5. Groebner 基底對相異試驗點個數之研究

定義 5.1：令$\boldsymbol{I}$為一個理想，τ 代表為任何一個項次序，則我們定義

$$\begin{aligned}\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I}) &= \left\{x^{\alpha} \mid x^{\alpha}\text{不能被理想}\boldsymbol{I}\text{的Groebner基底裡任何一個元素的領導項所整除}\right\}\\ &= \left\{x^{\alpha} \mid x^{\alpha} \notin \langle \mathrm{LT}(g) \rangle ,\ g \in \boldsymbol{I}\right\}\end{aligned}$$

一般來講，給定不同的項次序，所得到的 Groebner 基底是不一樣的，因此 $\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I})$也會是不同的，但是對於$\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I})$裡的元素個數卻是為一個固定的值。從第三章得知，$\boldsymbol{I}(E)$與$\boldsymbol{I}(\overline{E})$ 分別為兩個理想，而$\boldsymbol{I}(E)$ 的 Groebner 基底並不容易求得出來，所以$\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I}(E))$也就不容易得到；$\boldsymbol{I}(\overline{E})$ 則是可經由$\{x_1^2-1,\ldots,x_n^2-1,C_E(\mathbf{x})\}$這組基底算出其 Groebner 基底，進而得知$\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I}(\overline{E}))$，而下一個定理，將提供一個重要的訊息。

定理 5.1：集合$\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I}(\overline{E}))$的元素個數與$\overline{E}$ 裡的元素個數一樣多。

定理 5.1 的證明可參考 Cox, Little and O'Shea (2007) Section 5.3。$\overline{E}$ 為在 D 中未出現在 E 的試驗點的集合，意即$\overline{E}$ 的元素個數就是未出現在設計 E 中的試驗點個數。故一個設計中有幾個相異的試驗點，可利用定理 5.1 可得，因為$\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I}(\overline{E}))$元素個數與$\overline{E}$ 的元素個數相同，我們將利用計算出$\mathrm{Est}_{\tau}(\boldsymbol{I}(\overline{E}))$裡的元素個數來研究相異試驗點個數，以下將舉幾個例子。

例 5.1：有一2^{3-1}正規設計，令衍生器（generator）為$x_3 = x_1x_2$。則此設計矩陣為

x_1	x_2	$x_3=x_1x_2$
1	1	1
1	−1	−1
−1	1	−1
−1	−1	1

經由內積加總，可算出此設計所對應的計數函數為

$$C_E(\mathbf{x})=\frac{1}{2}(x_1x_2x_3+1)$$

而理想$\boldsymbol{I}(\overline{E})$的基底可為$G=\{x_1^2-1,x_2^2-1,x_3^2-1,x_1x_2x_3+1\}$。令項次序$\tau$為 lex order $(x_1>x_2>x_3)$，首先先計算x_1^2-1與x_2^2-1的S-多項式，故可得

$$S(x_1^2-1,x_2^2-1)=\frac{x_1^2x_2^2}{x_1^2}(x_1^2-1)-\frac{x_1^2x_2^2}{x_2^2}(x_2^2-1)=x_1^2-x_2^2=(x_1^2-1)-(x_2^2-1)$$

因此根據除法定理可知$\overline{S(x_1^2-1,x_2^2-1)}^G=0$，同理可得到$\overline{S(x_1^2-1,x_3^2-1)}^G=0$與$\overline{S(x_2^2-1,x_3^2-1)}^G=0$，接下來做$x_1^2-1$與$x_1x_2x_3+1$的$S$-多項式，即

$$S(x_1^2-1,x_1x_2x_3+1)=\frac{x_1^2x_2x_3}{x_1^2}(x_1^2-1)-\frac{x_1^2x_2x_3}{x_1x_2x_3}(x_1x_2x_3+1)=-x_1-x_2x_3$$

所以$\overline{S(x_1^2-1,x_1x_2x_3+1)}^G=-x_1-x_2x_3$，根據 Buchberger's Algorithm，把$x_1+x_2x_3$加入G中，此時集合$G=\{x_1^2-1,x_2^2-1,x_3^2-1,x_1x_2x_3+1,x_1+x_2x_3\}$。繼續再對$x_1^2-1$與$x_1+x_2x_3$的$S$-多項式的運算，可得

$$S(x_1^2-1,x_1+x_2x_3)=\frac{x_1^2}{x_1^2}(x_1^2-1)-\frac{x_1^2}{x_1}(x_1+x_2x_3)=-(x_1x_2x_3+1)。$$

所以可得$\overline{S(x_1^2-1,x_1+x_2x_3)}^G=0$，再對$x_2^2-1$與$x_1x_2x_3+1$做$S$-多項式，則

$$S(x_2^2-1,x_1x_2x_3+1)=\frac{x_1{x_2}^2x_3}{{x_2}^2}(x_2^2-1)-\frac{x_1{x_2}^2x_3}{x_1x_2x_3}(x_1x_2x_3+1)=-x_1x_3-x_2$$

$$=-x_3(x_1+x_2x_3)-x_2(x_3^2-1)$$

同樣的由除法定理，可得到$\overline{S\left(x_2^2-1,x_1x_2x_3+1\right)}^G=0$，此時，再對$x_3^2-1$與$x_1x_2x_3+1$做$S-$多項式運算，則得到

$$S\left(x_3^2-1,x_1x_2x_3+1\right)=\frac{x_1x_2x_3{}^2}{x_3^2}\left(x_3^2-1\right)-\frac{x_1x_2x_3{}^2}{x_1x_2x_3}\left(x_1x_2x_3+1\right)=-x_1x_2-x_3$$
$$=-x_2\left(x_1+x_2x_3\right)-x_3\left(x_2^2-1\right)$$

故x_3^2-1與$x_1x_2x_3+1$的S-多項式餘式$\overline{S\left(x_3^2-1,x_1x_2x_3+1\right)}^G=0$。最後，對$x_2^2-1$與$x_1+x_2x_3$，以及$x_3^2-1$與$x_1+x_2x_3$做$S$-多項式，可得到

$$S\left(x_2^2-1,x_1+x_2x_3\right)=\frac{x_1x_2^2}{x_2^2}\left(x_2^2-1\right)-\frac{x_1x_2^2}{x_1}\left(x_1+x_2x_3\right)=-x_1-x_2^3x_3$$
$$=-x_2x_3\left(x_2^2-1\right)-\left(x_1+x_2x_3\right)$$

$$S\left(x_3^2-1,x_1+x_2x_3\right)=\frac{x_1x_3^2}{x_3^2}\left(x_3^2-1\right)-\frac{x_1x_3^2}{x_1}\left(x_1+x_2x_3\right)=-x_1-x_2x_3^3$$
$$=-x_2x_3\left(x_3^2-1\right)-\left(x_1+x_2x_3\right)$$

因此根據上面運算皆可知道$\overline{S\left(x_2^2-1,x_1+x_2x_3\right)}^G=\overline{S\left(x_3^2-1,x_1+x_2x_3\right)}^G=0$，故$G=\left\{x_1^2-1,x_2^2-1,x_3^2-1,x_1x_2x_3+1,x_1+x_2x_3\right\}$是$\boldsymbol{I}(\overline{E})$的Groebner基底。由其可得$\mathrm{Est}_\tau(\boldsymbol{I}(\overline{E}))=\{1,x_2,x_3,x_2x_3\}$。因為集合$\mathrm{Est}_\tau(\boldsymbol{I}(\overline{E}))$中有4個元素，表示$\overline{E}$有4個點，因此此設計有$2^3-4=4$個相異的試驗點。

例 5.2（續2.2）：E 為一 12 × 4 的非正規設計，此設計中$(1,-1,1,1)$為重複點，出現了兩次。設計的計數函數為

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

理想$\boldsymbol{I}(\overline{E})$的基底為

$$\{x_1^2-1,\ x_2^2-1,\ x_3^2-1,\ x_4^2-1,$$

$$\frac{3}{4}-\frac{1}{4}x_1x_2x_3-\frac{1}{4}x_1x_2x_4+\frac{1}{4}x_1x_3x_4-\frac{1}{4}x_2x_3x_4-\frac{1}{4}x_1x_2x_3x_4\}$$

接下來，我們將考慮兩種不同的項次序狀況。

(1)項次序τ為lex order $(x_1>x_2>x_3>x_4)$時，

利用軟體Mathematica可算出理想$\boldsymbol{I}(\overline{E})$的Groebner基底為

$$\{x_2^2-1,\ x_3^2-1,\ x_4^2-1,\ x_2x_4-x_2+x_3x_4-x_3,$$

$$x_2x_3-x_2+x_3x_4-x_4,\ x_1-x_2+\frac{3}{2}x_3x_4-\frac{1}{2}x_3-\frac{1}{2}x_4-\frac{1}{2}\}$$

因此$\mathrm{Est}_\tau\left(\boldsymbol{I}(\overline{E})\right)=\{1,x_2,x_3,x_4,x_3x_4\}$，因為 集合$\mathrm{Est}_\tau\left(\boldsymbol{I}(\overline{E})\right)$中有5個元素，

所以$\overline{E}$ 中有5個點，意即E有$2^4-5=11$個相異試驗點。

(2)項次序τ為Grlex order $(x_1>x_2>x_3>x_4)$時，

$\boldsymbol{I}(\overline{E})$的Groebner基底為

$$\{x_1^2-1,\ x_2^2-1,\ x_3^2-1,\ x_4^2-1,\ x_3x_4+\frac{2}{3}x_1-\frac{2}{3}x_2-\frac{1}{3}x_3-\frac{1}{3}x_4-\frac{1}{3},$$

$$x_2x_4-\frac{2}{3}x_1-\frac{1}{3}x_2-\frac{2}{3}x_3+\frac{1}{3}x_4+\frac{1}{3},\ x_2x_3-\frac{2}{3}x_1-\frac{1}{3}x_2+\frac{1}{3}x_3-\frac{2}{3}x_4+\frac{1}{3},$$

$$x_1x_4-\frac{1}{3}x_1-\frac{2}{3}x_2+\frac{2}{3}x_3-\frac{1}{3}x_4-\frac{1}{3},\ x_1x_3-\frac{1}{3}x_1-\frac{2}{3}x_2-\frac{1}{3}x_3+\frac{2}{3}x_4-\frac{1}{3},$$

$$x_1x_2+\frac{1}{3}x_1-\frac{1}{3}x_2-\frac{2}{3}x_3-\frac{2}{3}x_4+\frac{1}{3}\}$$

領導項集合為$\{x_1^2,\ x_2^2,\ x_3^2,\ x_4^2,\ x_3x_4,\ x_2x_4,\ x_2x_3,\ x_1x_4,\ x_1x_3,\ x_1x_2\}$， 故不可被領導項中任何一個整除的項所成形的集合$\mathrm{Est}_\tau\left(\boldsymbol{I}(\overline{E})\right)=\{1,x_1,x_2,x_3,x_4\}$，

此集合共有 5個元素，故$\overline{E}$ 中有5個點，意即E有$2^4-5=11$個相異試驗點。

因此由(1)與(2)可知，不管選取那一個項次序，$\mathrm{Est}_\tau\left(\boldsymbol{I}(\overline{E})\right)$裡的元素個數都是相同的。

因此，瞭解$\mathrm{Est}_\tau\left(I(\overline{E})\right)$的元素個數可幫助我們瞭解設計中相異試驗點，下列定理可幫助找出設計中相異試驗點的下限是多少。

定理 5.2：若對理想 $I(\overline{E})$的基底$G_0=\{x_1^2-1,\ldots,x_n^2-1,C_E(\mathbf{x})\}$，作了$n$次$S$-多項式運算，標記為$S_1$，$S_2$，…，$S_n$，可得到Groebner基底。令$G_i$代表在作了$S_i$後所有餘式加進$G_0$所形成的集合，$K_i$為在作了$S_i$後不可被$G_i$中所整除的元素所形成的集合，則$K_i\subseteq K_j$，$\forall\ j<i\le n$。

證明：

我們討論兩種狀況：

(i)當$\overline{S_{i+1}}^{G_i}=0$時，則$K_{i+1}=K_i$。

(ii)當$\overline{S_{i+1}}^{G_i}\ne 0$時，令$S_{i+1}=f$，此時$G_i=\{f_1,f_2,\ldots,f_m\}$

故$S_{i+1}=f=a_1f_1+a_2f_2+\ldots+a_mf_m+r$，因此$\overline{S_{i+1}}^{G_i}=r$

令$K_i=$不能被$\mathrm{LT}(f_1),\mathrm{LT}(f_2),\ldots,\mathrm{LT}(f_m)$中任何一個整除的單項集合。

$K_{i+1}=$不能被$\mathrm{LT}(f_1),\mathrm{LT}(f_2),\ldots,\mathrm{LT}(f_m),\mathrm{LT}(r)$中任何一個整除的單項集合。

$C=$不能$\mathrm{LT}(r)$整除的單項集合。

(1) 當$x\in K_{i+1}$

$\Rightarrow x\in K_i\cap C$

$\Rightarrow x\in K_i$ and $x\in C$

$\Rightarrow x\in K_i$

所以$K_{i+1}\subseteq K_i$

(2) 當$x\in K_i$

$\Rightarrow$ 令$x=\mathrm{LT}(r)\in K_i$

$\Rightarrow x\notin K_{i+1}$ （根據除法定理）

所以 $K_i\not\subset K_{i+1}$

由(1)與(2)可知，$K_{i+1}\subset K_i$，即得證。

因此，當考慮(i)與(ii)兩種狀況時，則可知$K_i\subseteq K_j$，$\forall\ j<i\le n$。

定理5.2提供了當我們找$I(\overline{E})$的Groebner基底時所做的Buchberger's演算法過程中，$K_i\subseteq K_j$，$\forall\ j<i\le n$，而$K_n=\mathrm{Est}_\tau\left(I(\overline{E})\right)$，故可以得到$\mathrm{Est}_\tau\left(I(\overline{E})\right)\subseteq K_i$，因此做到第$i$次$S$-多項式運算時，集合$K_i$裡的元素個數一定大於等於$\mathrm{Est}_\tau\left(I(\overline{E})\right)$，所以令作到第$i$次$S$-多項式運算時集合$K_i$裡的元素個數為$m_i$個，則可知道不

在設計中的試驗點個數小於或等於 m_i；換句話說，就能得到設計的相異試驗點個數至少有 $2^n - m_i$ 個（這裡的 n 為因子個數）。我們可利用相異點個數下界知道至少可以估計幾個因子效應。

綜合以上章節，我們可從一設計的計數函數，找出設計中相異試驗點的個數。其演算過程如下：

步驟 1：

若 n 為其因子個數，現有一兩水準的設計 E，其計數函數為 $C_E(\mathbf{x})$，而且此設計之設計理想為 $\boldsymbol{I}(E)$，補設計理想為 $\boldsymbol{I}(\overline{E})$，利用補設計理想 $\boldsymbol{I}(\overline{E})$，找出 $\boldsymbol{I}(\overline{E})$ 的基底為

$$\left\{x_1^2 - 1，x_2^2 - 1，\ldots，x_n^2 - 1，C_E(\mathbf{x})\right\}$$

步驟 2：

對 $\boldsymbol{I}(\overline{E})$ 基底 $\left\{x_1^2 - 1，x_2^2 - 1，\ldots，x_n^2 - 1，C_E(\mathbf{x})\right\}$，利用 Buchberger's A1gorithm，找出 $\boldsymbol{I}(\overline{E})$ 的 Groebner 基底。令此 Groebner 基底為 $G = \{f_1，f_2，\ldots，f_m\}$。

步驟 3：

利用 $\boldsymbol{I}(\overline{E})$ 的 Groebner 基底，找出 Groebner 基底中每個元素的領導項，分別為 $\mathrm{LT}(f_1)$，$\mathrm{LT}(f_2)$，…，$\mathrm{LT}(f_m)$，而不能被其中任何一個領導項整除的項所形成的集合，令其為 $\mathrm{Est}_\tau\left(\boldsymbol{I}(\overline{E})\right)$。

步驟 4：

若 $\mathrm{Est}_\tau\left(\boldsymbol{I}(\overline{E})\right)$ 中元素的個數為 s，則設計 E 共有 $2^n - s$ 個相異試驗點。