等水平部分因子设计中的最优准则及其等价性

宁建辉[a]　　艾明要[b]　　覃　红[a]
（a 华中师范大学数学与统计学学院　　武汉）
（b 北京大学数学与统计学院　　北京）

摘　要　如何选择最优部分因子设计，及其用什么准则来判断其“优良性”是部分因子设计中一个非常重要的问题。近年来一些新的准则，如 $NB-$袧寀、$WV-$袧寀、广义最小混杂准则（Generalized minimum aberration,简记为 GMA）等，被用来比较部分因子设计。本文通过研究这些准则之间的联系，发现它们在等水平因子设计中具有等价性。另外，我们还发现这些准则与均匀性准则也有很好的一致性。

关键词：部分因子设计，广义最小混杂准则，$NB-$袧寀，$WV-$袧寀，均匀性准则

1 引言

在试验设计领域，部分因子设计因大大的节省了人力物力而被广泛的使用。为了选择“最优”部分因子设计，在效应排序原则和效应稀疏原则下，针对正规部分因子设计我们可以采用分辨力准则（Box,Hunter and hunter,1978），最小混杂准则（Fries and Hunter,1980;Franklin ,1984）；对于非正规部分因子设计我们可以用最小 G_2-混杂准则（Tang and Deng,1999），最小广义混杂准则（Ma and Fang,2001）及广义最小混杂准则（Xu and wu,2001）。最近，Ai and Zhang（2003）又提出了 $WV-$袧寀,它可以比较一般的部分因子设计。

值得注意的是，以上几种准则都不仅考虑了设计的投影性质，而且还考虑到了设计的正交性。本文我们考虑 n 次试验的 q^s 等水平设计,即这个设计有 n 次试验，s 个因子且每个因子有 q 个水平，这里 n 次试验可以是相同的。q 水平记为 $0,1$ㄛ$..,q-1$。若一个设计 $d \in D(n,q^s)$ 中的任一因子的诸水平出现相同的次数，任两个因子的水平组合也出现相同的次数，则称 d 为正交设计。正交设计为正交正列的特殊情形。若 d 为一个 n 次试验 s 个 q 水平因子强度为 m 的正交正列，则它的任意 m 个因子的所有水平组合都出现 n/q^m 次。不难看出正交正列中存在如下的重要投影性质：当投影到任意 m 个因子上，此投影设计是 q^m 完全因子设计的 n/q^m 次重复。最近，Fang，Lu and Winker（2002）提出用 $NB-$袧寀来度量因子设计的水平组合的平衡性，它也可被看作是正交正列强度准则的推广。

均匀试验设计（Wang and Fang，1980；Fang and Wang，1994；Fang et al.,2000）已被广泛的应用到许多领域。与均匀试验设计有关的均匀性准则近年来也受到广泛的关注。均匀性准则追求最小的偏差，并且适用于正规和非正规因子设计。设计的均匀性是一种几何概念，似乎与统计无关，但近年来，许多学者发现在部分

因子设计和超饱和试验设计等的许多方面，均匀性准则都非常有用。例如，Fang and Mukerjee (2000), Fang et al.(2000), Ma and Fang.(2001), Fang et al.(2002), Hickernell and Liu (2002), Liu and Hickernell (2002), Ma et al.(2003) and Qin and Fang(2003)。

本文给出了 GMA、WV、NB 和均匀性四种准则之间的联系，我们的结果显示，在等水平部分因子设计中，GMA、WV 和 NB 三种准则是相互等价的，且均匀性准则与以上三种准则也是几乎等价的。在第二节中我们将回顾以上四种准则。第三节给出了 GMA、WV 和 NB 三种准则之间的等价关系。第四节给出了在离散偏差下的均匀性准则和 WV/NB 准则之间的解析联系，并且得出了它们强相关的结论。

设 wt(u)是向量 u = (u_1,⋯,u_s)的重量，也就是 u 中的非零元素的个数，wt(u - v) 是 u 和 v 两个向量的 Hamming 距离，$G_q=\{0,1,\ldots,q-1\}$ 为模为 q 的整数环，| ϕ | 为集合 ϕ 的基数，$\delta_{u,v}$ 为向量 u 和 v 的 Kronecker 记号，也即当 $u=v$ 时 $\delta_{u,v}$=1，否则 $\delta_{u,v}=0$。一个 n 次试验和 s 个 q 水平因子的等水平设计是 $G=G_q\times\ldots\times G_q$ 中 n 个行向量的集合或 n×s 矩阵，其中每行代表一次试验，每列代表一个因子。

2 GMA、WV、NB 和均匀性准则

假设 $\{\chi_{u_i}^{(i)}, u_i\in G_q\}$ 是第 i 个因子的正交对照系数。即对任意 $u_i, v_i\in G_q$，有

$$\sum_{x_i\in G_q}\chi_{u_i}^{(i)}(x_i)\overline{\chi_{v_i}^{(i)}(x_i)}=q\delta_{u_i,v_i}$$

其中 $\overline{\chi_{v_i}^{(i)}}(.)$ 为 $\chi_{v_i}^{(i)}(.)$ 的共轭复数且 $\chi_0^{(i)}(.)=0$。可以用张量积定义如下对照系数：

$$\chi_u(x)=\prod_{i=1}^{s}\chi_{u_i}^{(i)}(x_i),$$

$u=(u_i,\ldots,u_s)\in G, x=(x_i\ldots,x_s)\in G$。

容易证明 $\{\chi_u, u\in G\}$ 是正交对照系数，也即对任意 $u,v\in G$ 有，

$$\sum_{x\in G}\chi_u(x)\overline{\chi_v(x)}=q^s\delta_{u,v},$$

对于部分因子设计 $d\in D(n,q^s)$，Xu and Wu(2001)定义如下两个量

$$J_u(d)=\sum_{x\in d}\chi_u(x),\quad \forall u\in G \tag{1}$$

$$A_j(d)=n^{-2}\sum_{u\in G,\omega t(u)}J_u^2(d),\quad j=1,\ldots,s \tag{2}$$

称向量 $(A_1(d),\ldots,A_s(d))$ 为 d 的广义字长型。对于任意两个 d_1 和 $d_2\in D(n,q^s)$，若 $A_i(d_1)=A_i(d_2)$，$1\le i\le t-1$，且 $A_i(d_1)<A_i(d_2)$，则称 d_1 有比 d_2 小的混杂。如果在 $D(n,q^s)$ 中不存在比 d_1 更小混杂的设计，则称 d_1 有广义最小混杂（Generalized minimum aberration,简记为 GMA）

假设 ϕ 是集合 $\{1,2,\ldots,s\}$ 的任一非空子集且

$$u_\phi=\{u=(u_1,\ldots,u_s)|u\in G,\forall i\notin\phi, u_i=0\}。$$

Ai and Zhang（2003）定义了如下的量：

$$WV_m(d)=q^{-2m}\sum_{|\phi|=m}\left[\sum_{u\in u_\phi}J_u^2(d)-n^2\right]/\binom{s}{m} \tag{3}$$

向量$(WV_1(d),\ldots,WV_s(d))$给出了设计d投影到 1 到 s 维子设计上的投影性质。从效应排序原则的观点看。我们应尽量寻找使向量$(WV_1(d),\ldots,WV_s(d))$序贯地小的设计。Ai and Zhang(2003)称此为$WV-$衵案，它是在两水平因子设计中的$V-$衵案（Tang(2001)）的推广。

下面我们回顾$NB-$衵案，这一准则是由 Fang，Lu and Winker（2002）针对等水平设计提出的。对设计d的任意m列$(d_{l_1},d_{l_2},\ldots,d_{l_m})$定义

$$B_{l_1\ldots l_m}(d)=\sum_{\alpha_1\ldots\alpha_{m1}}(n_{\alpha_1\ldots\alpha_m}^{l_1\ldots l_m}-n/q^m)^2 ,$$

其中$n_{\alpha\ldots\alpha_m}^{l_1\ldots l_m}$表示$(d_{l_1},d_{l_2},\ldots,d_{l_m})$中水平组合为$(\alpha_1\cdots\alpha_m)$出现的次数。这里的求和针对所有 q^{m}种水平组合。从定义可以看出，当$B_{l_1\ldots l_m}(d)=0$时，则由$(d_{l_1},d_{l_2},\ldots,d_{l_m})$形成的子设计是一强度为 m 的正交正列，因此$B_{l_1\ldots l_m}(d)$度量了$(d_{l_1},d_{l_2},\ldots,d_{l_m})$与强度为 m 的正交正列的接近程度。进一步定义

$$B_m(d)=\sum_{1\le l_{11}<\ldots<l_m\le s}B_{l_1\ldots l_m}(d)/\binom{s}{m} \tag{4}$$

其中$1\le m\le s$.称向量$(B_1(d),B_2(d),\ldots ㄛ B_s(d))$为平衡型(Balance Pattern)。显然，若当$1\le j\le m$时有$B_j(d)=0$，则d是强度为 m 的正交正列;反之，也成立。$B_m(d)$度量了设计d与强度为 m 的正交正列接近的程度。为了确保所用的设计尽量接近高强度正交正列，则我们所选的设计d的平衡型应该是所有设计中平衡型序贯最小的。这就是所谓的$NB-$衵案。

本文用离散偏差来度量均匀性。关于离散偏差的详细内容请看 Qin and Fang (2003)。给定$d\in D(n,q^s)$,它的离散偏差值，记为$D(d;a,b)$，可以由以下公式计算得到。

$$[D(d;a,b)]^2=-\left[\frac{a+(q-1)b}{q}\right]^s+\frac{a^s}{n^2}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\left(\frac{a}{b}\right)^{\psi_{kl}} \tag{5}$$

其中 a，b 是常数且$a>b>0$，ψ_{ij}为设计 d 第i行和j行之间的 hamming-距离。均匀性准则也即是寻找具有最小离散偏差值的设计。

3 GMA、WV、NB 准则的相互等价性

以上准则中 GMA 已作为比较、筛选部分因子设计的有效而系统的方法。Xu and Wu(2001)通过研究处理对照(treatment contrasts)和方差分析模型，说明 GMA 准则与处理对照的选择是无关的，因此，也与模型无关。最小混杂准则和最小 G_2-准则都是 GMA 在特殊情况下的特殊例子，对于等水平因子设计它也与最小广义混杂等价。因此，GMA 具有很好的统计合理性。

Ai and Zhang(2003)得出了$\{WV_m(d)\}$和$\{A_m(d)\}$之间有如下等价关系

$$WV_m(d)=\frac{n^2}{q^{2m}\binom{s}{m}}\sum_{v=1}^{m}\binom{s-v}{s-m}A_v(d) \tag{6}$$

其中$1\le m\le s$。从等式（6）我们不难得出 GMA 准则与 WV 准则是等价的。

我们知道，设计d是强度为 m 的正交正列等价于$A_j(d)=0,\ j=1,\ldots,m$根据（6）设计d是强度为 m 的正交正列等价于$WV_j(d)=0,\ j=1,\ldots,m$。因此，$WV_m(d)$与$B_m(d)$一样也度量设计d与强度为 m 的正交正列的接近程度。所以我们可以推测它们之间也有等价性。下面的证明可以看出，等价性确实存在。

假设$\phi_m=\{l_1,\ldots,l_m\}\subset\{1,\ldots,s\}$。容易证明

$$\sum_{u\in u_{\phi_m}}J_u^2(d)=q^m\sum_{\alpha_1,\ldots,\alpha_m}(n_{\alpha_1\ldots\alpha_m}^{l_1\ldots l_m})^2 \tag{7}$$

由（3），（4），（7）式我们可以得到

$$\begin{aligned}B_m(d)&=\sum_{1\le l_1<\ldots<l_m\le s}\left[\sum_{\alpha_1,\ldots,\alpha_m}(n_{\alpha_1\ldots\alpha_m}^{l_1\ldots l_m})^2-n^2/q^m\right]\Big/\binom{s}{m}\\&=q^mWV_m(d)\end{aligned} \tag{8}$$

因此$WV_m(d)$与$B_m(d)$之间只差一常数，这说明$WV-$袧窠和$NB-$袧窠是等价的。归纳上述讨论我们得到：

定理 1 在等水平部分因子设计中， $NB-$袧窠、$WV-$袧窠和广义最小混杂准则（GMA）是等价的。

由于广义字长型的定义和计算都非常复杂，且涉及较强的的数学工具，如复数正交对照系数和编码理论，这对于那些没有很深数学背景的实际工作者来说是较困难的。$WV-$袧窠也存在相同的问题，而$NB-$袧窠中的$B_m(d)$则相对来说较容易理解，计算上也简单了许多。所以我们建议，在实际应用中应尽量用$NB-$袧窠作为选择最优部分设计的准则。

4 均匀性准则与 WV/NB 准则之间的近似等价性

Qin and Fang(2003)得到了$D\ (d;a,b)$与$\{A_j(d)\}$之间的如下关系：

$$D^2(d;a,b)=\left[\frac{a+(q-1)b}{q}\right]^s\sum_{j=1}^{s}\left[\frac{a-b}{a+(q-1)b}\right]^j A_j(d) \quad (9)$$

下面的定理给出了均匀性准则与 WV/NB 准则之间的紧密联系。

定理 2 设$d\in D(n,q^s)$。则

$$D^2(d;a,b)=\frac{b^s}{n^2}\sum_{v=1}^{s}q^v\left(\frac{a-b}{b}\right)^v\binom{s}{v}WV_v(d) \quad (10)$$

$$=\frac{b^s}{n^2}\sum_{v=1}^{s}\left(\frac{a-b}{b}\right)^v\binom{s}{v}B_v(d) \quad (11)$$

注意等式（9），由于 $a>b>0$ ，$(a-b)/(a-b+qb)$ 非负，则式中 $A_j(j)$ 的系数随着 j 的增长而呈指数减少， 而对于具有较小混杂的等水平部分因子设计，在较小的 j 上有较小的 $A_j(j)$ 值，因此一般来说也就有较小的 $D^2(d;a,b)$ 值。换句话说，均匀性准则和 GMA 几乎是一致的。又由定理 1 和定理 2 我们知道，均匀性准则与 $NB-$祹棸、$WV-$祹棸 几乎是一致的。

另外，定理 2 中给出了均匀性和正交性之间的联系，这也为我们使用均匀设计提供了理论上的支持。

致谢 感谢方开泰教授、谢民育教授对本文的宝贵建议！本文得到了教育部留学回国人员启动基金和湖北省自然科学基金的支持。

参考文献

[1] Ai, M.Y. and Zhang, R.C.(2003). Projection justification of generalized minimum aberration for asymmetrical fractional factorial designs. *Metrika*, to appear.

[2] Box, G.E.P, Hunter, W.G. and Hunter, J.S.(1978). Statistics for experimenters. Wiley, New York.

[3] Fang, K.T., Lin, D.K.J., Winker, P. and Zhang, Y.(2000). Uniform design: theory and applications. *Technometrics* 42, 237-248.

[4] Fang, K.T., Lu, X. and Winker, P. (2003). Lower bounds for centered and wrap-around L_2-discrepancies and constructions of uniform designs by threshold accepting.

甲、*J. Complexity*, to appear.

[5] Fang, K.T., Ma, C.X. and Mukerjee, R.(2002). Uniformity in fractional factorials. In: Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, eds. By K.T. Fang, F.J. Hickernell , and H. Niederreiter, Springer-Verlag, Berlin.

[6] Fang, K.T. and Mukerjee, R.(2000). A connection between uniformity and aberration in regular fractions of two-level factorials. *Biometrika* 87, 173-198.

[7] Fang, K.T. and Wang, Y.(1994). *Number-Theoretic Methods in Statistics*. London: Chapmanand Hall.

[8] Franklin, M.F.(1984). Constructing tables of minimum aberration p^{n-m} designs. *Technometrics* 26, 225-232.

[9] Fries, A. and Hunter, W.G.(1980). Minimum aberration 2^{k-p} designs. *Technometrics* 22,601-608.

[10] Hickernell, F.J. and Liu, M.Q.(2002). Uniform designs limit aliasing. *Biometrika*, 89, 893-904.

[11] Liu, M.Q. and Hickernell, F.J.(2002). $E(s^2)$-optimality and minimum discrepancy in 2-level supersaturated designs. *Statist*. *Sinica* 12,931-939.

[12] Ma, C.X., Fang, K.T. and Lin, D.K.J.(2003). A note on uniformity and orthogonality. *J. Statist. Planning and Inference*, 113,323-334.

[13] Qin, H. and Fang, K.T.(2003). Discrete discrepancy in factorial designs. *Metrika*, to appear.

[14] Tang, B. and Deng, L.Y.(1999). Minimum G_2-aberration for nonregular fractional designs. *Ann. Statist*. 27, 1914-1926.

[15] Wang, Y. and Fang, K.T.(1981). A note on uniform distribution and experimental designs. *Chin. Sci. Bull*. 26, 485-489.

[16] Xu, H. and Wu, C.F.J.(2001). Generalized minimum aberration for asymmetrical fractional factorial designs. *Ann. Statist*. 29,549-560.