2. 文獻回顧 -- 計數函數

在實驗設計中，設計可分為兩大類 -- 正規設計與非正規設計，兩者最大的差別就在於前者擁有著定義對比子群（defining contrast subgroup）的結構，而後者則無此結構存在。因為數學上常用到的群理論（group theory）可以直接運用到正規設計中，因此目前為止對於正規設計研究已有相當豐富的成果。因為正規設計的許多結果皆是利用群理論導出，故並不容易推廣到非正規設計上。而計數函數利用的是另一套的數學工具 -- 多項式（polynomial）來定義設計，其為實驗設計提供了另一條不同的研究道路。計數函數不僅可適用正規設計，亦可同樣定義在非正規設計上，故藉由計數函數這個橋樑，可將許多正規設計上的性質延伸到非正規設計上。

計數函數發展至今約有七八年的時間，最早是由 Fontana , Pistone 和 Rogantin（2000）論文中提出的，這篇主要是利用計數函數來研究沒有重複試驗點的 2 水準部分因子設計，Ye（2003）則將計數函數推廣到可以有重複試驗點的 2 水準因子設計。之後還有其他關於計數函數論文的研究，在這裡不詳細多加介紹。這邊要注意的一點是，在上面幾篇論文中，都用指標函數一詞代表計數函數，也就是說在以前的論文中，指標函數就是等於計數函數，但之後我們會把這兩者分開定義，兩者可以是不同的兩個函數。

2.1 定義

計數函數利用多項式來表示一個設計。如果將全因子設計中的每個試驗點都當作空間裡的一個點來看，那麼某個設計 E 的計數函數就是代表在全因子設計中每一個點在 E 中出現次數的函數。

定義 2.1 (Ye, 2003)：若 s 為因子的個數，令 D 為一個兩水準全因子設計，水準以-1和 1 來表示，則 D 有 2^s 個點。令 E 為一 s 因子的設計，則 E 為 D 的一個子集，其計數函數為定義在 D 上的函數，若 $r_{\mathbf{x}}$ 表示在設計 E 中，試驗點 $\mathbf{x}$ 出現的次數，則計數函數可定義為

$$C_E(\mathbf{x}) = r_{\mathbf{x}}，\ \mathbf{x} \in D$$

Fontana et al.(2000)證明出每一個計數函數都有唯一的多項式表示法，也就是說，任何一設計都有唯一的多項式計數函數與之對應。每一個設計所對應的計數函數 C_E，若以多項式來表示，即 $C_E(\mathrm{x}) = \sum_{\mathrm{I}\in P} b_{\mathrm{I}} \mathrm{X}_{\mathrm{I}}$，$\mathrm{X}_{\mathrm{I}} = \prod_{i\in \mathrm{I}} x_i$，其中 P 為{1 , 2 ,…, s }裡所有子集形成的集合，亦 $P = \{\phi, \{1\}, \ldots, \{s\}, \{1, s\}, \ldots, \{s-1, s\}, \ldots, \{1, \ldots, s\}\}$，而該多項式的係數可利用內積加總算出，即

$$b_{\mathrm{I}} = \frac{1}{2^s} \cdot \sum_{x\in E} \mathrm{X}_{\mathrm{I}}(x) \tag{2.1}$$

計數函數的常數項為 $\frac{n}{2^s}$，n 為 E 試驗總次數，此常數項代表 E 與 D 試驗次數的比例，而詳細證明及內容可參閱 Ye（2003）。對於 3 水準以上或混合水準的設計，其相對應的計數函數也可定義出來，詳情可參閱 Cheng 和 Ye（2004）。

指標函數也是用多項式來表示。某設計 E 的指標函數為代表在全因子設計中每一個點是否有出現在 E 中的函數，有出現就是 1，沒出現就是 0。故指標函數可定義為

$$F_E(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{如果} \mathbf{x} \in E \\ 0, & \text{如果} \mathbf{x} \in D / E \end{cases}$$

指標函數的推導可利用計數函數，將每個試驗點出現次數大於等於 1 的部分都令為 1，其他的則為 0，然後同樣再利用(2.1)式以內積加總的方式去計算出其指標函數。

例 2.1：有一兩因子設計的設計矩陣如下

$$
\begin{array}{c}
\begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array} \\
\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}
\end{array}
$$

由設計矩陣的內積加總可算出多項式各項的值($x_1x_{2=}\ x_{1*}x_2$)

I	x_1	x_2	x_1x_2
1	1	1	1
1	1	−1	−1
1	−1	1	−1
3	1	1	−1

此設計的計數函數與指標函數皆為

$$C_E(\mathbf{x}) = F_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2^2}(3 + x_1 + x_2 - x_1x_2) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}x_1 + \frac{1}{4}x_2 - \frac{1}{4}x_1x_2$$

例 2.2：E 為一 12 × 4 的非正規設計，其中(1 , −1 , 1 , 1)為重複點，其在 E 中出現了兩次。

$$
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \end{array} \\
\begin{bmatrix}
1 & 1 & -1 & 1 \\
-1 & 1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & 1 & 1 \\
-1 & 1 & -1 & 1 \\
-1 & -1 & 1 & -1 \\
-1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & 1 & -1 \\
-1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & -1 & 1 & 1 \\
-1 & -1 & -1 & -1
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

由設計矩陣的內積加總可算出多項式各項的值，可寫出此設計的計數函數

$$C_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2^4}(12 + 0x_1 + 0x_2 + 0x_3 + 0x_4 + 0x_1x_2 + 0x_1x_3 + 0x_1x_4 + 0x_2x_3 + 0x_3x_4$$
$$- 4x_1x_2x_3 - 4x_1x_2x_4 + 4x_1x_3x_4 - 4x_2x_3x_4 - 4x_1x_2x_3x_4)$$
$$= \frac{3}{4} - \frac{1}{4}x_1x_2x_3 - \frac{1}{4}x_1x_2x_4 + \frac{1}{4}x_1x_3x_4 - \frac{1}{4}x_2x_3x_4 - \frac{1}{4}x_1x_2x_3x_4$$

而其指標函數為

$$F_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2^4}(11 - x_1 + x_2 - x_3 - x_4 + x_1x_2 - x_1x_3 - x_1x_4 + x_2x_3 + x_2x_4 - x_3x_4$$
$$- 3x_1x_2x_3 - 3x_1x_2x_4 + 3x_1x_3x_4 - 3x_2x_3x_4 - 3x_1x_2x_3x_4)$$

在本論文中，我們所要研究的設計中相異的試驗點個數，其即為指標函數常數項的分子部分。比如例 2.1 中，分子部分 3 即為設計相異試驗點；例 2.2，分子 11 為相異試驗點個數。

2.2 無重複點

對於沒有重複點的設計，其計數函數跟指標函數兩者是相同的；如果有重複點的設計，則計數函數與指標函數是不同的。我們可由計數函數算出指標函數，但無法從指標函數推回其計數函數。對$\mathbf{x} \in D$，若其計數函數$C_E(\mathbf{x}) \geq 1$，則指標函數$F_E(\mathbf{x}) = 1$；若計數函數$C_E(\mathbf{x}) = 0$，則指標函數$F_E(\mathbf{x}) = 0$。

而對於沒有重複點的設計 E 來看的話，其計數函數 $C_E(\mathbf{x}) = \sum_{\mathrm{I} \in P} b_{\mathrm{I}} \mathbf{X}_{\mathrm{I}}$ 的值只有 0 或 1，因此

$$C_E^2(\mathbf{x}) = C_E(\mathbf{x})$$

由上面這等式，Fontana et al.(2000)推導出

$$b_\phi - b_\phi^2 = \sum_{I \in P, I \notin \phi} b_I^2 \tag{2.2}$$

P 表示為$\{1,\ldots,s\}$裡面所有的子集所形成的集合，b_ϕ 為計數函數常數項的係數，

其值為試驗次數與全因子設計次數之比例。我們可以用此等式來判定某一設計是否有重複點的存在。

例 2.3 (續例 2.1)：由例 2.1 知此設計之計數函數為 $C_E(\mathbf{x}) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}x_1 + \frac{1}{4}x_2 - \frac{1}{4}x_1x_2$，故 $b_\phi = \frac{3}{4}$，$b_{\{1\}} = \frac{1}{4}$，$b_{\{2\}} = \frac{1}{4}$，$b_{\{1,2\}} = -\frac{1}{4}$。將其代入(2.2)式，可得

$$(\frac{3}{4}) - (\frac{3}{4})^2 = \frac{3}{16} = (\frac{1}{4})^2 + (\frac{1}{4})^2 + (-\frac{1}{4})^2$$

因為等式成立，因此可知此設計沒重複點。

例 2.4(續例 2.2)：由例 2.2 可知計數函數為

$$C_E(\mathbf{x}) = \frac{3}{4} - \frac{1}{4}x_1x_2x_3 - \frac{1}{4}x_1x_2x_4 + \frac{1}{4}x_1x_3x_4 - \frac{1}{4}x_2x_3x_4 - \frac{1}{4}x_1x_2x_3x_4$$

故 $b_0 = \frac{3}{4}$, $b_{\{1,2,3\}} = b_{\{1,2,4\}} = b_{\{2,3,4\}} = b_{\{1,2,3,4\}} = -\frac{1}{4}$, $b_{\{1,3,4\}} = \frac{1}{4}$。將其帶入式子(2.2)，可得 $\frac{3}{4} - (\frac{3}{4})^2 = \frac{3}{16} \neq \frac{5}{16} = (-\frac{1}{4})^2 \cdot 4 + (\frac{1}{4})^2$，因為等式不成立，可知此設計中有重複點的存在。

其他性質比如像設計是否為正規設計、設計投影性（Projection）、正交性（Orthogonality）等，都可由計數函數中獲得其資訊。也可利用計數函數來定義準則以挑選最佳設計，如 minimum aberration，許多原本在正規設計中廣泛被使用的準則，都由於計數函數的出現，而推廣到非正規設計上。因此，計數函數的出現，為非正規設計提供了一個良好的研究工具。