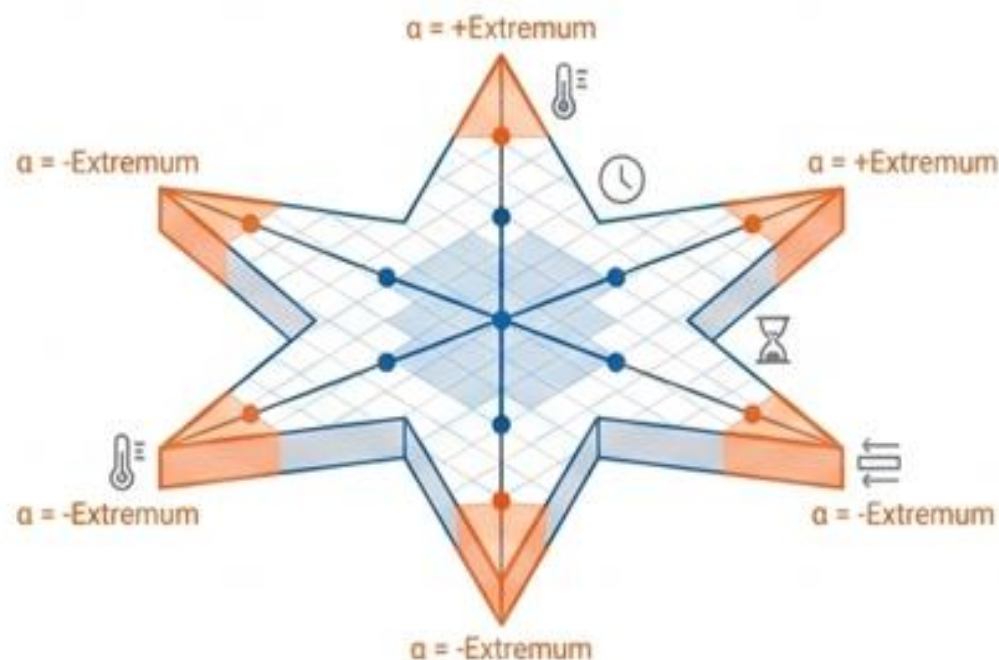
策略一：中心複合設計 (CCD) – 探索極限與大數據標準化

3 因子：5 種點位 ($-\alpha, -1, 0, +1, +\alpha$)

以上下限兩變級作為幾何結構的因子點($-1,1$)，另包含中心點(0)、延伸到常規範圍外之軸點($-\alpha, \alpha$)。

物理意義

若設定 110°C 為常規高溫，CCD 會要求測試更極端的 120°C ，藉此探索物理邊界。



優勢與適用情境

具備強大的外推能力與旋轉性。適合具備新型數位微調設備、且原料成本極低的大型工廠建立標準化模型。



潛在風險

極端邊角組合（如：最薄厚度 + 最高溫）極易導致甘藷片直接焦化報廢。☹️🔥🍌

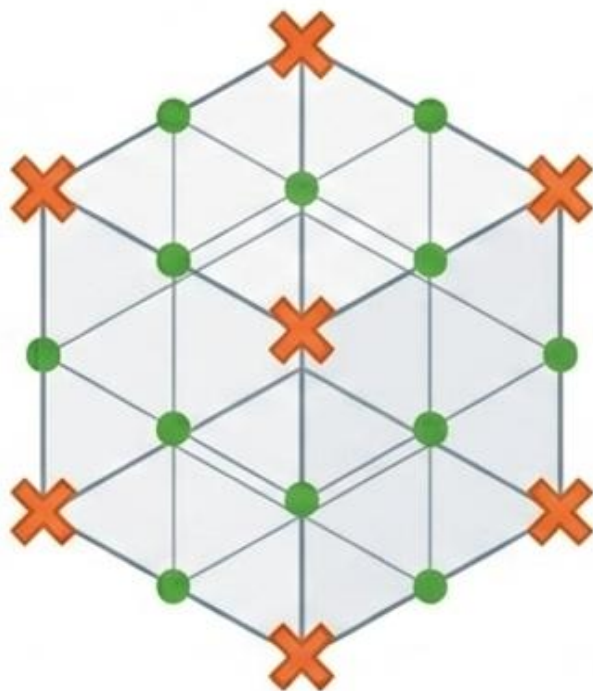
策略二：Box-Behnken 設計 (BBD) — 原料保護與安全性優先

3 因子：限 3 變級

僅需設定低、中、高三個基礎點位 (-1, 0, 1，例如厚度 1、2、3mm)。

幾何特性

完美避開了所有因子同時達到極值的「角落點」。



防護機制

保證不會出現毀滅性配方（如最薄 + 最高溫）。

適用情境

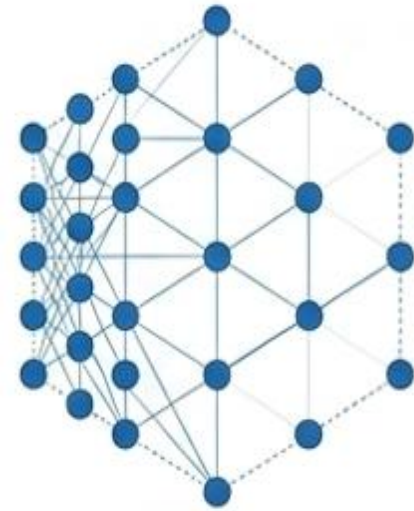
研發高單價原料（如紫心甘藷）時的唯一首選，確保珍貴的花青素不因極端高溫而全數報廢。且能相容僅有基礎檔位設定的舊型設備。



策略三：D-optimal Design (DOD)— 突破硬體限制與資源精準投放

非對稱變級設計、不規則空間佈點

- 允許不同因子擁有不同的測試階層。
核心因子 (X_1 厚度)：7 變級 (精細微調)
難調因子 (X_2 油炸溫度)：3 變級 (設備受限)
- 允許先經專業原因排除不合理或不經濟組合，再由軟體在自訂候選池中進行優選。
避開危險組合(如高溫加超薄片導致起火)



Asymmetry
High-Resolution

Asymmetry

適用情境

面對設備有明顯物理限制，且資源極度有限的情況。

極致效率

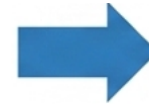
僅需 13~15 組試驗即可完成高精度模型研發。

Efficiency
Low-Resolution



研發決策矩陣：如何根據實務條件選擇最佳設計？

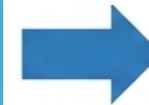
追求標準化製程大數據，且原料低廉



首選: CCD

(特徵：極端探索/ 3 因子 2 變級
形成 5 種點位)

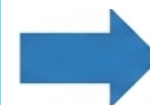
嚴禁樣品燒焦，原料極度昂貴



首選: BBD

(特徵：安全防護/ 3 因子 3 變級)

必須遷就難調設備，且需大幅節省次數



首選: DOD

(特徵：資源禁區/ 非對稱變級)

RSM試驗設計的選擇策略並非死板的數學題，而是取決於「原料單價」與「設備物理限制」的戰略性決策。



甘藷片厚度與油炸溫度

當RSM走入溫室與田間



肥料濃度、氣候逆境、田間無人機

- 農業試驗的變數比食品加工更脆弱、更難以控制。
- 活體生物的脆弱性、廣大田間的試驗成本、以及複合環境的複雜度，讓試驗設計的選擇等同於生死攸關的防線。
- 現代農業經常面臨衝突目標的兩難（例如：增加施肥與灌水能顯著提升產量，但同時會大幅增加甲烷等溫室氣體的排放），需要一個能尋找最佳黃金平衡點的客觀系統，提供精準農業決策。

農業實例一：植物組織培養配方優化 (CCD) — 突破邊界的「甜蜜點」探索



試驗目標 (Trial Setup)

尋找培植體不定芽誘導的最佳培養基配方。

3 因子

- 細胞分裂素(6-BA)濃度
- 生長素(NAA)濃度
- 蔗糖(碳源)濃度



科學邏輯 (Scientific Logic for CCD)

探尋極限與曲率

- 封閉系統高容錯：在高度受控的密閉無菌系統中進行，無須擔心極端組合導致大面積農損。
- 突破邊界：軸點設計允許研究人員大膽探索超出常規(-1,+1)的未知領域。
- 鎖定「甜蜜點」：精準捕捉植物激素間極其敏感的「非線性反應曲面」，找出完美的黃金比例。

農業案例二：複合環境逆境評估 (CCD) — 逼出作物的「生理崩潰點」

試驗目標

Trial Setup

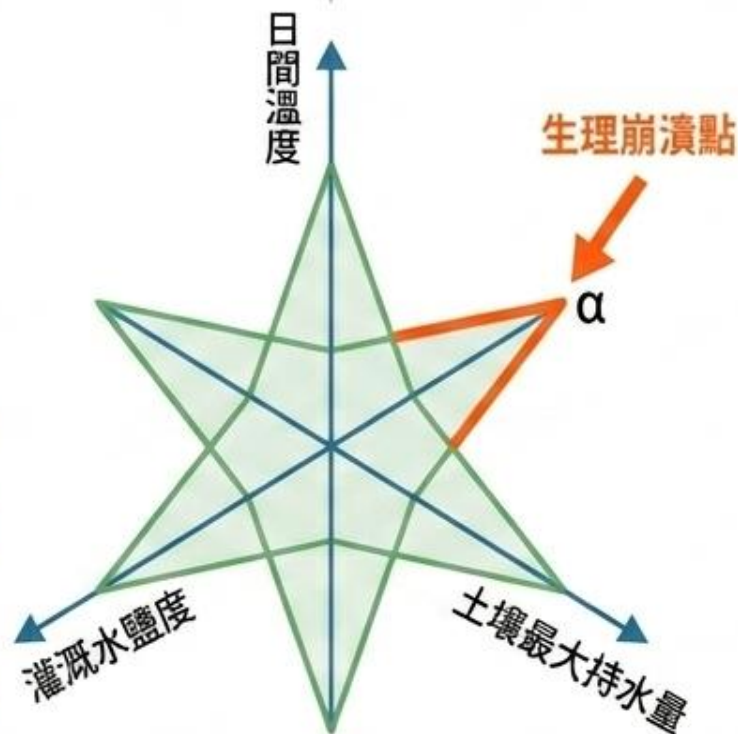


評估熱帶果樹面對
「高溫 x 鹽害 x 乾旱」
三重複合逆境的細胞
受損度與光合速率的
影響。



3因子 (5點位)

日間溫度、灌溉水鹽度、
土壤最大持水量。



科學邏輯

Scientific Logic for CCD

災難模擬數據



生態研究必須探測極端惡劣
的環境邊界。CCD 獨有的「
星號點 (α)」完美勝任此任
務。

揭露加乘危害



精準模擬如「高溫 + 乾旱」
導致植物氣孔關閉散熱失敗的
極端崩解狀態，為農業氣候
變遷調適計畫建立精確的預警
模型。

農業實例三：殺蟲劑農藥配方優化 (BBD) — 「安全第一」的防線

試驗目標

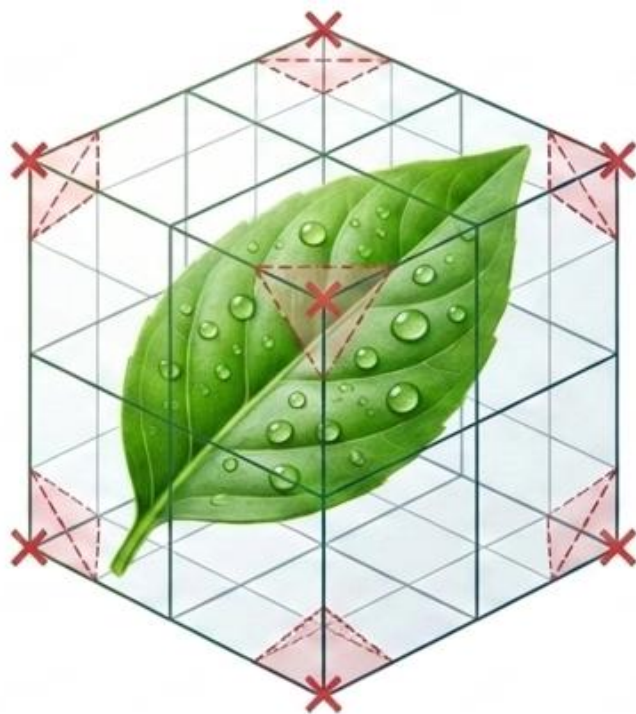
Trial Setup



開發新型環境友善殺蟲劑水乳配方，可兼具效果迅速、作物安全(無藥害)及配方穩定。

3 因子 (3 變級)

- 殺蟲有效成分濃度
- 界面活化劑(乳化劑)比例
- 滲透助劑濃度



科學邏輯

Scientific Logic for BBD



安全第一，避免藥害

- 截角避險幾何：BBD的幾何特性是「不包含立方體頂點」，即避開所有極端角落。
- 防止毀滅性疊加：若主成分、乳化劑及滲透劑皆為極高濃度 (+1,+1,+1)，將導致嚴重葉燒藥害，使數據歸零失效。
- 高效且安全：完美避開危險區域，僅需 15 組試驗即可精確解析助劑間的協同與拮抗作用。

農業實例四：生物防治配方優化 (BBD) — 「安全第一」的防線

試驗目標

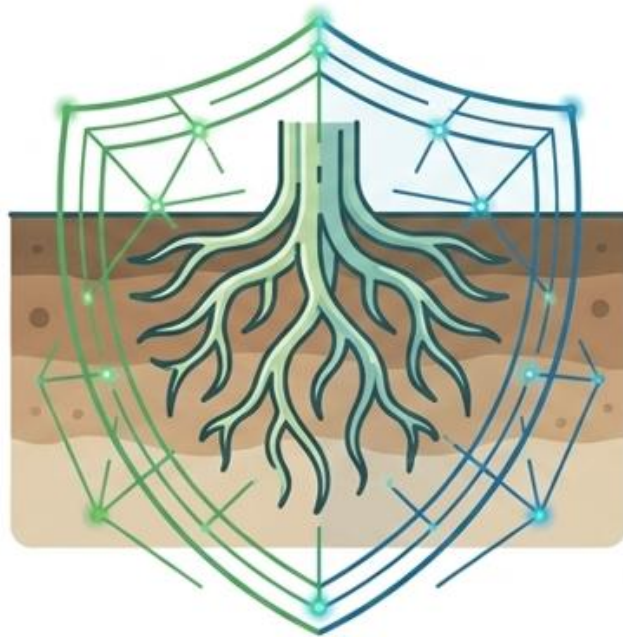
Trial Setup



尋找枯草芽孢桿菌的最佳使用策略，能兼顧防治效果與植株發育。

3 因子 (3 變級)

- 生物防治菌劑濃度
- 有機液肥濃度
- 土壤含水量



科學邏輯

Scientific Logic for BBD

防止燒根死亡



猶如甘藷片避開最高溫焦化，BBD 避開了所有濃度同時達極高值的危險角落，避免植株因肥料或菌劑過高而死亡（反應值歸零會導致模型徹底失敗）。

高效率溫室分析



僅需 15 組溫室試驗，即可精準分析菌肥間的協同效應與拮抗效應。

農業實例五：溫室微氣候環控優化(DOD)—突破病害與物理限制的精準選點



試驗目標 Trial Setup

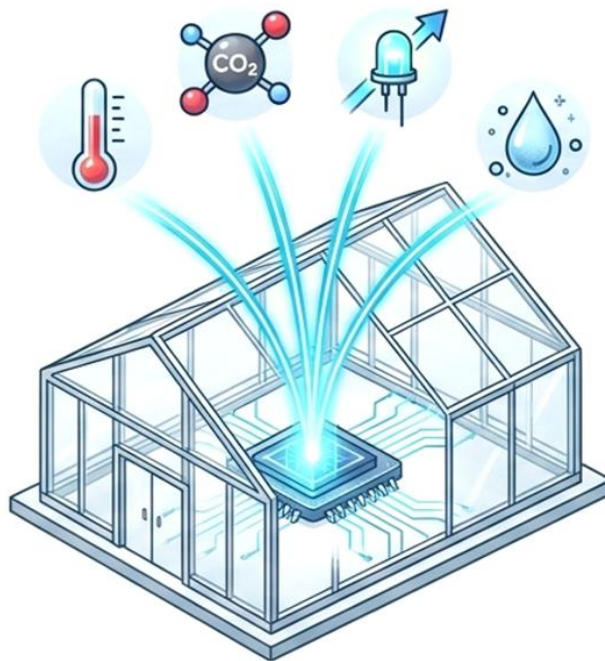
找到作物光合作用效率與能耗比的最佳微氣候參數組合。

技術挑戰：傳統CCD/BBD在溫室內極易踩中高風險病害禁區，幾乎無法執行。

3 因子

針對溫室微氣候進行高效參數篩選：

- 日溫: 22~30°C
- 相對濕度: 60~85%
- CO₂ 濃度: 400~1000ppm



科學邏輯

Scientific Logic for DOD

剔除不規則的危險空間，對抗現實挑戰

- 病害爆發禁區(物理絕對不可測)：高溫(>28°C)+高濕(>80%)極易結露，引發灰黴病或疫病。
- 設備極限禁區(物理無法達成)：高溫(>30°C)+低濕(60%)需耗費鉅量水電，水簾與微霧系統會超載。
- 試驗次數受限：預算與生長週期僅夠執行14次調控(每次切換需3天適應期)。

優化結果呈現

DOD從剔除禁區後的不規則可行空間中精算配置出14個關鍵點位，成功避開危險區，精確解算出最佳環控參數。

農業實例六：智慧化田間管理(DOD) — 突破傳統試驗限制的精算設計

核心困境與目標：面對「7種氮肥用量 x 3種無人機飛噴率」的非對稱組合與農藝禁區（如高氮高頻易引發倒伏），且需兼顧產量、米質（整粒米率保底<75%）與田間作業成本。



優化結果呈現

排除不合理禁區後，DOD精算選出12~14個關鍵點位，用最少的田間小區，精準抓出施氮量與飛噴次數對水稻產量、米質與田間作業成本的最大槓桿邊際效應。

四、當RSM走入溫室與田間：自然雜訊的挑戰與策略

標準的反應曲面法假設環境是完美的，但真實的農業研究充滿自然雜訊。

植物是有生命的變數

個體變異



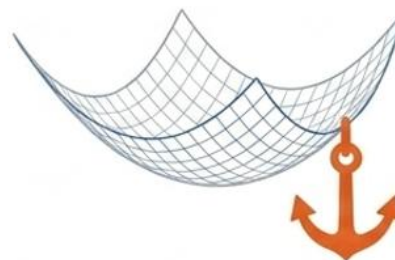
植物個體間存在無法避免的微小差異。

數據崩塌



在 CCD 等設計中，外圍點若僅種植「一盆」，遭遇病蟲害或倒伏將導致缺失值，整個模型無法求解。

模型失真



若單盆數據恰好是極端值，會強行將二次曲面「拉歪」，導致最佳解完全偏離現實。

時間限制



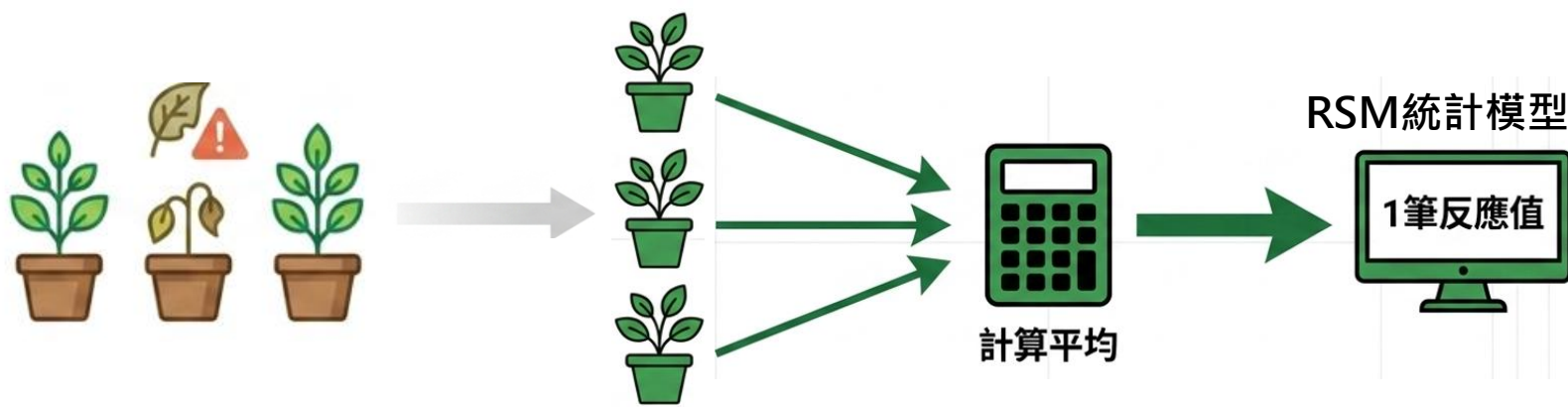
溫室空間與人力往往不足，無法在「同一天」完成所有的接種或種植批次。

溫室盆栽 RSM試驗：① 對抗植物個體差異與死苗風險

核心挑戰：植物具備基因差異，單一盆栽的數據極不穩定，且實驗過程中存在死苗風險。

操作心法 (多盆平均法)：

- 擴充盆數。每一試驗條件組合 (包含軸點與中心點) 都必須種植 3 盆，絕不能倚賴單一盆栽。
- 計算這 3 盆的平均值作為 1 筆反應值，執行 RSM 建模。

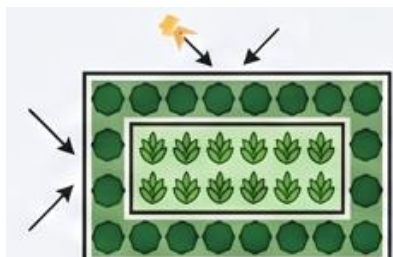


絕對禁忌：偽重複
錯誤做法：
在軟體中直接輸入3筆獨立數據。



空間微氣候與位置的環境防禦。

採用區集化(Blocking)設計或定期隨機輪動盆栽位置，抵銷溫室內溫溼度或光照梯度。



設置防護盆栽，減少邊際效應干擾。

在試驗區最外圍設置1~2圈防護盆栽(Buffer plants)，屏蔽外界光照與氣流衝擊。



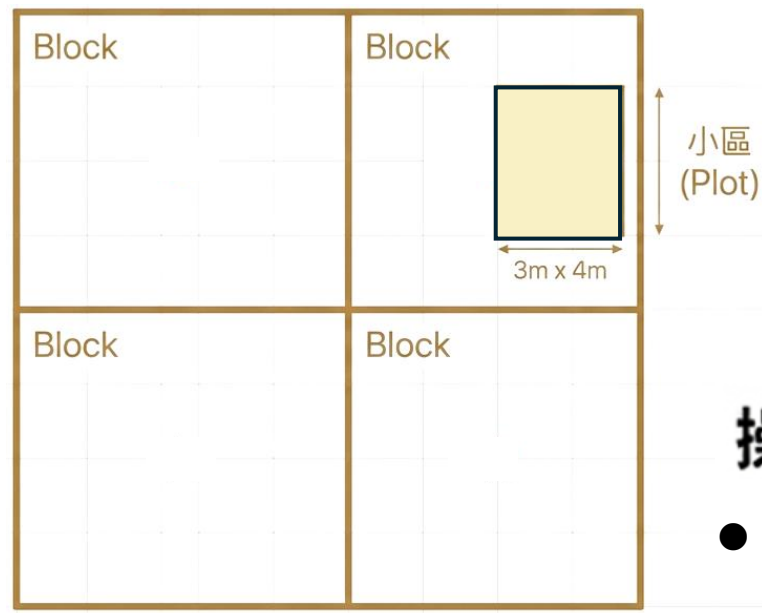
盆器容積與根系限制的優化。

嚴格動態監測介質EC值，並合理限縮水平邊界，避免作物因盆器限制提早老化。

田間 RSM試驗：① 克服大規模的環境與空間雜訊 - 區集化機制

核心挑戰：田間環境存在無法消除的地力梯度、日照差異與空間變異。

(空間區集化與實體小區)：

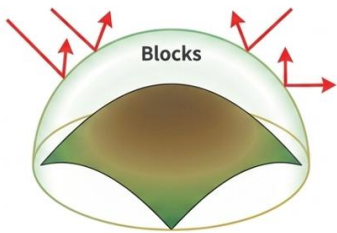


RSM的空間區集概念，不完全等同於一般試驗設計(RCBD)的區集

RSM	RCBD
盡量不增加試驗組前提下，將整體試驗組分批在不同區集內進行。	區集數相當於重複次數。每一區集都涵蓋所有試驗組，因此若設定2區集，試驗組會翻倍。無中心點。

操作心法

- 「小區」代替「單盆」：分配到區集內的試驗組各對應一個小區(內含數十株作物)。取小區的整體平均值做為單一反應值。
- 若試驗設計是CCD或BBD：須符合正交區集化，且每一區集內都要隨機配置足夠且等量的中心點，以準確捕捉該田區的純粹隨機誤差。



正交區集化是 RSM 試驗設計的一種關鍵設計屬性

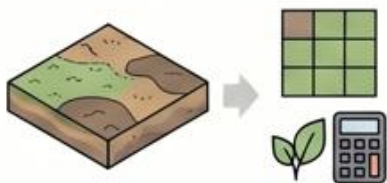
正交區集化之核心目的：

將整體試驗組合切割成數個獨立的區集，以排除非干擾不可的背景變數（如不同測試日期、機器批次、試場地塊），同時確保「區集效應」與「回歸模型參數（主效應、二次項與交感項）」之間完全沒有相關性（無多重共線性）。

當試驗設計滿足正交區集化時，計算出的 RSM 回歸係數（如最佳溫度、最佳施肥量）不會因為模型中是否納入區集變數而發生任何改變。

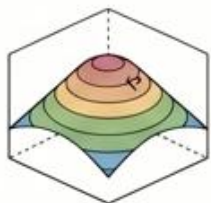
正交區集化的兩個核心數學條件：

- ① 區集內因子編碼值總和為零（區集中心不偏移）。
- ② 因子的區集平方和比例等於區集內點數比例（因子編碼值的幾何分布要均勻）。



克服土壤異質性，排除背景噪音。

縮小試驗小區面積以確保地形和土肥均一，並在分析時導入初始肥力作為共變數，進行共變方分析 (ANCOVA) 校正。



填補機械精度鴻溝，彈性選取模型。

捨棄需精確分數變級的 CCD，改採 3 變級的 BBD 或適合非對稱操作精度的 DOD 設計。



過濾氣候雜訊，導入統計策略。

採用時間區集化(Time Blocking) 或利用氣象數據動態調整灌溉配額，補償降雨造成的誤差。

資源限制的進階解法：時間區集化 (Time Blocking)

若人力或設備無法一次性完成溫室或田間試驗，必須引入「時間維度」作為區集。



- 將總試驗量按比例拆分成 2 或 3 個時間區塊。
- 建模時將「Block」作為獨立項放入公式。
- 軟體會自動扣除時間批次間的环境差異 (如第一週下雨、第二週乾旱的影響)。

時間區集化的正確拆分法

禁忌操作 - 錯誤



Time Block 1

Time Block 2

Time Block 3

只將中心點重複拆分在不同週進行。會混雜「時間效應」與「純誤差」，導致模型無法通過顯著性檢驗。

正確做法 - 標準

以CCD為例



Time Block 1

Time Block 2

Time Block 3

將全體處理（因子點、軸點、中心點）按比例拆分。核心原則：每一個時間批次 (Block) 內部，都必須配有獨立的中心點重複。

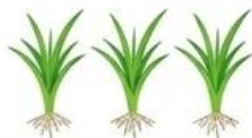
時間區集化實戰：分批完成的水稻 CCD 試驗

(假設設計空間指定 3 個中心點)

案例情境：進行水稻抗病性優化，但溫室接種室空間僅能容納 50% 的總處理量。

第一週 (Block 1)

全因子 + 3 個中心點



第二週 (Block 2)

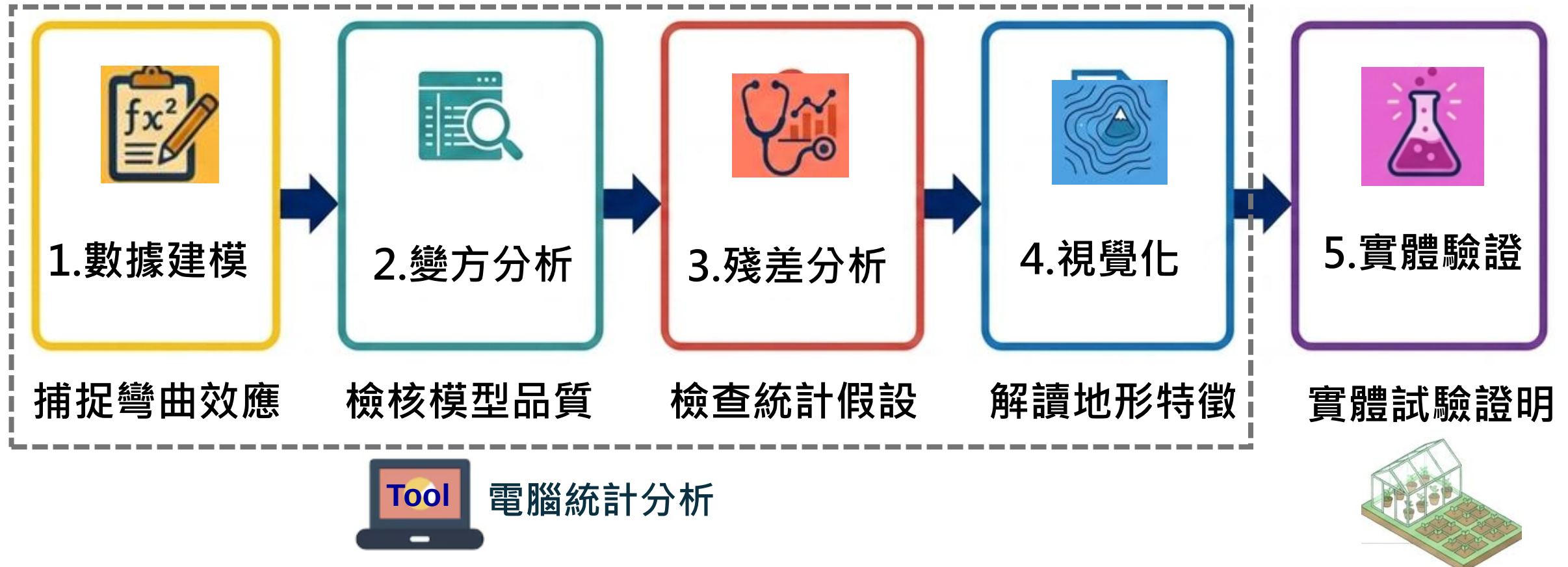
軸點 + 3 個中心點



統計優勢：建模時將「Block (週別)」作為獨立項放入公式。軟體將自動扣除這兩週之間的環境差異（例如溫差引起的生長波動），確保最終模型的精準度不受分批影響。

五、反應曲面模型：擬合、診斷及驗證

統計建模主藍圖：RSM流程



步驟 1

核心數學建模：解構多元二次多項式回歸

Y 與 β_0

Y 為預測反應值 (Predicted Response)； β_0 為截距常數項。

二次效應 (Quadratic Effect)

RSM的核心。塑造反應面「彎曲」與產生極值的關鍵引擎。

$$Y = \beta_0 + \sum \beta_i X_i + \sum \beta_{ii} X_i^2 + \sum \beta_{ij} X_i X_j + \epsilon$$

(線性效應)

主效應 (Linear Effect)

決定基礎平面的傾斜度與變數的基本趨勢。

交感效應 (Interaction Effect)

揭示因子間的協同 (Synergistic) 或拮抗 (Antagonistic) 效應。

技術邊界 — 為何捨棄三階交互作用 ($x_1x_2x_3$)？

效應稀疏原則 (Sparsity of Effects)

系統變異主要由主效應與低階項主導。三階以上交互作用在現實物理系統中極少發生，統計上通常被視為無意義的雜訊。

泰勒展開式的二階近似 (Taylor Approximation)

二階多項式已具備足夠的幾何彈性來描繪斜率、曲率與扭曲。對於尋找局部區域的最佳駐點，二階近似在工程上已十分足夠。

避免過度配適 (Overfitting)

強行納入三階項會消耗多餘的自由度去估算係數。雖可能完美貼合觀測點，卻會導致整體的預測能力與尋找真實最佳點的準確度大幅下降。

實驗設計矩陣的先天限制 (Matrix Limitations)

主流 RSM 設計 (如 CCD 或 BBD) 其空間點位配置在數學上是專為配適「二階模型」量身打造，先天無法獨立且精確地估計三階交互作用項。

- RSM 的強度在於用精簡的二階模型捕捉非線性的曲率趨勢。即便因子增加，建模邏輯依然守在二階，若系統反應極度複雜，則通常是透過限縮因子範圍或增加中心點重複來提升模型的精度，而非提高模型的階數。
- 當因子數較多(如 > 5 個)，實務上會採兩階段「篩選與優化」：先用 PB 設計與 Daniel 圖預前篩選，再針對這少數關鍵因子進行二階 RSM 設計與建模。

步驟 2

變方分析 (ANOVA)：模型品質的「入學考試」

指標名稱	通過標準	實質意義
模型顯著性	<0.05	代表模型具有統計意義
配適檢定(Lack of Fit) P值	>0.05	代表模型擬合良好，沒有遺漏重要的非線性因素
決定係數(R ² 系列)	預測R ² 與校正R ² 兩者越接近 1 (最好>0.8) 且差距越小(建議<0.2)	避免模型「過度擬合」，確保真實預測力
充分精確度【註】 (Adequate Precision)	>4	「訊號雜訊比」良好，不受雜訊干擾

【註】 此為工業和工程專用的Design-Expert 軟體之「獨家標誌性」指標；其他軟體如BlueSky不會出現。若沒有 Adequate Precision，可以使用「Lack of Fit 和 決定係數」的標準組合來嚴格為模型品質把關。

$$\text{Adequate Precision} = \frac{\max(\hat{Y}) - \min(\hat{Y})}{\sqrt{\bar{V}(\hat{Y})}} \quad (\hat{Y} \text{ 為 } Y \text{ 預測值, } \bar{V} \text{ 為 平均變方})$$

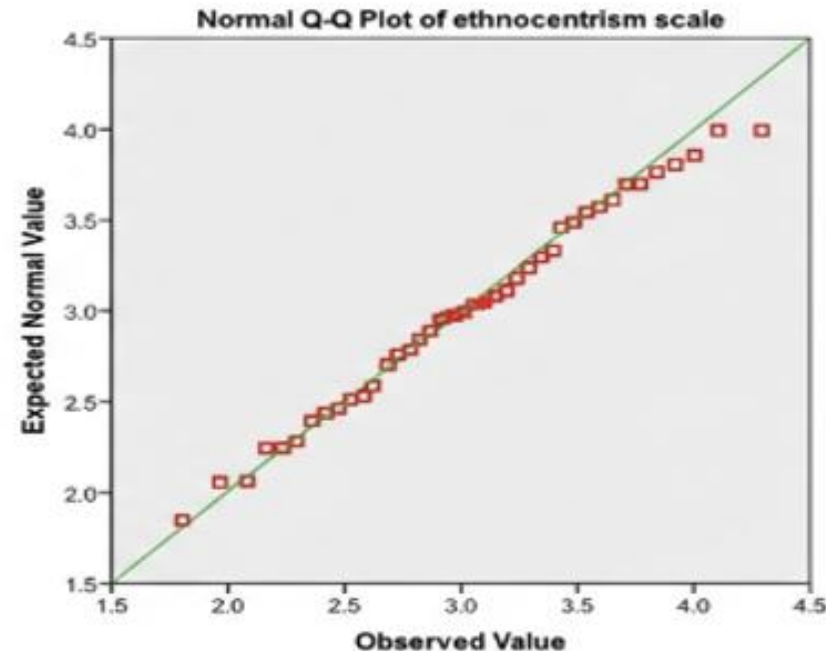
步驟 3

殘差分析：常態性與變方同質性 (確認未有系統誤差干擾)

① 常態性

Probability plot (機率圖,簡稱Q-Q圖)

- 資料點應緊貼對角直線，符合常態。
- 若有兩端偏離屬正常(小樣本尾端自然抽樣變異)，整體仍符合常態分布假設。
- **最常用且有效的工具，適於任何假設分布**，但倚賴研究者的主觀視覺判斷。



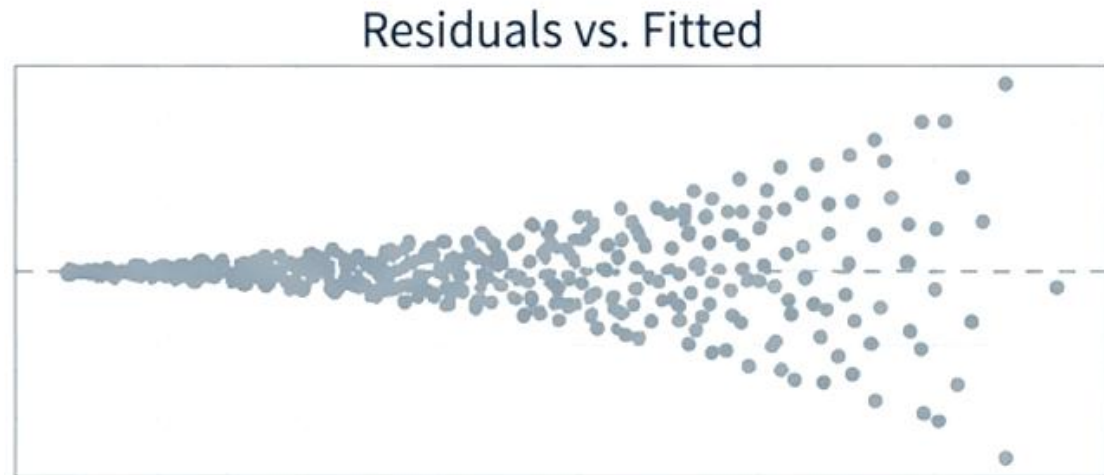
※ CCD的因子空間點位配置本身即非常態，直接要求原始數據(Y)呈常態並不合理。
常態分布的嚴格假設是針對模型的殘差(Residuals)。

- 常態檢定統計量容易受樣本大小影響，建議優先看圖、再檢查統計量。
- 直方圖適合看整體形狀，但不易看出殘差有輕微偏態、尾端過厚、少數極端值等問題，而 Q-Q 圖比較敏感而會顯示兩端明顯偏離。

② 變方同質性

殘差對預測值圖 (Residual vs Fitted value)

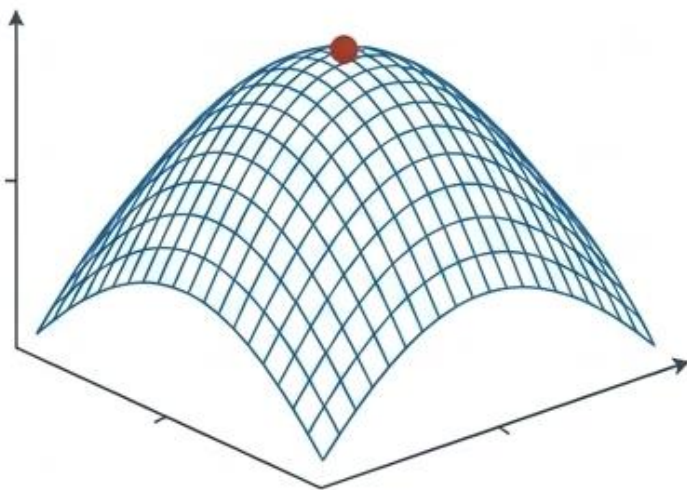
- 點陣應隨機、均勻散佈於 Y 軸殘差 = 0 兩側，無特定形狀，代表符合變方同質性與線性假設。
- 若呈開口向右的漏斗/喇叭形，代表變方隨平均值放大，需對 Y 進行資料轉換。



變方同質性檢定統計量容易受樣本大小影響，建議以圖為主、統計量為輔。

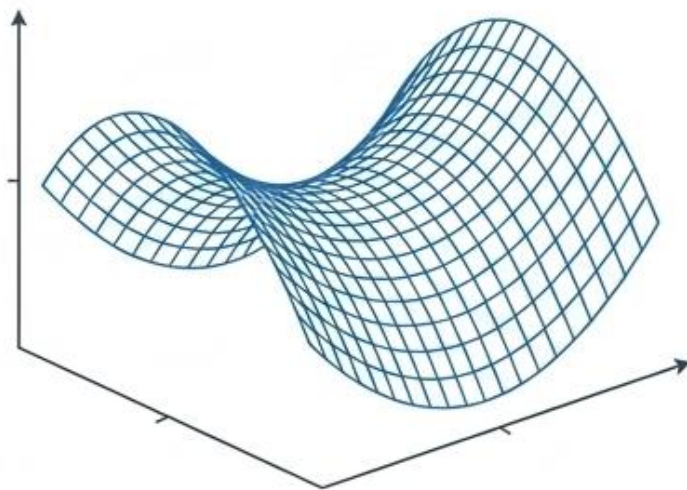
步驟 4

視覺化：① 3D反應曲面的地形解碼



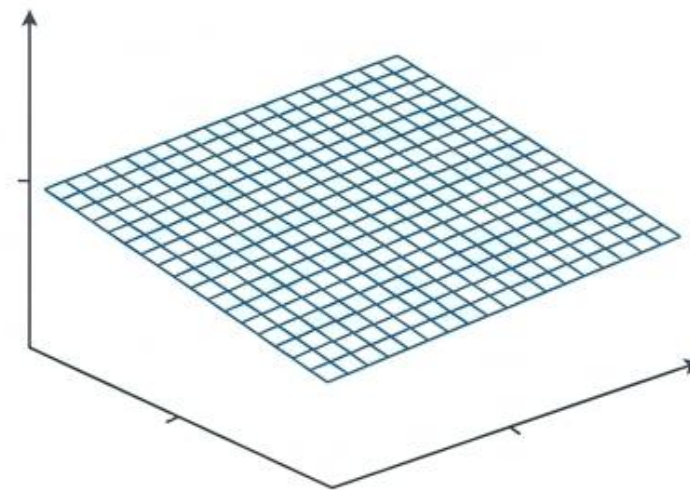
峰值/谷值 (Peak/Valley)

明確極值。表示在此試驗設計範圍內，存在明確的最佳化條件。系統已鎖定目標區域。



馬鞍面 (Saddle Point)

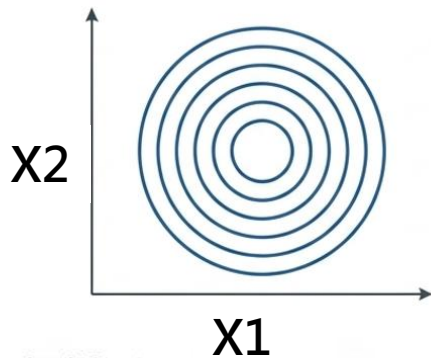
Minimax 狀態。無單一極值。需進行脊線分析 (Ridge Analysis) 或重新評估實驗變數範圍。



平緩斜面 (Sloping Plane)

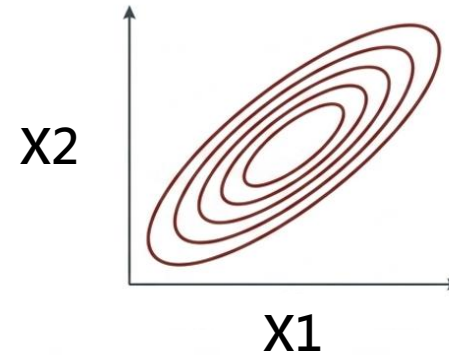
缺乏彎曲效應。表示目前的試驗設計範圍可能偏離了真正最佳化區域，需沿梯度方向移動 (Path of Steepest Ascent)。

視覺化：② 透過降維的 2D等高線判讀交感效應



圓形等高線 (Circular Contours)

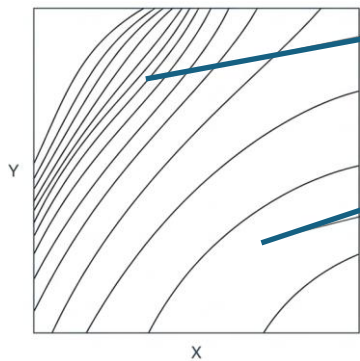
變數之間具備高度獨立性。**交感效應微弱**或不顯著 ($\beta_{ij} \approx 0$)。單一因子的改變不高度依賴另一因子。



橢圓形等高線 (Elliptical Contours)

長短軸差異越大，變數間的**交感效應越強**。沿著主軸方向的微小變化，會對總體反應值產生劇烈影響。

梯度與穩定性：等高線密度對操作寬容度的影響



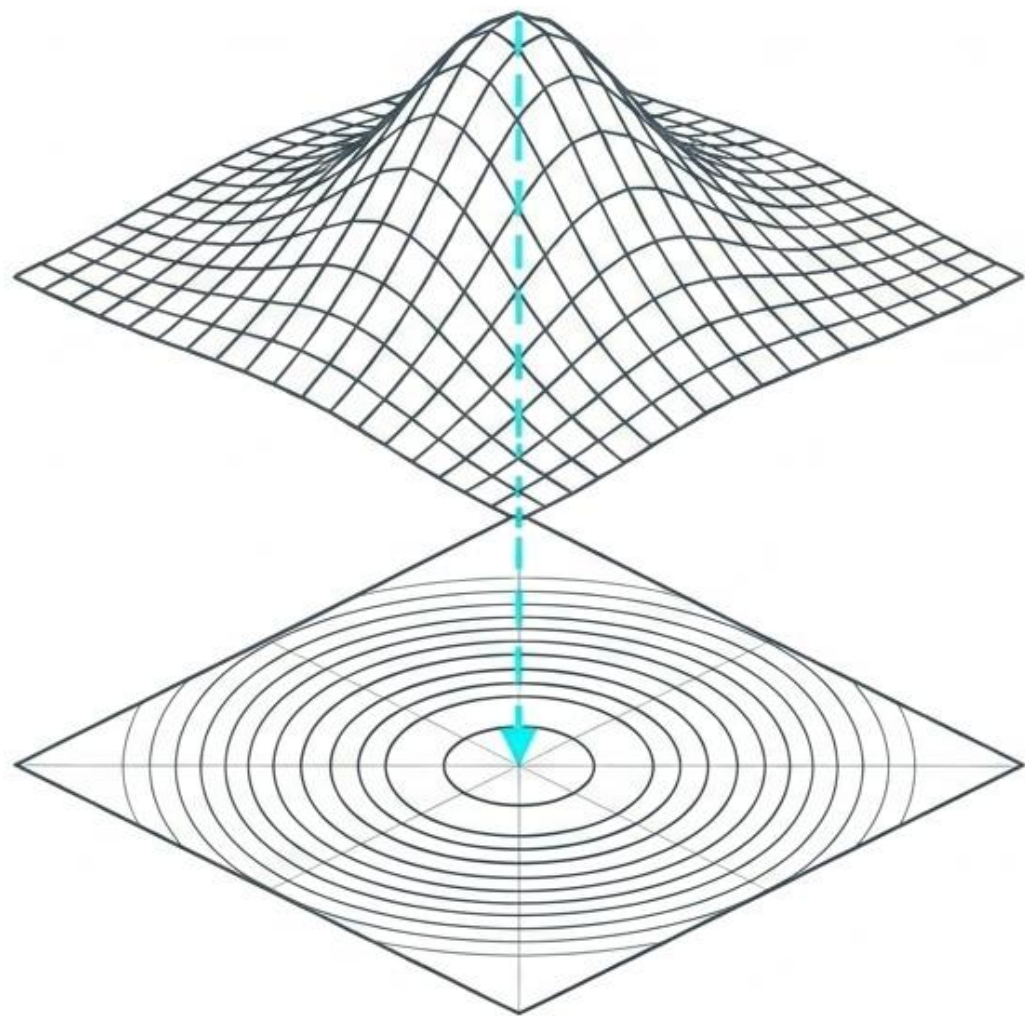
密集區 (高敏感度)

意義：反應面的坡度極陡，因子微小變動將導致反應值劇烈變化。
實務應用：需更精準控制參數。應盡量避免將量產操作點設定於此，以免良率劇烈波動。

稀疏區 (高穩定性)

意義：反應面的坡度平緩，因子變動對結果影響甚微。
實務應用：理想的生產寬容區間。將量產參數設定於此，可大幅吸收操作設備誤差，確保高穩健性。

巨觀與微觀的協同：2D/3D 空間的垂直映射



3D 曲面：掌握巨觀趨勢

提供直觀的立體視覺，快速掃視全域環境。第一時間辨識系統屬於峰、谷或馬鞍，決定優化的大方向，但難以憑肉眼直接讀取精確數值。

2D 等高線：鎖定微觀精度

提供精準的 XY 軸投影，是工程師的「座標地圖」。解析複雜的交互作用，並直接提取達到極值的確切參數座標。

結論

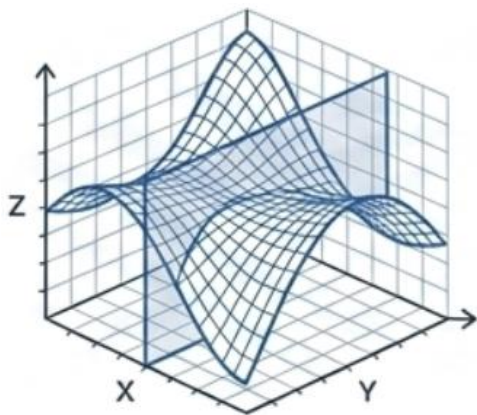
3D 定位目標，2D 給予座標。兩者構成無縫的分析矩陣，缺一不可。

步驟 5

實體驗證：科學實證的最後一哩路

絕對不要直接拿軟體預測值當作最終結果！

RSM優化
(Optimization)



針對關鍵因子套用CCD、BBD或DOD試驗設計。建構二次多項式模型，繪製曲面尋找因子最佳條件組合配方。

實體驗證
(Validation)



在模型預測的「最佳數學條件」下，進行實際試驗。以最少試驗次數突破傳統試錯法(Trial-and-Error)瓶頸。

RSM 建模後的實體驗證關鍵步驟

階段一：準備工作



- **多樣化驗證點選取**：需涵蓋**預測最佳點**（測試極值區間的準確性）、**非中心點**（測試設計空間內一般操作區域的擬合度）、**邊界點**（測試模型在試驗設計邊界依然有效），以確認模型泛化能力，避免邊界外產生不合理預測。
- **試驗環境標準化**：確保驗證時的原始材料、儀器狀態和環境條件，與建模時完全一致，以排除外部干擾，確保重現性。

階段二：執行試驗



- **執行多次重複實驗**：每一組驗證條件**重複 3~5 次**，以證明模型的統計穩定性。
- **詳實記錄變異來源**：詳細記錄過程中的環境波動或材料差異，作為評估實測值落點的依據。

階段三：統計比對與決策



- **95% 預測區間(PI)判斷**：【最嚴格標準】試驗實測平均值必須落在模型的預測區間內。若落在區間外，代表環境中有模型未能捕捉的重大干擾，或模型存在過度擬合 (overfitting)。
- **相對誤差評估**：【異常診斷】計算誤差是否在接受範圍，若試驗持續偏高或偏低，需檢查是否遺漏重要高階交互項，或試驗產生系統性偏移(如儀器老化、藥劑效價改變等)。

$$(\text{Relative Error} = \left| \frac{Y_{\text{obs}} - \hat{Y}}{\hat{Y}} \right| \times 100\%)$$

(Y_{obs} 為 Y 實測平均值， $\hat{Y}$ 為 Y 預測值)

農業 RSM 實體驗證：正確進行至少 3 次獨立重複的關鍵

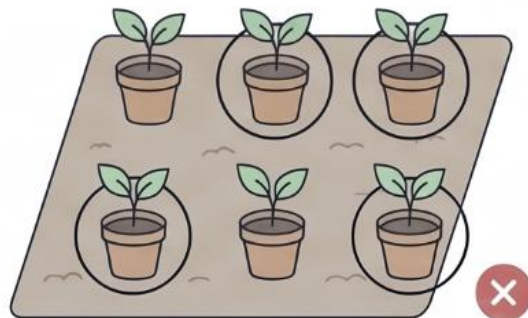
在農業與生物試驗中，變異主要來自「環境與空間」。正確的RSM驗證應以「空間上的獨立重複」取代工業製程常見的「時間上的重複」，以消除氣候與空間的干擾，確保統計數據的科學性。

真重複 (n=3)



使用 3 個獨立的盆栽或田間小區，分別獨立接受最佳化配方處理。

假性重複 (n=1)



僅在1個小區施加配方，收成時隨機選 3 株測量，這僅算是樣本。



空間重複優於時間重複

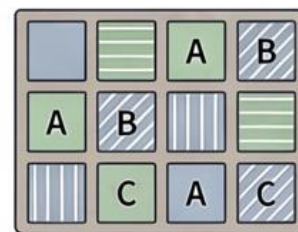
同一時段利用獨立空間單位同步進行，可消除氣候劇烈帶來的干擾。

實作兩大鐵則：確保統計獨立性



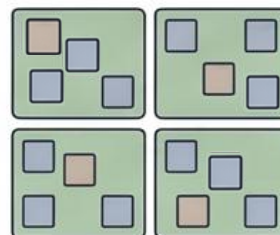
獨立施作原則

每一重複單位的藥劑需獨立秤重與噴灑，不可合併處理，以確保為獨立事件。



空間隨機分佈

樣本應隨機打散或利用區集設計，抵銷光照、通風或土壤肥力帶來的誤差。



隨機完全區集設計

將田區分為不同區塊，各放置一個重複小區，以確保數據具備統計說服力。

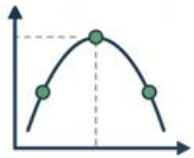
RSM建模與驗證之實例示範：蝴蝶蘭組培芽體誘導配方優化 (上)

試驗目標：尋找芽體誘導最佳的BA與NAA激素濃度組合。

試驗設計：BA範圍 0.5 - 2.5 mg/L、NAA範圍 0.1 - 0.9 mg/L，選擇 CCD。

執行試驗：完成 13 個處理組合的組織培養 (處理 4 週後秤重計算增殖倍率)。

數據分析：進行 RSM 建模與診斷，最後進行實體驗證。



建立模型：捕捉生長的彎曲效應

擬合二次多項式模型，精確定位激素濃度與芽體生長之間的最佳彎曲點。

$$Y = 5.32 + 0.31 X_1 + 0.14 X_2 - 0.11 X_1 X_2 - 0.44 X_1^2 - 0.58 X_2^2 \quad (\text{式中 } X_1: \text{NB}, X_2: \text{NAA})$$



$P < 0.05$
 $P > 0.05$

品質檢核：通過模型「入學考試」

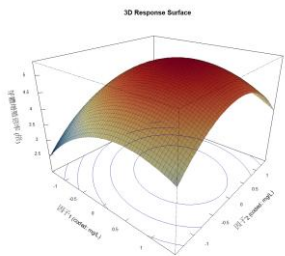
- 模型極顯著($P < 0.01$)且缺適檢定不顯著($P > 0.05$)，代表模型可用。
- 交感效應項($X_1 X_2$)不顯著($P > 0.05$)，代表BA和NAA在此區間主要是各自獨立發揮彎曲效應，協同效應不強。
- 預測 R^2 與校正 R^2 皆 > 0.9 且差距 < 0.2 ，代表模型預測力良好。



殘差分析：確認未有系統誤差干擾

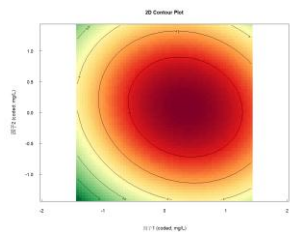
- 殘差的常態檢定P值不顯著且Q-Q圖呈現出符合常態性之統計假設。
- 殘差對預測值圖顯示符合變方同質性假設。

RSM建模與驗證之實例示範：蝴蝶蘭組培芽體誘導配方優化 (下)



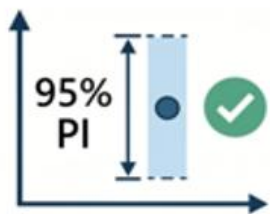
視覺定位：① 3D反應曲面圖辨識黃金配比

3D反應曲面圖呈現明顯的「頂峰型」地形，鎖定使芽體誘導數最大化的預測最佳組合為BA=1.84mg/L、NAA=0.54 mg/L。此時預測的增殖倍率最高點=5.38倍。



視覺定位：② 2D等高線圖辨識交互作用

2D等高線圖呈現偏向圓形的微橢圓形，呼應了ANOVA交感效應不顯著的結果，代表固定NAA時改變BA帶來的增殖率變化趨勢，與在其他NAA變級下差不多。



最終驗證：95% 預測區間判定

回到實驗室以 BA=1.84mg/L、NAA=0.54 mg/L 進行 4 次獨立重複接種後，實際產生的芽體平均增殖倍率=5.29，精準落在95% PI (4.90, 5.85) 內，代表模型預測成功且具高度再現性。



結論發表：該蝴蝶蘭組織培養優化模型完全成立。未來量產或發表論文，皆可正式宣布「6-BA 1.84 mg/L 與 NAA 0.54 mg/L 為該品種擬菌絲體(PLBs)增殖之最佳配方」。

實體驗證失敗的常見原因與對策



「驗證標準：如何定義模型『失真』？」

95% PI (預測區間)



實測平均值落於 95% PI 之外

這代表數學模型無法準確預測現實結果，未通過品質驗收。

品質驗收的指標意義

透過 PI 區間測試，才能確保學術立論穩健與產業量產的穩定。

「驗證失敗的三大原因與對策」



原因一：環境或材料發生漂移

驗證時的溫度、菌株、原物料批次與建模時不同。



原因二：模型過度擬合

建模為追求漂亮 R^2 而勉強擬合複雜模型，導致雜訊過多。請檢查建模的校正 R^2 與預測 R^2 的差值是否 >0.2 。



濕度/水分

原因三：未受控的干擾變數影響

有某些重要的環境變數（如濕度、水分管理等）未列入建模因子，卻在驗證時造成劇烈影響。

六、農業RSM多反應最佳化策略：滿意度函數應用

農業的現代兩難：餵飽世界 vs. 保護地球

追求高產量
追求高品質
.....

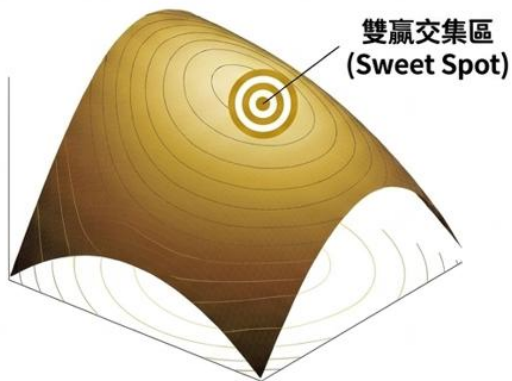


減少碳排
降低投入
.....

核心挑戰：不同單位、相反的目標，我們無法直接相加比較。需要透過一個「多反應最佳化(Multi-response Optimization)」的客觀決策系統，來尋找「**黃金平衡點**」。



強制將不同維度與方向的數值，統一轉換為 0 到 1 的標準化決策分數。



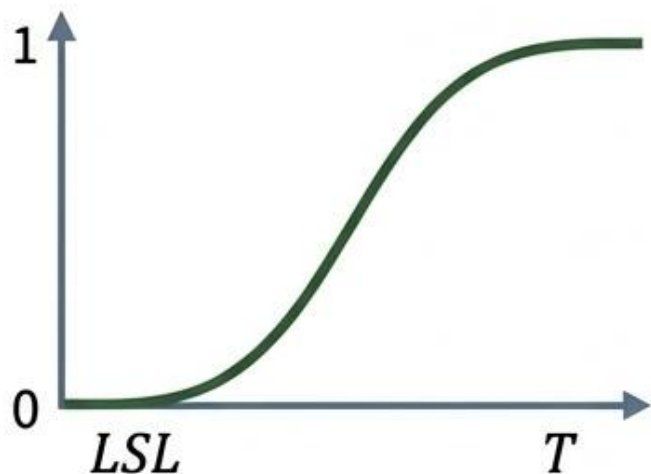
RSM多反應最佳化的標準作業流程： 五步拆解

滿意度函數設定與計算



滿意度函數如何設定？(1) 目標方向的選擇

望大 (Larger-the-better)

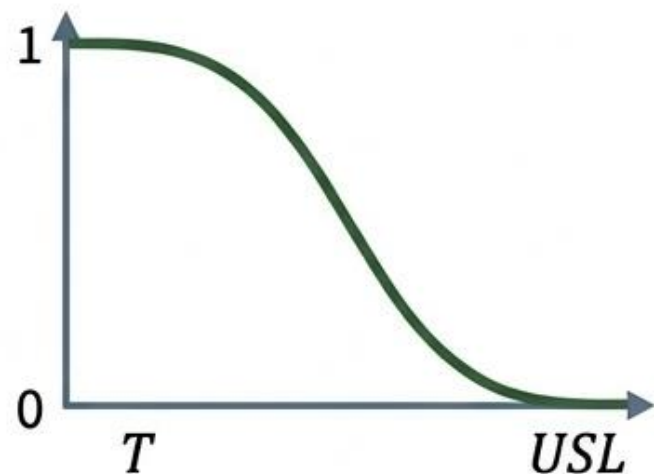


範例：產量

設定：下限 (LSL) 與目標值 (T)

規則：低於 LSL 時 $d = 0$ ；達到 T 時 $d = 1$ 。曲線平滑上升。

望小 (Smaller-the-better)

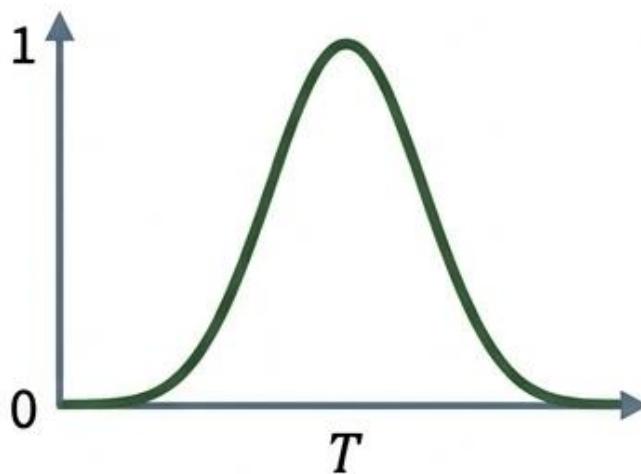


範例：碳排

設定：上限 (USL) 與目標值 (T)

規則：高於 USL 時 $d = 0$ ；低於 T 時 $d = 1$ 。曲線反向下降。

望目 (Nominal-the-best)



範例：稻穀含水率

設定：給定目標值與容許上下界

規則：越接近目標值，分數越接近 1。呈山峰狀曲線。

滿意度函數如何設定？(2) 合成整體滿意度

權重 w_i ：重要度權重。數值越大，該指標對總解的影響力越強。

$$D = (d_1^{w_1} \times d_2^{w_2} \times \cdots \times d_k^{w_k})^{1/\sum w_i}$$

整體(總)滿意度 D ：演算法最終尋找的最大化目標。

個別(單一)滿意度 d ：各個反應的得分 (0 到 1)。

幾何平均 (Geometric Mean)：確保只要有一個反應極差 ($d=0$)，總分就會歸零，避免偏廢。

水稻優化生產為例：情境和目標設定

控制因子 (輸入)

- 因子 X1: 氮肥量 (kg N/ha)
- 因子 X2: 生物炭比例 (%)
- 因子 X3: 有機資材比例 (%)

優化目標 (輸出)

目標 1：產量 Y_1 (望大)

- 如水稻產量越高越好

目標 2：碳排 Y_2 (望小)

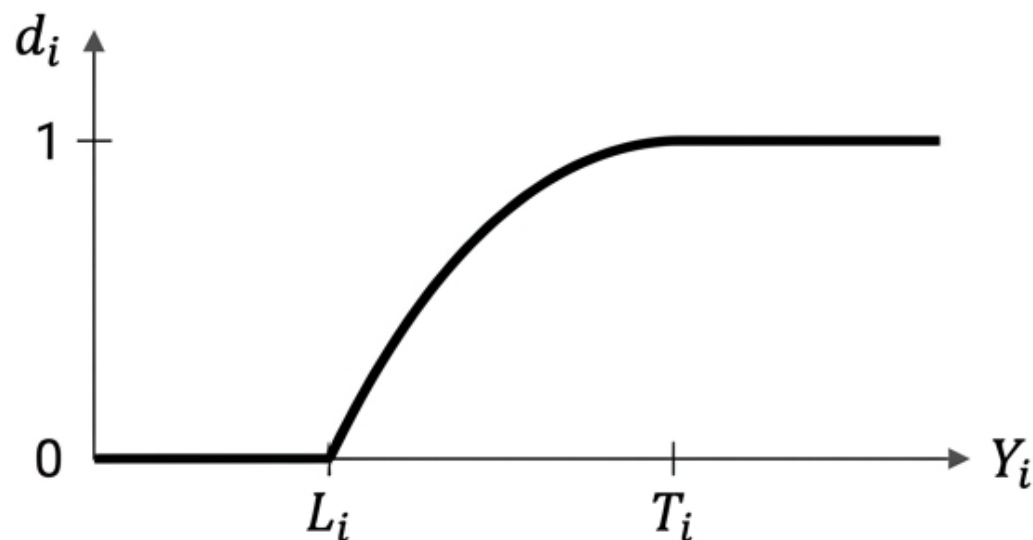
- 如溫室氣體排放越低越好

目標 3：品質 Y_3 (望目)

- 如稻穀含水率需精準對齊規格

望大目標 (Larger-the-Better) 應用於水稻產量極大化

理論規格



$$d_i = 0 \quad (\text{if } Y_i < L_i)$$

$$d_i = \left[\frac{Y_i - L_i}{T_i - L_i} \right] \quad (\text{if } L_i \leq Y_i \leq T_i)$$

$$d_i = 1 \quad (\text{if } Y_i > T_i)$$

(L_i ：下限， T_i ：目標值)

實證計算

指標與規格：預測產量 $Y_1 = 7,800$ kg/ha

容忍下限 容忍下限 $L_1 = 7,000$

理想目標 理想目標 $T_1 = 8,000$

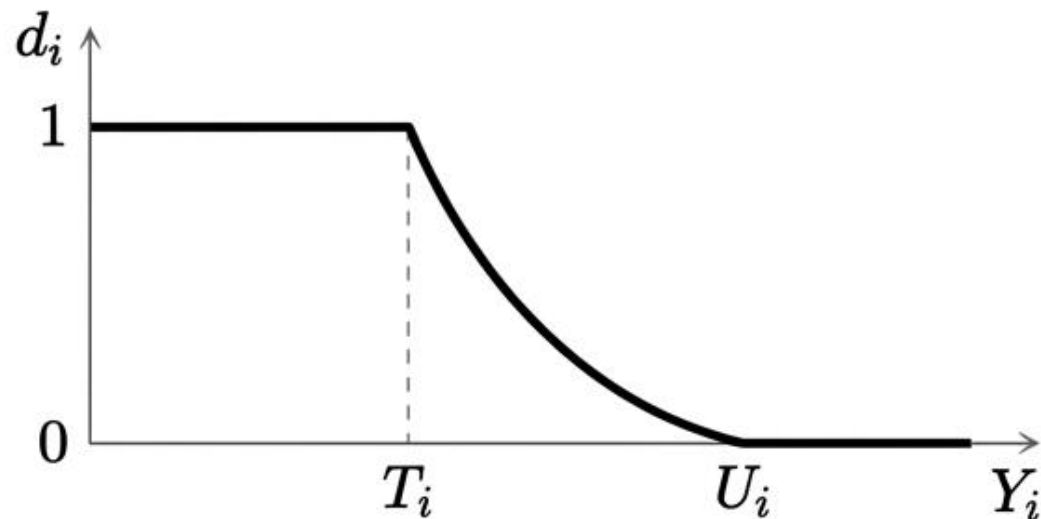
$$d_1 = \frac{7,800 - 7,000}{8,000 - 7,000} = \frac{800}{1,000}$$

$$d_1 = 0.80$$

結果解讀：該組栽培管理條件（假設氮肥 190 kg/ha、生物炭比例 3.5%、有機資材比例 30%）在產量上的滿意度達 0.80，已接近理想目標。

望小目標 (Smaller-the-Better) 應用於碳排放極小化

理論規格



$$d_i = 1 \quad (\text{if } Y_i < T_i)$$

$$d_i = \left[\frac{U_i - Y_i}{U_i - T_i} \right] \quad (\text{if } T_i \leq Y_i \leq U_i)$$

$$d_i = 0 \quad (\text{if } Y_i > U_i)$$

(U_i : 上限, T_i : 目標值)

實證計算

指標與規格：預測碳排 $Y_2 = 4,100$ kg CO₂e/ha

理想目標 $T_2 = 3,800$

容忍上限 $U_2 = 4,500$

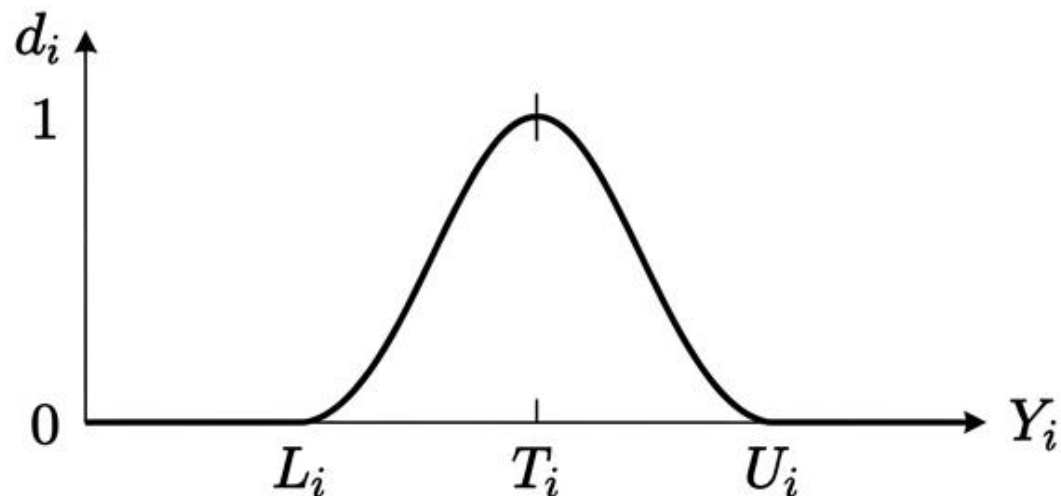
$$d_2 = \frac{4,500 - 4,100}{4,500 - 3,800} = \frac{400}{700}$$

$$d_2 \approx 0.57$$

結果解讀：碳排量滿意度僅 0.57，顯示雖然產量接近目標，但碳排仍偏高，該組條件具改善空間。

望目目標 (Nominal-the-Best) 應用於稻穀含水率精準控管

理論規格



$$d_i = \begin{cases} \left[\frac{Y_i - L_i}{T_i - L_i} \right] & (\text{if } L_i \leq Y_i \leq T_i) \\ \left[\frac{U_i - Y_i}{U_i - T_i} \right] & (\text{if } T_i < Y_i \leq U_i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

(L_i, U_i : 容忍上下限, T_i : 精準目標值)

實證計算

指標與規格：預測稻穀含水率 $Y_3 = 24.5\%$

理想目標 $T_3 = 24.0\%$

下限 $L_3 = 22.0\%$

上限 $U_3 = 26.0\%$

$$d_3 = \frac{26.0 - 24.5}{26.0 - 24.0} = \frac{1.5}{2.0}$$

$$d_3 = 0.75$$

結果解讀：稻穀含水率滿意度為 0.75，數值略高於目標，但仍精準落於商業包裝與保存的容忍範圍內。

權重係數(w)決定優化模型的嚴苛程度

以水稻為例說明三目標權重建議表

研究情境	產量 w1	碳排 w2	稻穀含水率 w3	適用說明
基準平衡型	0.33	0.33	0.34	適合先做初步分析，三者同等看待(1:1:1)。
增產優先型	0.50	0.30	0.20	適合以產量為主、同時兼顧減碳與收穫可行性。
減碳優先型	0.30	0.50	0.20	適合淨零、低碳農業或碳足跡研究。
收穫品質優先型	0.40	0.20	0.40	適合含水率直接影響後續乾燥或品質風險時使用。
保守折衷型	0.40	0.35	0.25	適合一般論文常用設定，兼顧產量與減碳。

設定權重的提醒

- 權重不要只是憑直覺亂配，最好先想清楚「哪個目標最不能妥協」。
- 若權重差異太大，最佳解會幾乎被單一目標主導；如果全部一樣，則代表三者同等重要。

實用建議

可先試三組權重：

1:1:1，代表三者同等重要。

5:3:2，代表產量優先。

3:5:2，代表減碳優先。

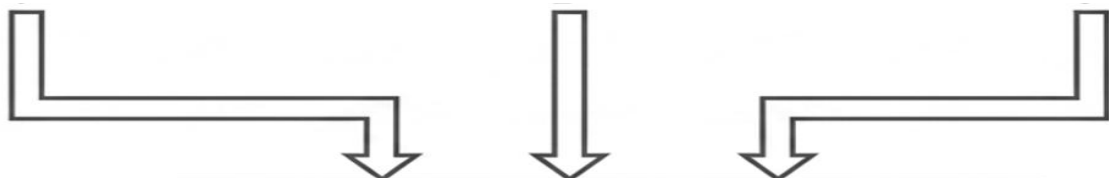
再比較最佳解有沒有明顯改變。若最佳解變化很大，表示你的決策對權重非常敏感，這時就應該回頭重新討論研究目標。

融合決策：整體滿意度

產量 $d_1 = 0.80$

碳排量 $d_2 = 0.57$

稻穀含水率 $d_3 = 0.75$



基準平衡型：權重 $w_1 = w_2 = w_3 = 1$

$$D = (d_1 \times d_2 \times d_3)^{1/3} = 0.70$$

增產優先型：權重 $w_1 = 0.5, w_2 = 0.3, w_3 = 0.2$

$$D = (d_1^{0.5} \times d_2^{0.3} \times d_3^{0.2})^{1/1} = 0.71$$

減碳優先型：權重 $w_1 = 0.3, w_2 = 0.5, w_3 = 0.2$

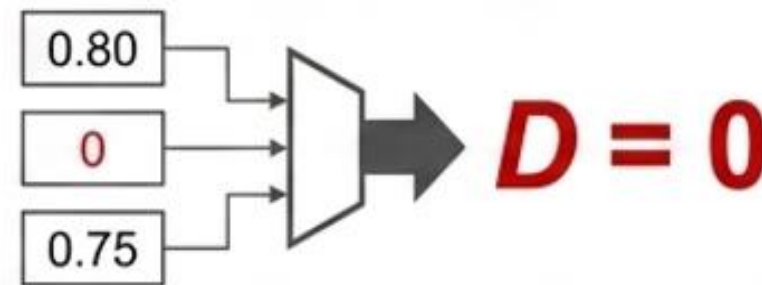
$$D = (d_1^{0.3} \times d_2^{0.5} \times d_3^{0.2})^{1/1} = 0.67$$

保守折衷型：權重 $w_1 = 0.4, w_2 = 0.35, w_3 = 0.25$

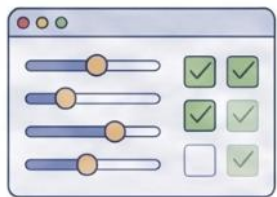
$$D = (d_1^{0.4} \times d_2^{0.35} \times d_3^{0.25})^{1/1} = 0.70$$

關鍵機制：一票否決 (One-Vote Veto)

透過幾何平均數，只要任何一個指標不合格 ($d_i = 0$)，總體滿意度將歸零，確保不會發生「產量達標但碳排完全失控」的顧此失彼現象。



找出使D最大之最佳條件組合的兩種策略：評分診斷 vs. 全域搜尋



指定條件評分法： 被動診斷與排序

主要目的

針對「特定且有限」的既有數據進行打分
適用於回顧 15 組實驗點或指定配方，診斷歷史生產批次。

優點

計算量極小且實務風險低

評估點多已實作過，適合資源有限時的快速決策。

缺點

視野受限，易錯過全域最佳解

僅能從現有點位中挑選，無法看見實驗點之間的隱藏好解。



最佳搜尋法： 主動探索與挖掘

主要目的

在連續上下限內生成數萬個網格採樣
由電腦主動進行地毯式搜尋，不侷限於已有的實驗點。

優點

具備突破性，精確定位理論巔峰

旨在開發全新的黃金配方，尋找尚未被實作的最優條件。

缺點

計算量大且需回現場實體驗證

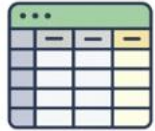
電腦生成的預測點必須經過實際操作確認其可行性。

多反應最佳化：指定條件評分法 的系統操作流程



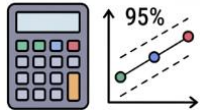
步驟 1. 匯入模型與參數

載入各反應值的二階模型係數與殘差標準誤 (RSE)，作為數學預測與 95% PI 計算的基準。



步驟 2. 載入已知特定候選點 (被動)

直接載入「既有且有限」的已知操作條件矩陣 (如：當初經 CCD、BBD 或 DOD 設計方案做過的各組試驗數據、實驗室內現有的幾種配方或特定歷史批次)。



步驟 3. 計算已知點之預測值與 95% PI

將已知點代入模型，計算出這些特定配方的預測值，並結合 RSE 計算其 95% PI。



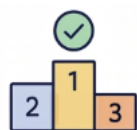
步驟 4. 轉換個別滿意度

依各反應目標 (望大/望小/望目)，將特定點的預測值映射轉換為 0~1 無維度滿意度 d_i 。



步驟 5. 計算幾何加權整體滿意度

給定各指標權重 w_i ，計算每一組已知點的整體滿意度 D ，並利用幾何平均「一票否決」特性確保選出的方案無嚴重缺陷。



步驟 6. 排序並選出已知選項最佳解

對已知選項進行排名，明確回答「在目前現有的這幾組已知配方中，哪一組的綜合表現最好」，作為實體驗證的依據。

指定條件評分

【範例：水稻精準生產】

3 因子：X1=氮肥量(kg/ha)、X2=生物炭比例(%)、X3=有機資材比例(%)，

3 反應：Y1=產量(kg/ha)、Y2=碳排放量(kg CO₂e/ha)、Y3=稻穀含水率(%)。



欲找出「**增產、減碳、品質達標**」多反應總滿意度最大的因子組合，設定目標情境如下：

反應變數	最佳化方向	目標設定值	最小值	最大值	權重w
Y1 產量	望大	7500	7000	-	0.40
Y2 碳排放量	望小	3800	-	4000	0.35
Y3 稻穀含水率	望目	24	22	26	0.25



3組待評分組合

待評分組合	操作點位	X1 氮肥量	X2 生物炭比例	X3 有機質材比例
組合 A	中心點	150	3.5	20
組合 B	極端邊界點	200	3.95	30
組合 C	自訂測試條件	180	4.2	25

反應變數	最佳化方向	目標設定值	最小值	最大值	權重w
Y1 產量	望大	7500	7000	-	0.40
Y2 碳排放量	望小	3800	-	4000	0.35
Y3 稻穀含水量	望目	24	22	26	0.25



3組待評分組合的分析結果

組合A (中心點):

$X1=150, X2=3.5, X3=20$

	Y1	Y2	Y3
最佳化預測	7542	4043	24.2
滿意度 d	1	0	0.91

整體滿意度 $D = 0.00$

未達理想：

產量完美達標(且略增42)、但
碳排放量無法接受(超出上限
4000)、稻穀含水量率接近目標。

組合B (極端邊界點):

$X1=200, X2=3.95, X3=30$

	Y1	Y2	Y3
最佳化預測	7550	3890	23.7
滿意度 d	1	0.55	0.86

整體滿意度 $D = 0.78$ (勝)

整體表現可接受：

產量完美達標(且略增50)、
碳排放量可減至離目標僅多
90、稻穀含水量率接近目標。



組合C (自訂測試條件):

$X1=180, X2=4.2, X3=25$

	Y1	Y2	Y3
最佳化預測	7613	3963	24.0
滿意度 d	1	0.19	0.997

整體滿意度 $D = 0.55$

未達理想：

產量完美達標(且略增113)、
但碳排放量離目標尚多163、
稻穀含水量率接近目標。

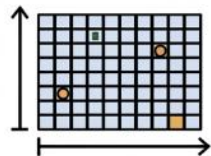
目前 3 組合中以 B 組合的綜合表現最好，反應值 Y1,Y2,Y3 的 95% PI 各為(7166, 7934)、(3653, 4126)、(23.5, 24.0)，可供後續實體驗證用。

多反應最佳化：最佳化搜尋法的系統操作流程



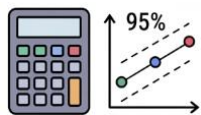
步驟 1. 匯入模型與參數

載入各反應值的二階模型係數與殘差標準誤 (RSE)，作為數學預測與 95% PI 計算的基準。



步驟 2. 建置全空間搜尋網格 (主動)

定義各因子的上下限與切分密度 (如各切21點)，由電腦自動將連續空間離散化為上萬個候選網格矩陣 (如 9,261 個點)，進行全域覆蓋掃描。



步驟 3. 計算全網格之預測值與 95% PI

同步計算全網格點的預測值，並利用 RSE 估算其 95% PI。



步驟 4. 轉換個別滿意度

依各反應目標 (望大/望小/望目)，將各網格點的預測值映射轉換為 0~1 無維度滿意度 d_i 。



步驟 5. 計算幾何加權整體滿意度

給定各指標權重 w_i ，計算每一網格點的整體滿意度 D ，並利用幾何平均「一票否決」特性，過濾掉帶有致命缺陷的操作點。



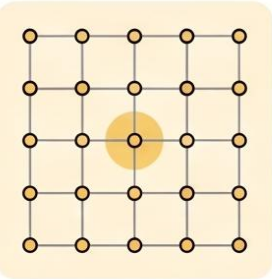
步驟 6. 排序並選出全域前五名最佳條件

按整體滿意度降冪排序，提取前 5 名最佳操作條件，回答「全空間內理論上最完美的黃金配方在哪裡」，作為實體驗證的依據。

全域網格搜尋：切分密度選擇指南

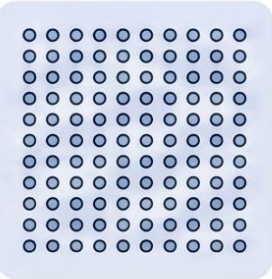
切分密度決定了統計預測的解析度與計算負荷，透過選擇合適的切分點數，可在運算效率與搜尋精度之間取得最佳平衡。

三大網格密度規格



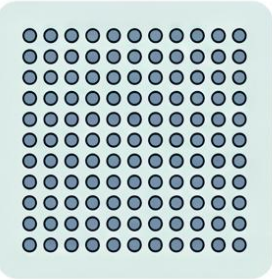
標準黃金網格（21點切分）

最推薦的設定，計算可在一秒內完成，兼具高解析度與執行效率。



粗略網格（11點切分）

適用於因子數量超過四個或電腦記憶體有限時，進行快速初步掃描。



精細網格（31至51點切分）

應用於對最佳解精確度要求極高，或反應曲面極度陡峭的特殊情境。

選點關鍵原則



點數規模計算公式



計算點總數遵循 N^k 的 k 次方（ N 為單一因子切分點數， k 為因子個數）。



優先選用奇數切分點

確保網格涵蓋設計空間的正中心點，且產生的步長數值較易閱讀。

切分密度與總計算點數對照（3個操作因子）

	切分等級	單一因子切分點數	總計算點數
粗略網格		11	1,331
黃金網格		21	9,261
精細網格		31	29,791

RSM多反應最佳化：為何「前 5 名」最佳條件比「第 1 名」更重要？

在RSM多反應滿意度分析中，單一的數學最佳解 (Top 1) 往往忽略了現實環境的變動與成本限制。透過分析前5名最佳條件，決策者能識別出具備高容錯率、經濟效益及實務可行性的操作方案。

製程穩健性

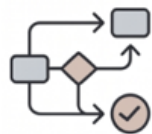


評估「高原效應」以提高容錯率

若前五名數據落差極小，代表該區域為平緩高原，即使環境波動也能維持優異成果

實務執行備案

增加「驗證試驗」的成功彈性



數學模型與現實常有差距，擁有多組備案能確保試驗失敗時具備快速調整的空間。

經濟效益



尋求成本與效益的「折衷選擇」

排名稍後的條件組合可能僅犧牲微小滿意度，卻能節省大量能源與材料成本。

風險規避



規避隱性的物理與操作限制

現場專家可依據經驗，從前五名中避開理論最優但實務上易導致損害的操作點。

最佳化搜尋

【範例：水稻精準生產】

3 因子：X1=氮肥量(kg/ha)、X2=生物炭比例(%)、X3=有機資材比例(%)，

3 反應：Y1=產量(kg/ha)、Y2=碳排量(kg CO₂e/ha)、Y3=稻穀含水率(%)。



欲找出「**增產、減碳、品質達標**」多反應總滿意度最大的因子組合，設定目標情境如下：

反應變數	最佳化方向	目標設定值	最小值	最大值	權重w
Y1 產量	望大	7500	7000	-	0.40
Y2 碳排量	望小	3800	-	4000	0.35
Y3 稻穀含水率	望目	24	22	26	0.25



網格搜尋(21切點)的分析結果

前5名最佳條件組合			Y1預測值	Y2預測值	Y3預測值	d1	d2	d3	D
190	3.5	30	7502	3881	23.82	1.000	0.593	0.908	0.813
195	3.5	30	7500	3879	23.77	0.999	0.604	0.884	0.813
185	3.5	30	7502	3885	23.86	1.000	0.577	0.929	0.810
195	3.65	30	7521	3882	23.77	1.000	0.592	0.887	0.808
190	3.65	30	7523	3884	23.82	1.000	0.578	0.912	0.807

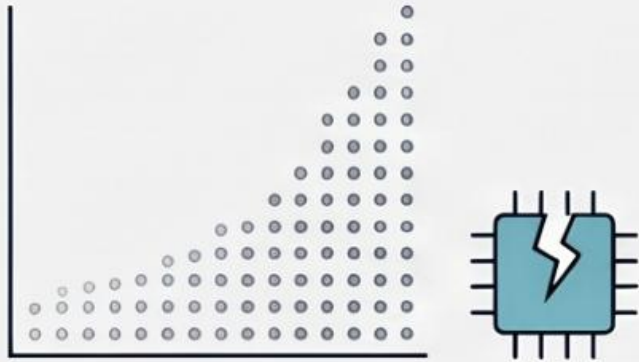


- 前5名整體滿意度的落差極小，表示該區為平緩高原，即使環境波動也能維持優異成果 D=0.81。整體表現良好：產量達標(近於7500)、碳排量可減至離目標(3800)僅約多79~84 (看來碳排已達減量極限，任何調適操作也無法再減)、稻穀含水率接近目標(24.0)。
- 現場專家可依經驗或資源限制，從這前5名中選擇多組備案，並透過其 95% PI 供作後續實體驗證用。

多反應最佳化搜尋：常見問題與解決策略 (上)

1. 當因子數增加時(如 ≥ 5)，網格點數呈指數型暴增($21^5 \approx 408$ 萬點)，導致R或電腦記憶體不足而崩潰。

維度陷阱導致記憶體溢出



策略

採用**兩階段搜尋法**，先以粗網格全域掃描，再縮小區間進行精細微搜。

2. 最高分D落在因子的最上限或最下限，代表真實最佳解可能落在原先設定的試驗邊界之外。

最佳解落在設計空間邊界



策略

若製程設備或場域條件允許，可將搜尋網格範圍適度**外擴**或追加邊界外的驗證試驗。

多反應最佳化搜尋：常見問題與解決策略 (下)

3. 幾何平均具有「一票否決」特性。
若多反應之間高度衝突(如: 產量極高與成本極低無法兼得)，導致某一指標的 $d_i \rightarrow 0$ ，D 就會歸零。

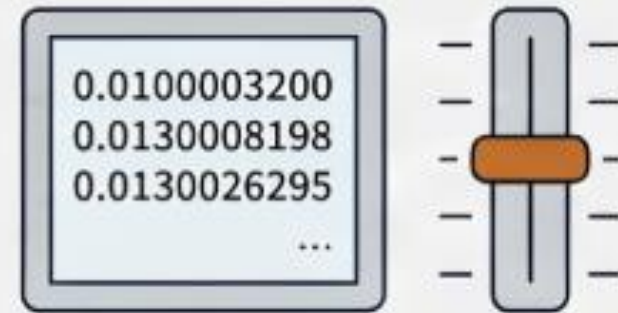
總滿意度因指標衝突歸零



策略 放寬衝突指標的臨界門檻，或重新評估各反應變數的權重分配。

4. 電腦搜尋出某一因子有小數點
(如: $X_1 = 12.35$)，但現場儀器只能調整到整數(如: 12或13)。

最佳點精度無法在現場實施



策略 依設備可控的**最小步長**建立網格，或從前五名列表中挑選具可行性的條件。

最後一哩路 → 多反應最佳化：實體驗證三階段指南



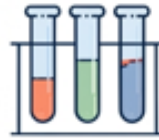
第一階段：準備工作

挑選 2 至 3 組候選方案

從計算出的前五名最佳條件中，挑選不同特性的組合進行驗證。

★儀器與環境嚴格校準

確保驗證時的原始材料與環境條件與建模時完全一致。



第二階段：執行試驗

★執行三次獨立重複實驗

每一組驗證條件皆需至少三重複，以確保統計上的穩定性。

★詳實記錄過程變異

記錄如材料批次或環境波動等細節，作為誤差分析的依據。



第三階段：統計比對與決策

★95% 預測區間判斷

檢查實測平均值是否落在模型的預測區間內，確認初步驗證成功。

回溯計算總滿意度

將實測數據代入函數，評估各項指標的平衡程度與達成率。

採行對比式驗證策略

建議挑選追求產量與追求成本平衡等不同特性的條件進行對比。

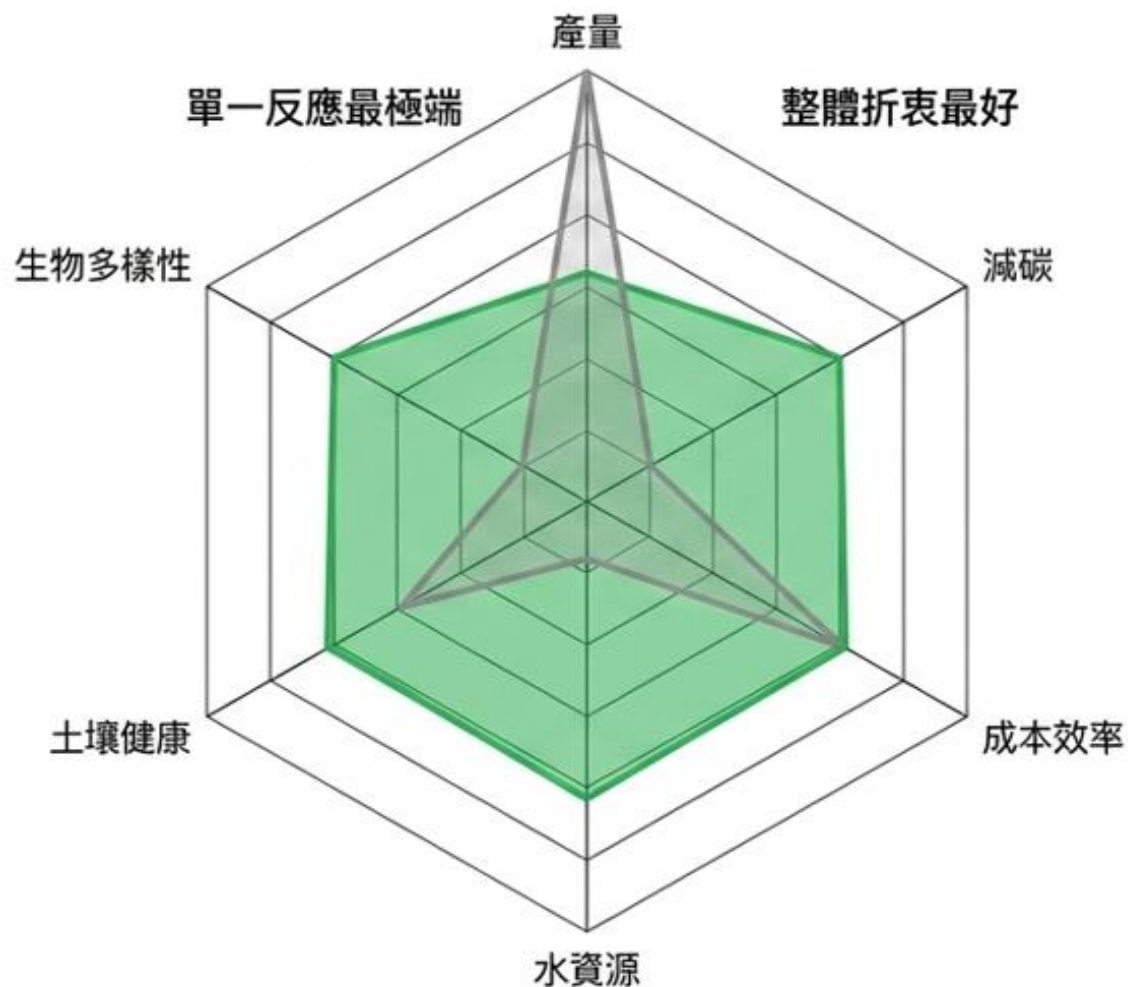
(註：★ 步驟同於RSM建模僅有單一目標的實體驗證)

最佳化搜尋法

最佳化搜尋法

科學價值：從單一極端邁向系統最佳折衷

農業實務往往充滿妥協——提高產量（望大），可能導致農藥殘留增加（望小）或偏離最佳環境（望目）。反應曲面法（RSM）的核心價值，在於提供一套化解衝突的客觀決策系統。



RSM不僅是統計工具，更是現代農業平衡經濟效益與環境永續的關鍵核心技術。



將複雜的自然變數，轉化為可預測、可控制的精密製程。

農業 RSM 優化範例（一）：增產與品質強化

聚焦於「望大」組合，追求產量與品質的雙重提升



控制因子

氮肥施用量 (A) × 灌溉水量 (B)



最佳化目標

↑ [↑望大] 稻穀產量 (kg/ha)
↑ [↑望大] 蛋白質含量 (%)

建立產量與蛋白質的反應曲面，同步最大化雙指標。



控制因子

烘乾溫度 (A) × 烘乾時間 (B)



最佳化目標

↑ [↑望大] 茶葉風味評分 (感官品評)
↓ [↓望小] 水分殘留率 (%)

在避免焦化與過度乾燥前提下，最大化風味並最小化水分。



控制因子

木屑比例 (A) × 米糠添加量 (B)



最佳化目標

↑ [↑望大] 菇類生物量產率 (g/包)
🎯 [望目] 基質 pH 值 (精準目標：6.5)

推升產量至最大極限，同時將生長酸鹼度精準鎖定於最佳範圍。

六種「望大 / 望小 / 望目」情境的農業應用實例 (下)

聚焦於「望小、望目」組合，實現有害物減量與精準指標達標。



控制因子

噴藥濃度 (A) × 噴施次數 (B)



雙重目標

↓ [↓ 望小] 農藥殘留量 (ppm)

◎ [◎ 望目] 病蟲害防治率

◎ 95%

避免過度施藥，維持95%恰好防護力並將殘留降至最低。



控制因子

發酵溫度 (A) × 固液比 (B)



雙重目標

↓ [↓ 望小] 氨氮殘留濃度 (mg/L)

↓ [↓ 望小] 臭味強度 (感官評分)

-

同時最小化兩項負面環境指標，提升畜牧環境品質。



控制因子

乙烯利處理濃度 (A) × 處理天數 (B)



雙重目標

◎ [◎ 望目] 果實色度 a^* 值

◎ ≈ 25 (全熟紅)

◎ [◎ 望目] 糖酸比

◎ ≈ 15 (最佳風味)

精算採收時機，同時鎖定完美外觀(色度)與內質(甜酸平衡)的雙指標。

七、潛在因子預前篩選術：PB 設計分析與視覺化

困境：當潛在變數多到無法負荷

在優化農業配方 (如肥料、發酵、栽培等) 時，我們常面臨 7 個以上的潛在因子。
若直接進行RSM，試驗次數將呈爆炸性成長。

傳統全因子試驗



假設有 7 個因子
需要 $2^7 = 128$ 次試驗

結果：耗時、傷財，實務上根本無法執行。

策略性篩選 (Plackett-Burman 設計)



同樣 7 個因子
只需要 12 次試驗

結果：用最低代價，找出真正的關鍵。

精準而高效的實驗架構：PB 設計原理

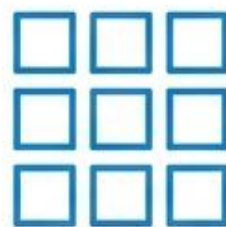
用最少的次數，抓出最有價值的情報

核心定義：一種高效的「**兩變級(高與低)**」篩選設計。試驗次數永遠是 4 的倍數。



一階主效應估算

- 屬於高度分數因子設計。
- 專注於捕捉因子的直接影響力，暫時忽略高階交互作用，以達最高篩選效率。



飽和與正交矩陣

- 試驗次數 N 必為 4 的倍數（如 12 次），且高與低變級 (+1 / -1) 完美平衡。
- 任意兩因子間完全正交，確保估算時訊號互不干擾。



虛設因子 (Dummy Factors)

- 矩陣中未指派實體因子的空欄位。
- 系統自動回收這些欄位，用於估算環境與操作的背景隨機誤差。

為什麼PB設計的試驗次數通常是12？

決定試驗次數的三大統計原則

- **Hadamard 矩陣原理**
試驗總次數 N 必須是 4 的倍數，確保因子間完全正交。
- **飽和設計原則 ($N \geq k + 1$)**
次數 N 必須大於因子數量 k 加上 1 個總平均項。
- **保留誤差自由度**
必須留有額外次數作為虛設因子，才能計算 P 值與 F 值。

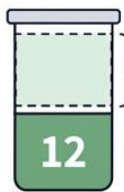
自由度分配情況 ($N = 12$)		
分配對象	自由度數量 (df)	說明
因子 (Factors)	7	用於估算 7 個主要因子的影響
總平均項	1	試驗設計的基礎基準
誤差 (Error)	4	由虛設因子組成，用於計算 P 值

以 7 個因子為例：為何選 12 次而非 8 次？



NO
ERROR

8 次實驗的限制 (完全飽和)
自由度全被因子佔滿，無誤
差項可計算統計顯著性。



ERROR
(4)

12 次實驗的優勢 (黃金標準)
剩餘 4 個自由度可估算誤差，
確保Pareto或Daniel圖具統計依據。

● 矩陣生成邏輯

(歐美學術界和西方軟體的標準規格)

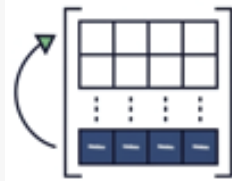
第1橫列的標準正負號順序(基本行)為：

+ + - + + + - - - + - (共 11 個符號)

第2~11橫列透過基本行

「循環右移」產生，最後

第12橫列固定為全負號。



另有日本品質大師田口玄一 (Taguchi) 定義的 L_{12} 正交表排序。

兩大視覺化篩選工具：Pareto 圖 vs. Daniel 圖



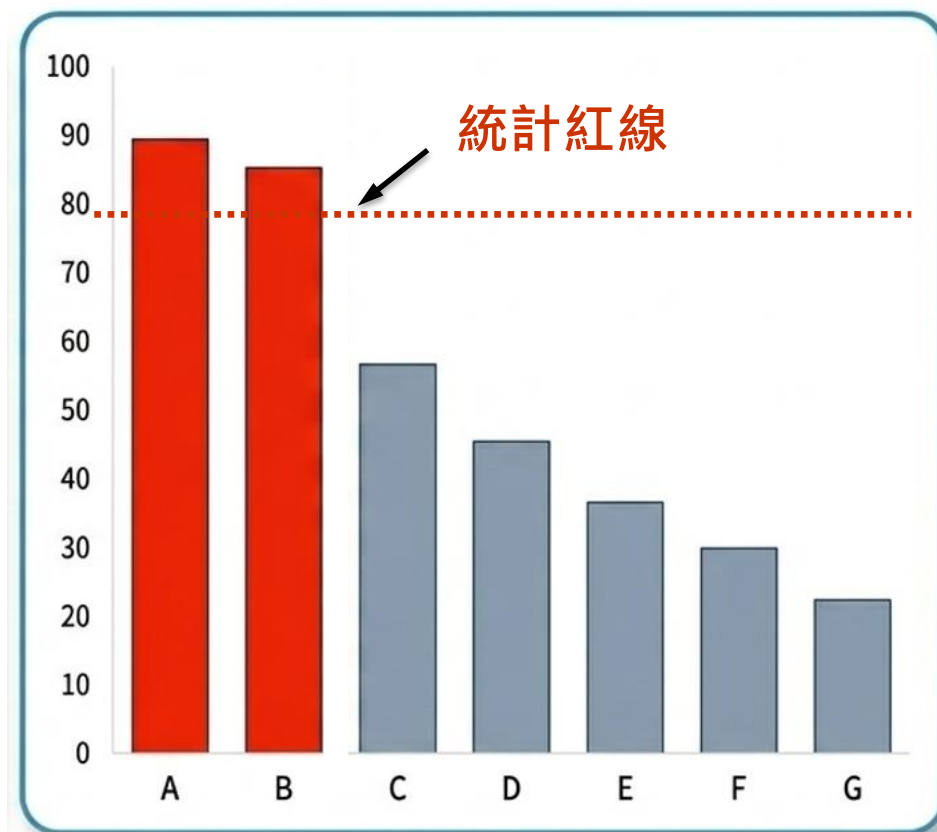
| 評比維度 | Pareto 圖 (柏拉圖) | Daniel 圖 (半常態機率圖) |
|------------|-----------------------|-----------------------------------|
| 圖形構造 (X 軸) | 各個獨立因子 (依影響力降序排列) | 因子的主效應絕對值 |
| 圖形構造 (Y 軸) | 效應值大小 / 累積百分比 | 半常態理論分位數/累積機率 |
| 顯著性判定依據 | 觀察長條圖是否超越 t 臨界紅線 | 觀察因子是否明顯偏離參考直線
且跨越 Lenth 顯著基準線 |
| 核心優勢 | 圖像極度直觀，降低溝通門檻 | 統計邏輯嚴謹，無須重複試驗即可檢定 |
| 學術與業界認可 | 業界普遍接受 (常需附帶 P 值輔助說明) | 高度認可，為高品質生物與工程期刊標配 |
| 最佳適用對象 | 生產線主管、非統計背景之決策者 | 研發科學家、數據分析師、學術期刊審員 |

圖形構造與解讀

- 核心原理：基於80/20關鍵少數法則（80%改善空間，通常由20%核心因子決定）。
- 圖結構：X軸為因子，Y軸為貢獻度或標準化效應(t值)，長條依影響力大小由左至右降序排列。
- 關鍵因子判定：軟體會自動繪製一條統計紅線(貢獻度大於80%或t檢定臨界值)。長條超越紅線者，即為關鍵因子。(如右圖所示)

應用優勢

- 極為直觀、視覺衝擊力強。
- 不需要深厚的統計背景即可一眼解讀。
- 最佳適用場景：向非統計背景之客戶、主管或生產線人員進行專案報告。

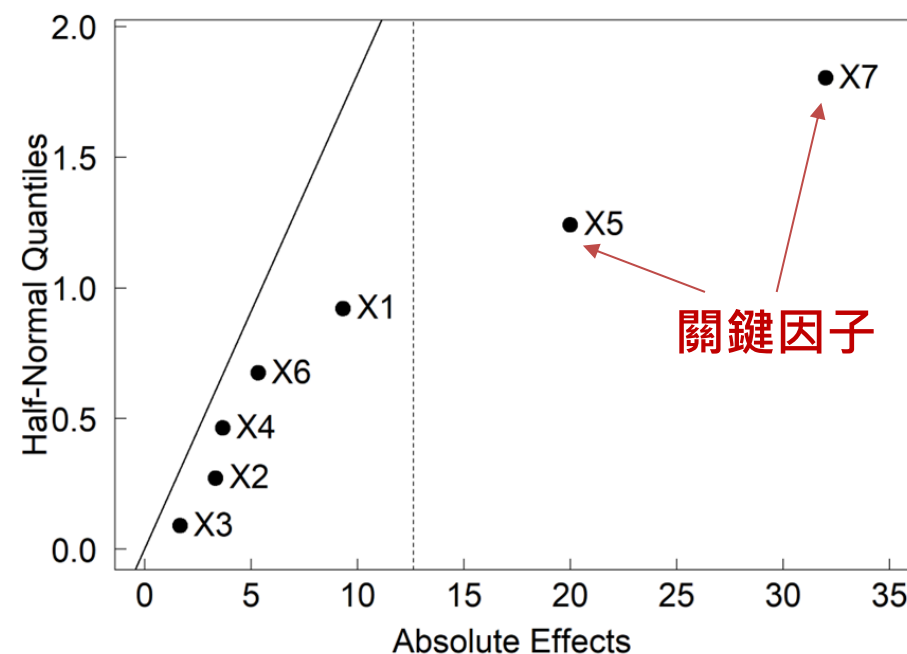


圖形構造與解讀

- 核心原理：基於「效應稀疏性原則」，絕大多數因子皆為不顯著的雜訊，其效應值符合常態分布。
- 圖結構：Daniel 半常態圖將各因子的效應絕對值與半常態理論分位數進行比較。
- 為避免視覺判讀有人為主觀認定的盲點，1989年的 Lenth 法，從現有數據計算出虛擬標準差(PSE)，利用 Lenth PSE 估計非活躍效應的誤差尺度，據此建立 Daniel 參考線；效應若明顯偏離參考線，表示可能具有較大的實際作用。重要因子的正式篩選則以 Lenth 臨界值作為判定統計顯著性的門檻。
- **關鍵因子判定(雙重檢驗)**：因子的主效應絕對值明顯偏離常態參考直線，且超越 Lenth 統計顯著基準線，即為具備統計顯著性的核心關鍵因子。(如右圖所示)

圖中實線是常態參考直線；
虛線是統計顯著基準線

Daniel Plot (Half Normal), $\alpha=0.05$



應用優勢

- 具備嚴謹的統計檢定能力。
- 即使在高度飽和的PB設計中，不需重複試驗也能科學地判斷顯著性。
- 最佳適用場景：研發科學家內部決策、高品質學術期刊發表與嚴格審查。

何時該啟動 PB 設計與篩選工具？



新產品與配方摸索期

面對未知因子變數極多、彼此關係錯綜複雜時，作為破冰與探索方向的首要工具。



最佳化試驗的「第一階段」

作為試驗漏斗的頂端，用以大幅精簡因子，為後續的反應曲面法 (RSM) 鋪路。



資源受限的科學研究

當經費或時間不允許進行大量重複試驗，卻又必須具備嚴謹統計支持的製程優化

實務範例：優化有機肥的氮轉化率 (%)

研究目的：從下列 7 個潛在製程變數中，快速篩選出對「氮轉化率」具顯著影響的核心因子。

X1: 枯草桿菌接種量

-1: 1%

+1: 5%

X2: 木質素分解菌量

-1: 1%

+1: 5%

X3: 初始碳氮比 C/N

-1: 20

+1: 30

X4: 翻堆頻率

-1: 0.5 次/天

+1: 1 次/天

X5: 初始含水率

-1: 45%

+1: 60%

X6: 環境通風量

-1: $0.01 \text{ m}^3/\text{s} \cdot \text{m}^2$

+1: $0.05 \text{ m}^3/\text{s} \cdot \text{m}^2$

X7: 發酵槽稻殼配比

-1: 5%

+1: 15%

氮轉化率 Yield (%)



實戰演練全流程：三大階段

第一階段 - 試驗設計

生成 PB 設計方案，並執行試驗組合順序隨機化

- 依據 7 個實際因子與 4 個虛設因子建構標準正交矩陣，定義出 12 個高低變級之試驗組合。
- 將 12 個試驗組合的順序徹底打亂，以有效分散溫溼度、人員疲勞等隨時間變化的隱性環境干擾。

第二階段 - 試驗執行

採集反應數據與回填

嚴格按表完成 12 批發酵作業，精準測量最終「氮轉化率(%)」，記錄為反應值 Y。

第三階段 - 統計建模與視覺化

模型擬合、估計背景誤差，最後繪製視覺化圖形

- **線性模型擬合**：以 Y 為反應變數、實際操作的 X1~X7 為自變數，進行**線性回歸(不含交感項)**運算與效應估計。
- **回收虛設因子轉為背景誤差**：刻意不對虛擬因子作變數設定，統計引擎會將這 4 個空欄位的變方打包，轉化為檢定所需的殘差自由度與誤差項。
- **繪製視覺化圖形**：提取模型中各因子的標準化效應值，投影至半常態機率圖上，進行訊號與雜訊的分離。

第一階段 - 試驗設計

完成 PB設計方案表，並將試驗表內的 12 次試驗組合隨機化排序。（如右表）

表內除 7 個因子變數欄外，還會多出4欄的虛設因子，這共 11 個欄位彼此之間完全正交（獨立、互不干擾）。

4 個虛設因子

| Run | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 | X7 | Dummy1 | Dummy2 | Dummy3 | Dummy4 |
|-----|----|----|----|----|----|----|----|--------|--------|--------|--------|
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 |
| 2 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | 1 |
| 3 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 |
| 4 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 |
| 5 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 |
| 6 | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 |
| 7 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 |
| 8 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 |
| 9 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 1 |
| 10 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 |
| 11 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| 12 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 |

第二階段 - 試驗執行



按表完成 12 桶小型發
酵槽測試 (歷時 3 週)

測得 12 組最終的「氮轉化率(%)」反應值 Y 數據，並回填至原執行試驗表Excel檔內。

在實際做試驗時，完全毋需理會 4 欄虛設因子，即不需要為這4個試驗條件組合準備任何操作。但在試驗結束、回填數據進行分析時，這 4 欄就會發揮關鍵統計核心作用（估計試驗誤差、計算 P 值）。

第三階段 - 統計建模與視覺化階段 (上)

- 執行PB設計的線性模型擬合（不含交感項）。分析過程中系統會自動將4個虛設因子用來估計試驗誤差與計算P值。結果顯示，模型顯著， R^2 和校正 R^2 都 >0.8 且兩者差距 <0.2 ，表示模型的配適與預測力良好。
- 7個因子中以X5和X7的效應顯著存在($P<0.05$)。

| 線性模型摘要 (LM Summary) | | | | | | | |
|---|-------------|-----------|--------------------|-------------|-------|-------|----------|
| 模型公式：Y ~ X1 + X2 + X3 + X4 + X5 + X6 + X7 | | | | | | | |
| N | Residual_SE | R_squared | Adjusted_R_squared | F_statistic | numdf | dendf | p_value |
| 12 | 9.3005 | 0.9314 | 0.8115 | 7.7633 | 7 | 4 | 0.0329 * |

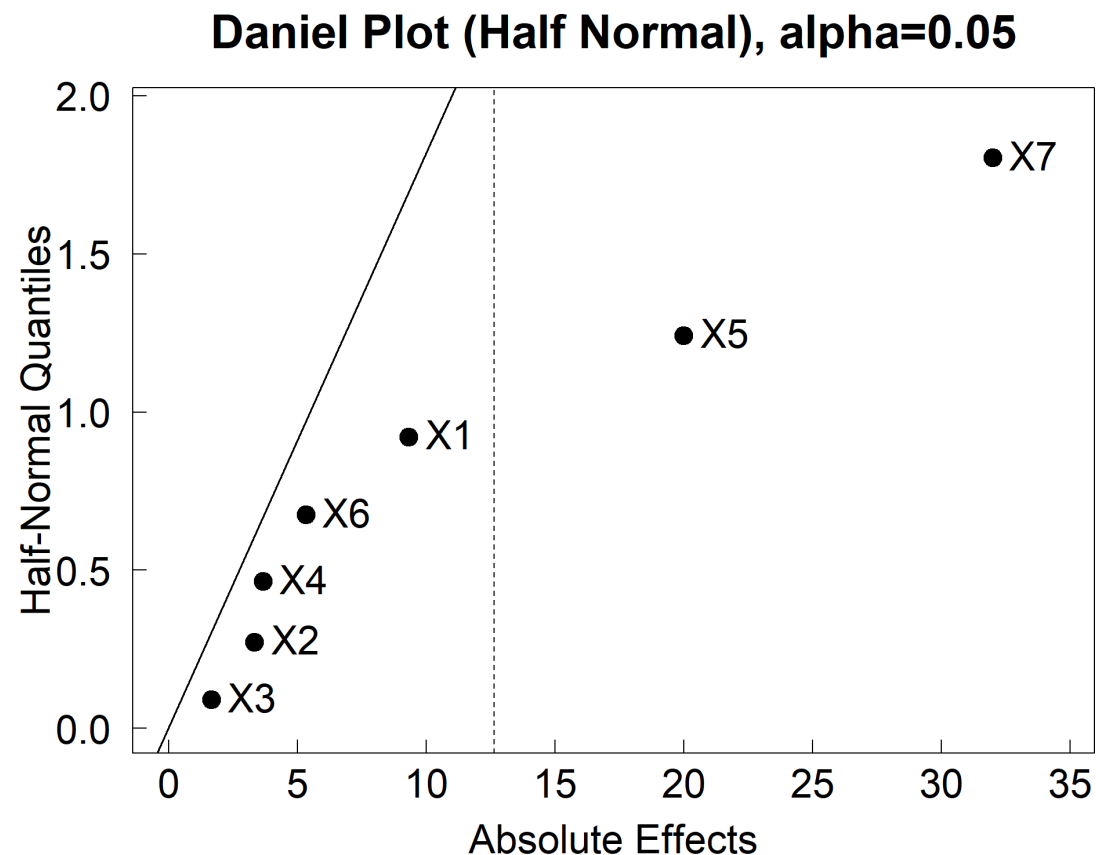
| ANOVA | | | | | |
|---|----|------------|------------|---------|-----------|
| Effect | Df | Sum Sq | Mean Sq | F value | Pr(>F) |
| X1 | 1 | 261.3333 | 261.3333 | 3.0212 | 0.1572 |
| X2 | 1 | 33.3333 | 33.3333 | 0.3854 | 0.5684 |
| X3 | 1 | 8.3333 | 8.3333 | 0.0963 | 0.7718 |
| X4 | 1 | 40.3333 | 40.3333 | 0.4663 | 0.5322 |
| X5 | 1 | 1,200.0000 | 1,200.0000 | 13.8728 | 0.0204 * |
| X6 | 1 | 85.3333 | 85.3333 | 0.9865 | 0.3768 |
| X7 | 1 | 3,072.0000 | 3,072.0000 | 35.5145 | 0.0040 ** |
| Residuals | 4 | 346.0000 | 86.5000 | | |
| Signif. codes: *** p<0.001, ** p<0.01, * p<0.05, . p<0.10 | | | | | |

第三階段 - 統計建模與視覺化階段 (下)

Daniel半常態機率圖用於視覺辨識可能偏離背景雜訊的較大效應；Lenth法則利用因子效應本身估計PSE (虛擬標準差)，建立 Lenth 臨界值以作為統計顯著性的量化篩選門檻。兩者皆不需依賴虛設因子。當因子主效應在 Daniel 圖中明顯偏離常態參考線，且超越 Lenth 顯著性基準線時，可列為後續 RSM 設計與建模的核心關鍵因子。

結論：

在PB設計的Daniel圖判讀中，透過 Daniel參考線的視覺化偏離與 Lenth 統計顯著基準線的雙重檢驗，X5 (初始含水率) 和 X7 (發酵槽稻穀配比)的效應值明顯跳出常態參考直線，且超越 Lenth 顯著性基準線，確信其對反應值 Y (氮轉化率) 是真正具備統計顯著性的核心關鍵因子。故篩選出此二因子進入下一步反應曲面法(RSM)之設計與建模。



實例篩選分析解讀結果與下一步策略

啟動最陡爬坡試驗（鎖定山頂）

進階優化 (RSM)

鎖定 **X5** 與 **X7**，直接進入第二階段「反應曲面法」，探討兩者交互作用與曲率，尋找最高轉化率的黃金參數！

凍結次要因子（省下大筆預算）

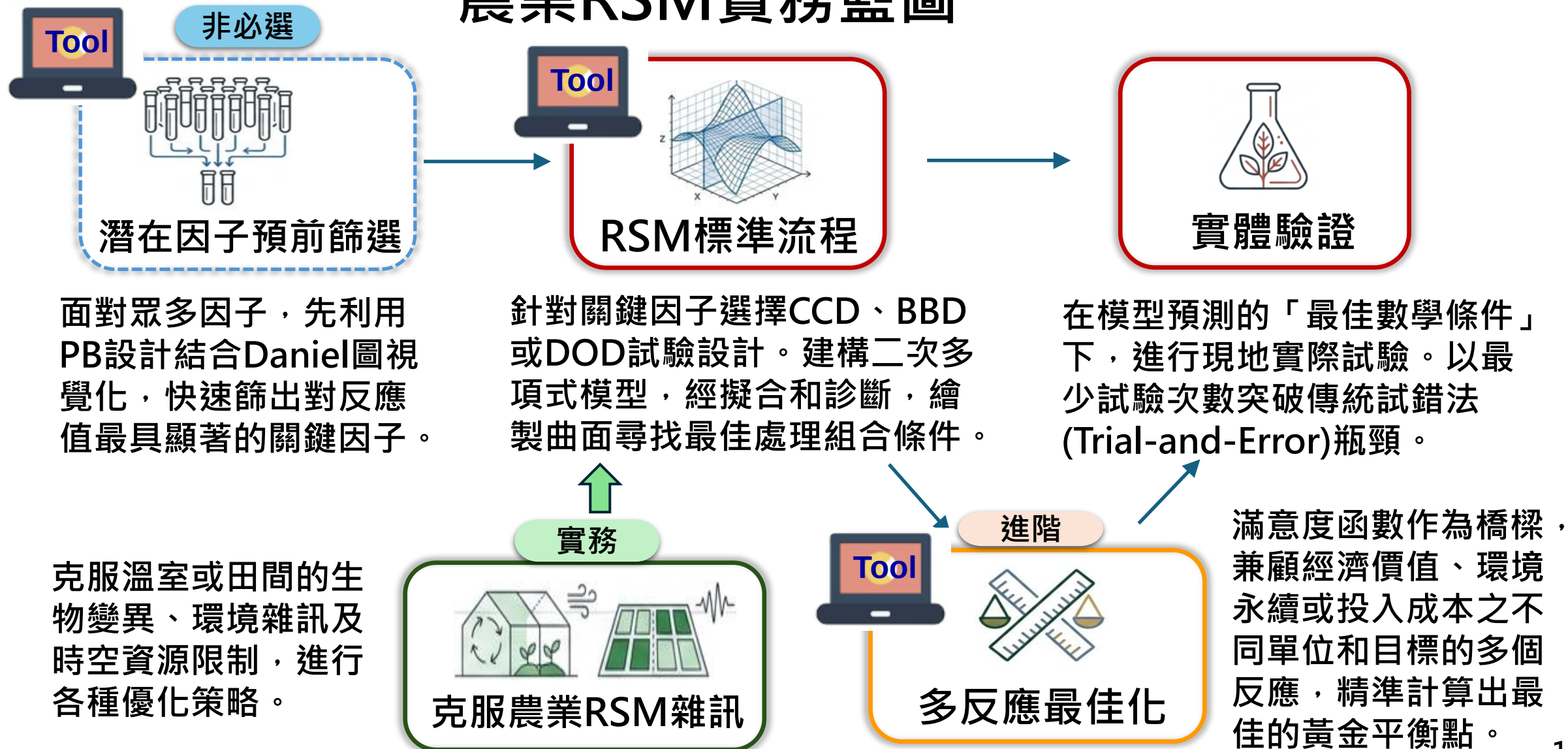
汰弱留強

將 5 個不顯著因子固定在成本最低或最易操作的值，成功精簡模型。

運用PB設計的分析並結合Daniel圖視覺化，縮小包圍網，把最珍貴的資源，砸在**投資報酬率最高的關鍵因子**上。

八、RSM支援分析工具：綜合評比

農業RSM實務藍圖



常見RSM支援工具綜合評估: 免費 vs. 付費

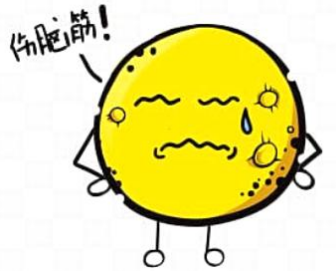
| 工具名稱 | 費用成本 | 操作方式 | 學習門檻 | RSM 完整度 | 繪圖能力 |
|-------------------------------------|--------------|-------|-----------------------|-----------------------------|--|
| R 語言套件
(rsm, FrF2) | 免費
(開源) | 程式腳本 | 高。需掌握統計語法。 | 極高。具備嚴謹統計檢定與完整設計類型。 | 專業且高度自訂。可生成標準 3D 與診斷圖。 |
| Python 生態系
(pyDOE2, statsmodels) | 免費
(開源) | 程式腳本 | 高。需具備撰寫腳本與拼接套件能力 | 高。功能分散，需手動串接工作流。 | 極佳。可利用 plotly 繪製可旋轉的互動式 3D 圖。 |
| Design-Expert | 付費 | 圖形化介面 | 低。具備引導式設計與強大防呆功能 | 最高。RSM 霸主，具備最精準的診斷與轉換提示。 | 頂尖。高品質期刊發表的黃金標準圖表。 |
| Minitab | 付費 | 圖形化介面 | 低。介面類似 Excel，工業統計標準。 | 高。在篩選設計與優化設計的銜接上極為流暢。 | 專業。具備標準工業用統計與診斷圖表。 |
| JMP (SAS Institute) | 付費
(價格不斐) | 圖形化介面 | 低。互動式圖形介面，數據表與圖表高度連動。 | 中高。功能過於龐大，尋找特定 DoE 模組需要適應期。 | 極高。獨家 Custom Designer 能針對特殊形狀的邊界條件自訂非標準 RSM。 |

常見R圖形化介面的RSM分析工具之綜合評估

- RSM完整度極高，具備嚴謹統計檢定與完整設計類型。
- 操作方式為程式腳本，學習門檻高，需掌握統計語法。
- 透過編寫 R 程式碼，設計出圖形化介面（點擊式，免寫程式），能讓初學者快速且容易完成操作。幾款常見免費的 R 圖形化介面的 RSM 軟體，評比如下：

| | BlueSky Statistics  | Chemoface | R Commander (DoE外掛) |
|---------|---|-------------------------|----------------------------|
| 操作介面 | 極佳 (現代化，極似 SPSS) | 佳 (簡單直覺，專注 DoE) | 普通 (介面較為傳統) |
| 程式碼需求 | 零需求 (但可匯出/入 R 語法) | 完全零需求 | 零需求 (背後運作 R 語法) |
| RSM涵蓋範圍 | 篩選設計分析、CCD、BBD、DOD、RSM模型 | CCD、BBD、DOD | 篩選設計分析、CCD、BBD |
| 多反應最佳化 | 需檢視最新版擴充模組或自建 R 程式碼 | 內建完美支援 | 可透過外掛選單支援 |
| 安裝與環境設定 | 單一安裝檔，無腦安裝 | 免安裝或單一安裝檔 | 需先安裝 R 再安裝套件 |
| 繪圖美觀度 | 佳 (ggplot2 等級) | 普通 (傳統 3D 圖表) | 普通 (R 基礎繪圖) |
| 學習門檻 | 低至中 | 極低 | 低至中 |
| 最適合的對象 | 習慣 SPSS 介面、未來可能想銜接 R 的學生或研究者 | 預算有限、只求快速產出優化結果與圖表的實務人員 | 已經在使用 R，但不想親手敲打 DoE 繁雜語法的人 |

BlueSky Statistics 仍無法完全支援農業實務所需的 RSM (尤其是多反應最佳化)



| | 有 | 缺
(需自建 R 程式碼) |
|--------------|--|--|
| 潛在因子篩選的設計與分析 | PB 與 Daniel 圖 | - |
| RSM 試驗設計 | FFD、CCD、BBD、DOD
(僅能用編碼值定義因子變級) | 設計方案編碼值反推自然值 |
| RSM 模型分析 | R^2 , ANOVA, Lack of fit, 殘差分析-常態檢定, 回歸係數, 2D/3D 圖, 曲面最佳臨界點(編碼值) | 殘差分析-變方同質性檢定, 最佳臨界值反推自然值, 計算實體驗證所需的 95% PI |
| 多反應最佳化 | 無 | 滿意度函數、指定條件評分法、最佳化搜尋法、95% PI |

農業反應曲面法實務分析平台

農業試驗所特針對本次講習，以 R 套件程式碼建構的完整工具鏈

農業反應曲面法實務分析平台

完整流程：潛在因子篩選（選用） → RSM 試驗設計 → 試驗執行 → RSM 模型分析與最佳條件驗證 → 多反應最佳化（選用）。

Step 0 潛在因子篩選

候選因子很多時，先用 PB 設計與 Daniel 圖篩選出核心關鍵因子。

[前往潛在因子篩選](#)

Step 1 RSM 試驗設計

以 FFD、CCD、BBD 或 D-Optimal 建立正式試驗。

[前往 RSM 試驗設計](#)

Step 2 試驗執行

下載平台 Excel，依自然值執行試驗並回填一個或多個反應值。

Step 3 RSM 模型分析

ANOVA、Lack-of-Fit、回歸係數、模型診斷、曲面、最佳條件與驗證。

[前往 RSM 分析](#)

Step 4 多反應最佳化

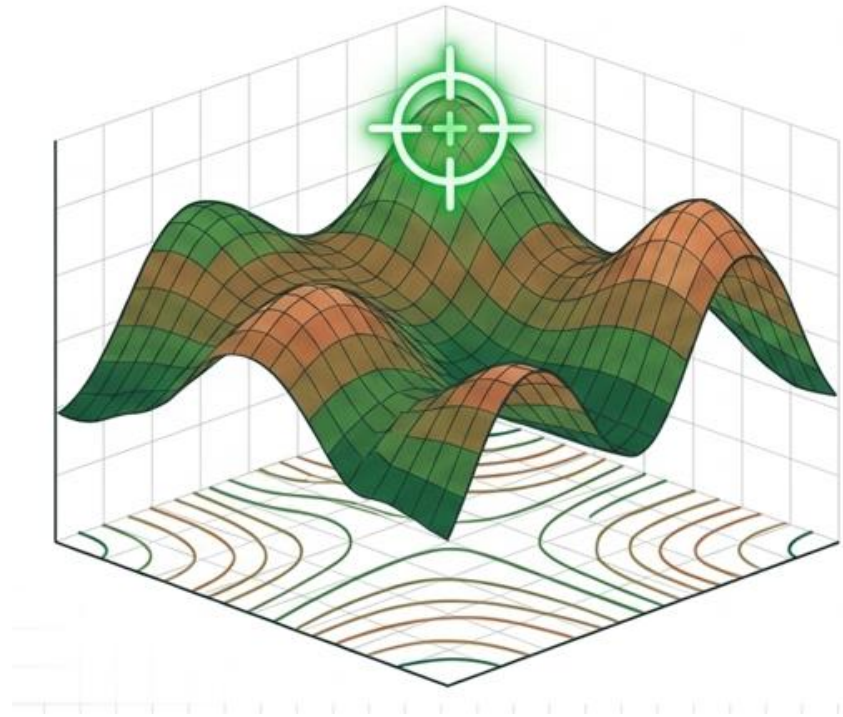
自動承接試驗資料，設定各反應目標後搜尋整體最佳條件，亦可評分指定條件。

[前往多反應最佳化](#)

農業反應曲面法實務分析平台：以R語言建構的完整工具鏈

| 分析階段 | R套件 | 功能 |
|---|---|---------------------------------|
| 潛在因子篩選 | FrF2
DoE.base
stats | 建立 PB 設計、主效應估計、Lenth篩選、Daniel 圖 |
| 試驗設計 | rsm,
FrF2,
DoE.base,
DoE.wrapper | FFD, CCD, BBD, DOD |
| RSM模型分析 | rsm
stats | 建模、缺適性檢定、2D等高線圖/3D曲面圖 |
| 多反應最佳化 | stats | 歸一化轉換、滿意度優化 |
| 此外，互動平台設計和Excel讀取下載，分別使用 shiny 和 readxl、openxlsx 套件 | | |

RSM 的終極目標不是產出圖表，
而是將科研成果轉化為可執行的農業生產建議。



Thanks for Your Attention.
Any Question?