

國立清華大學

碩士論文

最佳 Σ 樣態設計建構法

Construction of Optimal Designs under Σ -pattern



系所別：統計學研究所 組別：工業統計組

學號姓名：111024501 許朔瑋 (Shuo-Wei Hsu)

指導教授：孫誠佑 博士 (Dr. Cheng-Yu Sun)

中 華 民 國 113 年 7 月

摘要

在電腦實驗裡，空間填充設計是一種經常被考慮的設計，其目標是使所有設計點盡可能地均勻散佈在實驗空間中。日前，[Tian and Xu \(2022\)](#)提出了空間填充樣態（space-filling pattern）準則，用於評估具有正交陣列結構的設計之空間填充性。對於一給定的陣列，空間填充樣態計算了它在各種不同網格上，設計點分佈的均勻程度。並且，所有網格依照其分割數被賦予不同的重要性。網格數小的較為重要，需要更優先被考慮。由於這種做法忽略了網格的維度，故在一些最新研究中，空間填充樣態被進一步拆分。本文著眼於其中一種拆分方式，稱為 Σ 樣態，旨在建構出 Σ 樣態下的最佳設計。方法上，我們先利用二水準正規設計生成小規模的最佳四水準設計，再以遞迴方式找出規模較大的最佳設計。經由模擬顯示，本文所建構之設計相較於一些現有設計，所訓練出之模型有更佳的預測表現。

Abstract

In computer experiments, space-filling designs are often considered as a design approach, aiming to ensure that all design points are as uniformly distributed as possible within the experimental space. Recently, [Tian and Xu \(2022\)](#) proposed the space-filling pattern criterion for evaluating the space-filling property of designs with orthogonal array structures. For a given array, the space-filling pattern calculates the uniformity of the distribution of design points across various grids. Furthermore, different grids are assigned varying levels of importance based on their number of divisions, with grids having fewer divisions being deemed more important and prioritized. Since this approach ignores the dimensions of the grids, the space-filling pattern has been further subdivided in some recent studies. This paper focuses on one of these subdivisions, referred to as the Σ -pattern, which aims to construct the optimal design under the Σ -pattern. Methodologically, we first use two-level regular designs to generate small-scale optimal four-level designs and then recursively find larger-scale optimal designs. Simulations demonstrate that the designs constructed in this paper yield models with better predictive performance compared to some existing designs.

目錄

摘要.....	i
Abstract.....	ii
一、緒論.....	3
二、符號、定義和背景.....	6
2.1 空間填充樣態.....	7
2.2 分層樣態.....	8
2.3 Σ 樣態.....	10
2.4 基於正規設計建構強度 $2+$ 之強正交陣列.....	10
三、 Σ 最佳設計之建構.....	13
3.1 試驗次數為 $N = 2^4$ 時之建構方法.....	14
3.2 試驗次數為 $N = 2^5$ 時之建構方法.....	17
3.3 更高試驗數之情形.....	20
四、數值結果.....	24

五、 結論	27
附錄（定理的證明）	28
參考文獻	31



一、緒論

在許多科學研究中，電腦實驗是不可或缺的工具。例如，利用電腦程式模擬一物理或化學現象，只要給定輸入值，電腦便可計算輸出結果。若要瞭解輸入值與輸出值之間的函數關係，可以透過統計建模的方法去估計真實模型的樣貌。而為了在有限的實驗成本下準確估計真實模型，我們就需要適當地挑選輸入值。由於電腦實驗中輸入值與輸出值之間的關係往往是高度複雜的，在挑選輸入值（設計點）時經常被考慮的一種性質為空間填充性（space-filling），也就是希望設計點在實驗空間中均勻分佈，使空間中每一部分所攜帶的資訊都能被擷取，從而穩健地估計真實模型。

衡量設計點均勻性的準則有很多，大略可分為兩類。其中一類是以設計點之間的距離 (distance) 作為衡量的基準，例如：[Johnson, Moore and Ylvisaker \(1990\)](#)提出的最大最小距離準則 (maximin distance criterion)。另一類是以設計點的經驗分布與均勻分布間的偏差 (discrepancy) 作為衡量基準，例如：[Hickernell \(1998\)](#)所提出的中心 L_2 偏差 (centered L_2 -discrepancy)。一旦選定準則，可通過演算法搜尋對應的最佳設計。然而不同於此，本文探討的設計是正交陣列 (orthogonal arrays)，並且著重在這種陣列的理論建構。正交陣列用於電腦實驗最早可追溯到[McKay, Beckman and Conover \(2000\)](#)所提出的拉丁超立方設計 (Latin hypercube design，簡記為 LHD)。日前，[Tian and Xu \(2022\)](#)提出了「空間填充樣態 (space-filling pattern)」，此準則非常適合用來評估一正交陣列的空間填充性質。更具體地說，空間填充樣態考慮所有投影子空間上的網

格，計算設計點在每一個網格 (grid) 上的分佈均勻程度。並且，所有網格會按照其分割數，被賦予不同的重要性。分割數少的比分割數多的更為重要，需要更優先被比較。因此，空間填充樣態為一種「字長型態 (word length pattern)」類型的準則。後來，[Shi and Xu \(2023\)](#)基於空間填充樣態，又進一步提出了「分層樣態 (stratification pattern)」。該樣態是把相同分割數的網格再細分成不同維度計算。換句話說，在比較兩種不同網格的重要次序時，先比較分割數，再比較維度。比如， 4×2 比 $2 \times 2 \times 2$ 網格重要，因為兩者分割數同樣都是 8，但前者維度為 2，後者為 3。另一方面，[Sun, Cheng and Phoa \(2024\)](#)也提出和分層樣態相似的「 Σ 樣態」，但該樣態是先比較維度，再比分割數。例如，在 Σ 樣態下， 4×4 網格比 $2 \times 2 \times 2$ 重要。

本文考慮的問題為：在 Σ 準則下該如何找出最佳的設計。近年來，字長型態類型準則下的最佳的設計受到許多關注，其中一個重要研究結果是由[Shi and Tang \(2019\)](#)所提出。該研究使用了代數理論，讓強度 $2+$ 的強正交陣列 (strong orthogonal array of strength two plus) 擁有最好的 $2 \times 2 \times 2$ 網格填充性，可以視為分層準則下的最佳設計。然而我們發現，一樣採用[Shi and Tang \(2019\)](#)的建構方法，但將目標換成 Σ 樣態下的最佳設計，理論推導的工作雖然較為複雜，但依然可以進行。並且，所得到的最佳設計，通常具有更好的空間填充性質。例如，當一設計試驗數為 16，因子數為 7 時，分層樣態下的最佳設計固然可以均勻填充所有分割數為 8 的網格，包含 $2 \times 2 \times 2$ 、 2×4 和 4×2 網格，但是它無法均勻填充任何 4×4 網格。反之， Σ 樣態下的最佳設計可以均勻填充所有 2×4 和 4×2 網格，以及絕大部分的 4×4 和 $2 \times 2 \times 2$ 網格。

本文剩餘的內容安排如下。首先在第二章節中，我們引入本研究所需用

到的符號、定義、以及背景知識，其中包含了本文核心關注的 Σ 樣態。而在第三章節中，我們提出了系統性建構 Σ 最佳設計的方法。爲了展示這些設計的實用性，第四章節呈現了簡單的數值模擬，將它們與現有設計進行比較。最後，對於這份研究工作的結論以及日後的研究方向均總結在第五章。所有理論之證明，除了部分重要成果外，其餘皆放在附錄。



二、符號、定義和背景

假設一實驗有 m 個因子，分別為 F_1, \dots, F_m 。令第 j 個因子 F_j 的水準取自 $\mathbb{Z}_{z_j} = \{0, 1, \dots, z_j - 1\}$ ， $j = 1, \dots, m$ ，則每個 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m) \in \mathbb{Z}_{z_1} \times \dots \times \mathbb{Z}_{z_m}$ 被稱為一個 F_1, \dots, F_m 的水準組合。將 N 個水準組合蒐集成為一集合，該集合即可視為一「具 N 次試驗的」設計。通常，我們將這個集合寫成一個 $N \times m$ 的矩陣 D ，稱為設計矩陣，其每一列對應到一個水準組合，每一行對應到一個因子。若 D 滿足對任何 $N \times t$ 的子矩陣，所有可能的水準組合出現的次數皆相同，則稱 D 為強度 t 的正交陣列，並記作 $\text{OA}(N, m, z_1 \times \dots \times z_m, t)$ 。當 $z_1 = \dots = z_m = z$ ，簡記為 $\text{OA}(N, m, z, t)$ 。一個 $\text{OA}(N, m, z, t)$ 保證了其設計點在任意 t 維子空間能夠均勻填充所有 $z \times \dots \times z$ 網格。

接著我們需引述 [Tian and Xu \(2022\)](#) 對於 χ 特徵值 (χ -characteristic) 的定義。首先假設 $z = s^p$ 。對 $i = 1, \dots, p$ ，定義從 \mathbb{Z}_{s^p} 映至 \mathbb{Z}_s 的函數 $f_i(x) = \lfloor x/s^{p-i} \rfloor \bmod s$ ，即 $f_i(x)$ 為 x 在 s 進位表示下第 i 位數的值。接著，對 $x \in \mathbb{Z}_{s^p}$ 且 $x \neq 0$ ，定義 $\rho(x) = p + 1 - \min\{i : f_i(x) \neq 0, i = 1, \dots, p\}$ ，而 $\rho(0) = 0$ 。 $\rho(x)$ 的意義為：用 s 進位表示 x 所需的位數。對所有 $u, x \in \mathbb{Z}_{s^p}$ ，定義反向內積 $\langle u, x \rangle = f_1(u)f_p(x) + \dots + f_p(u)f_1(x)$ 。最後，對所有 $u, x \in \mathbb{Z}_{s^p}$ ，定義 $\chi_u(x) = \eta^{\langle u, x \rangle}$ ，其中 $\eta = \exp\{2\pi i/s\}$ ， $i = \sqrt{-1}$ 。請注意在本文中，除了此處，其他時候 i 皆用做索引變數 (index variable)，故不另訂符號。當遇到多個因子的情況，我們需將上述這些定義推廣到多維度版本：對所有 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m) \in \mathbb{Z}_{s^p}^m$ ，定義 $\rho(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^m \rho(u_i)$ 。並且，對所有

$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m) \in \mathbb{Z}_{s^p}^m$ ，定義 $\chi_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^m \chi_{u_i}(x_i)$ 。

定義一. 令 D 為一個 $N \times m$ 的 $z = s^p$ 水準設計矩陣。對任意 $\mathbf{u} \in \mathbb{Z}_{s^p}^m$ ，定義 $\chi_{\mathbf{u}}(D) = \sum_{\mathbf{x} \in D} \chi_{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ ，稱為 D 的 χ 特徵值。

在下面的幾個小節，我們將介紹用來評估空間填充性的三種不同字長型態準則，其中 χ 特徵值亦扮演了非常重要的角色。有關 χ 特徵值的更多討論，以及其更一般情況下的定義，讀者可參考 [Sun, Cheng and Phoa \(2024\)](#)。我們用以下性質做為這一小節的結尾，其證明可參考 [Tian and Xu \(2022\)](#)。

性質一. 給定試驗次數 N 、因子數 m 及水準數 $z = s^p$ ，一設計 D 可由其所有特徵值 $\chi_{\mathbf{u}}(D)$ 唯一決定。

請注意上述性質中，「唯一決定」是指所有可能的水準組合（共 z^m 種），其每一種出現在 D 的次數是確定的。換言之，當 D 表示成一設計矩陣時，我們允許對 D 做任意列互換。

2.1 空間填充樣態

空間填充樣態由 [Tian and Xu \(2022\)](#) 所提出，為一種字長型態準則，用來評估一設計的空間填充性質，以下為正式定義。


定義二. 令 D 為一個 $N \times m$ 的 $z = s^p$ 水準設計矩陣。定義

$$S_j(D) = \frac{1}{N^2} \sum_{\rho(\mathbf{u})=j} |\chi_{\mathbf{u}}(D)|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\rho(\mathbf{u})=j} \chi_{\mathbf{u}}(D) \overline{\chi_{\mathbf{u}}(D)}。 \quad (1)$$

設計 D 的空間填充樣態為

$$(S_1(D), \dots, S_{mp}(D))。$$

若兩設計 D_1 和 D_2 的空間填充樣態不同，必存在最小的正整數 r 使得 $S_r(D_1) \neq S_r(D_2)$ 。若 $S_r(D_1) < S_r(D_2)$ ，則我們稱 D_1 在空間填充樣態下優於 D_2 。如若一設計 D 是通過逐項極小化 $S_1(D), \dots, S_{mp}(D)$ 所得到，便稱其為空間填充樣態最佳設計。

利用 χ 特徵的定義可以發現， $S_j(D)$ 評估了設計 D 在分割數為 s^j 的所有網格上的分佈均勻程度，數值越小代表越均勻。若 $S_j(D) = 0$ ，則表示所有分割數為 s^j 的所有網格皆達到均勻分佈。空間填充樣態是基於一非常直觀的原則而訂定的：若設計 D 無法均勻填充分割較為粗糙（分割數小）的網格，則 D 必然也無法均勻填充分割較為細緻（分割數大）的網格。因此，追求網格均勻填充性的優先順序，應從粗糙到細緻。[Tian and Xu \(2022\)](#) 稱此原則為「空間填充階層準則（space-filling hierarchy principle）」。後續小節所介紹的分層樣態和 Σ 樣態，皆是以空間填充樣態為基礎再做細分。

2.2 分層樣態

本小節我們回顧[Shi and Xu \(2023\)](#)所提出的分層樣態。首先，對所有 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m) \in \mathbb{Z}_{s^p}^m$ ，定義 $wt(\mathbf{u})$ 為向量 \mathbf{u} 中非零元素的個數。

定義三. 對一大小為 $N \times m$ 且水準數 $z = s^p$ 之設計矩陣 D ，定義其分層樣態為一 $m \times mp$ 矩陣，其中第 (i, j) 位元素為

$$\xi_{i,j}(D) = \frac{1}{N^2} \sum_{wt(\mathbf{u})=i} \sum_{\rho(\mathbf{u})=j} |\chi_{\mathbf{u}}(D)|^2.$$

若設計 D 滿足在所有 $N \times m$ 且 $z = s^p$ 之設計中， D 依照 $\xi_{1,1} \gg \xi_{1,2} \gg \xi_{2,2} \gg \xi_{1,3} \gg \dots \gg \xi_{3,3} \gg \dots \gg \xi_{1,p} \gg \dots \gg \xi_{p,p} \gg \xi_{2,p+1} \gg \dots \gg \xi_{p+1,p+1} \gg \dots \gg$

$\xi_{m,mp}$ 重要順序逐項最小化 $\xi_{i,j}$ ，則稱 D 有最佳分層樣態。其中在符號「 \gg 」表示，在其左側之數值比在其右側者重要，需要更優先被比較（越小越好）。

請注意在定義三中，某些 $\xi_{i,j}$ 必為 0。舉例來說，在二維投影空間裡不存在切割數為 s 的網格，因此 $\xi_{2,1}$ 的值必為 0，一般來說，只要當 $j < i$ 或 $j > ip$ 時， $\xi_{i,j}$ 的值必為 0。

對電腦實驗而言，低維度投影空間的均勻性質，比起高維度的情形往往被視作是更重要的。然而在 2.1 小節所介紹的空間填充樣態中，每一項 $S_j(D)$ 評估的是： D 在特定切割數網格上的均勻程度，不論這些網格的維度是高或低。舉例來說，對一 4 水準設計 D ，其 $S_3(D)$ 綜合評估了 D 在 2×4 、 4×2 和 $2 \times 2 \times 2$ 三種網格上的均勻程度。但分層樣態會將 $S_3(D)$ 分為 $\xi_{2,3}(D)$ 和 $\xi_{3,3}(D)$ ，前者評估二維度的 2×4 和 4×2 網格，優先於後者評估的三維度 $2 \times 2 \times 2$ 網格。

此外，若令 $A_i(\cdot)$ 為 Xu and Wu (2001) 提出的廣義字長型態（generalized word length pattern）的第 i 項， $S_j(\cdot)$ 為 Tian and Xu (2022) 提出的空間填充樣態的第 j 項，則我們有以下的關係式：

$$A_i(D) = \frac{1}{N^2} \sum_j \xi_{i,j}(D) = \frac{1}{N^2} \sum_{wt(\mathbf{u})=i} |\chi_{\mathbf{u}}(D)|^2,$$

$$S_j(D) = \frac{1}{N^2} \sum_i \xi_{i,j}(D) = \frac{1}{N^2} \sum_{\rho(\mathbf{u})=j} |\chi_{\mathbf{u}}(D)|^2.$$

因此，分層樣態可以看成上述兩種準則的細分，雖然廣義字長型態並不經常被當作空間填充性準則。在下一個章節，我們將介紹 Sun, Cheng and Phoa (2024) 所提出的類似於分層樣態的一種新準則。

2.3 Σ 樣態

分層樣態之所以被提出，重要的原因之一是：低維度的均勻度應比高維度的來得更重要。若結合空間填充階層原則，便直接引申出一個問題：兩個不同的網格 R_1 和 R_2 ，前者分割數小，但維度大，那麼 R_1 和 R_2 誰比較重要？在分層樣態下， R_1 會被優先考量。然而，相反的做法也未嘗不可。Sun, Cheng and Phoa (2024) 考慮了優先比較維度的方法，雖然同樣需要計算 $\xi_{i,j}(D)$ ，但是將逐項極小化的順序改為

$$\xi_{1,1} \gg \cdots \gg \xi_{1,p} \gg \xi_{2,2} \gg \cdots \gg \xi_{2,2p} \gg \cdots \gg \xi_{m,m} \gg \cdots \gg \xi_{m,mp}。$$

若 D 是按照該重要順序逐項極小化所得之設計，稱 D 有最佳 Σ 樣態，或稱其為 Σ 最佳設計。在本文的第四章節，我們會透過模擬的方式展現 Σ 最佳設計在某些情況下，相較其他空間填充準則下之最佳設計，有更好的表現。

2.4 基於正規設計建構強度 $2+$ 之強正交陣列

本小節我們回顧 He, Cheng and Tang (2018) 提出的一套利用正規設計建構空間填充設計的方法。首先我們需定義強度 $2+$ 的強正交陣列。

定義四. 令 D 為一個 $N \times m$ 的 4 水準設計矩陣。若 D 可以均勻填滿任意 4×2 、 2×4 網格，則稱 D 為強度 $2+$ 的強正交陣列，記做 $SOA(N, m, 4, 2+)$ 。為符號簡單，當 N 和 m 不重要時，我們亦將上述的 D 記做 $SOA(2+)$ 。不難發現， D 為一 $SOA(2+)$ 若且唯若 $\xi_{1,1}(D) = \xi_{1,2}(D) = \xi_{2,2}(D) = \xi_{2,3}(D) = 0$ ，即 D 的分層樣態之前 4 項都達到 0。因此， $SOA(2+)$ 可視為分層樣態下的近似最佳設計。在此我們需強調， $SOA(2+)$ 的定義並不侷限於 4 水準設計，但由於本文旨在探討 4 水準設計之建構，因而採用簡化的定義。

He, Cheng and Tang (2018) 構造 SOA(2+) 的方法如下。令 T_k 為一個具有 k 個獨立因子的 2 水準飽和正規設計。若將 k 個獨立因子記為 e_1, \dots, e_k ，則 T_k 可表示為 e_1 到 e_k 的所有交互作用。例如 $T_3 = \{e_1, e_2, e_3, e_1e_2, e_2e_3, e_1e_3, e_1e_2e_3\}$ 。若將 T_k 表示成設計矩陣，則它具有 $N = 2^k$ 次試驗、 $m = 2^k - 1$ 個因子，且矩陣中每一行對應到一個交互作用，矩陣的元素皆為 1 或 -1 。He, Cheng and Tang (2018) 考慮了如下公式來構造設計 D ：

$$D = A + B/2 + 3/2, \quad (2)$$

其中矩陣 A 和 B 皆是由 T_k 中挑選 m 個元素作為矩陣的行而得到 (允許重複挑選)。不難發現， D 是一個具有 $N = 2^k$ 次試驗、 m 個因子的設計矩陣，且 D 中的元素皆為 0、1、2 或 3，亦即 D 是一 4 水準設計。令 $A = (a_1, \dots, a_m)$ ，並令 \bar{A} 為 T_k 中未在 A 中被使用的所有效應所形成的集合，He, Cheng and Tang (2018) 證明了以下定理。

定理一. 公式 (2) 可建構出 $D \in \text{SOA}(2^k, m, 4, 2+)$ 若且唯若存在正交矩陣 A 使得任對意 $a_i \in A$ ，皆有 $b_i, b'_i \in \bar{A}$ 使得 $a_i = b_i b'_i$ 。

事實上，上述定理同時也描述了矩陣 $B = (b_1, \dots, b_m)$ 的挑選方法。關於此定理所陳述的充要條件，有另一個等價敘述： \bar{A} 是一個二階飽和設計 (second order saturated design)，有關於二階飽和設計以及其和 SOA(2+) 的關聯，見 Block and Mee (2003) 和 Cheng, He and Tang (2021)。在下一個章節，我們將利用公式 (2) 來建構 Σ 最佳的 4 水準設計。更具體的說，我們的目標是使得 D 滿足 $\xi_{1,1}(D) = \xi_{1,2}(D) = \xi_{2,2}(D) = \xi_{2,3}(D) = 0$ ，並且讓 $\xi_{2,4}(D)$ 極小化 (但不為 0)。請注意，若是在 $\xi_{1,1}(D) = \xi_{1,2}(D) = \xi_{2,2}(D) = \xi_{2,3}(D) = 0$ 的前提

下讓 $\xi_{3,3}(D)$ 極小化（但不為 0），則屬於分層樣態下的最佳化，相關內容可參考 [Shi and Tang \(2019\)](#)



三、 Σ 最佳設計之建構

在這個章節中，我們將利用公式 (2) 建構 Σ 最佳設計，並且，我們僅考慮 4 水準設計的情形，亦即 $s = 2$ 、 $p = 2$ 、且 $z = s^p = 4$ 。採用和之前相同的符號，令 T_k 為 e_1, \dots, e_k 的所有交互作用（含主效應），也就是 $N = 2^k$ 且 $m = 2^k - 1$ 的飽和正規設計。考慮 $A = (a_1, \dots, a_m)$ 、 $B = (b_1, \dots, b_m)$ 兩矩陣，它們皆是由 T_k 中挑選 m 行所形成。我們的目標是建構 $D = A + B/2 + 3/2$ ，使得 D 為 $SOA(2+)$ ，同時 D 可均勻填滿最多的 4×4 網格。數學上，此目標等價於使 $\xi_{1,1}(D) = \xi_{1,2}(D) = \xi_{2,2}(D) = \xi_{2,3}(D) = 0$ ，再讓 $\xi_{2,4}(D)$ 極小化。因此，可視為 Σ 樣態下的最佳化處理。事實上，給定試驗次數 N ，只要因子數足夠少，便可使用現有方法構造出 D 使其均勻填滿所有 4×4 網格，亦即 $\xi_{2,4}(D) = 0$ 。然而，本文著重在因子數較大的情況，也就是讓 D 可均勻填充最多但不是所有的 4×4 網格。以下兩個性質說明了我們具體考慮的因子數範圍，其證明可參考 [Wu \(1989\)](#)。

性質二. 令 D 由公式 (2) 生成，且 D 的試驗次數為 $N = 2^k$ 。若 $m \leq m'$ 時，則必存在 A 和 B 使得 D 為一 $OA(N, m, 4, 2)$ 。此處若 k 為偶數時 $m' = (N - 1)/3$ ，若 k 為奇數時 $m' = (N - 5)/3$ 。

接著，我們還需引入以下性質。雖然數學上並不困難，但它是證明定理二的關鍵。

性質三. 令 $D = (d_1, \dots, d_m)$ 由公式 (2) 生成，且 D 是 $SOA(2+)$ ，則對於任意的 $i \neq j$ ，以下敘述均等價。

(1) (d_i, d_j) 均勻填滿 4×4 網格。

(2) (a_i, a_j, b_i, b_j) 是 $OA(N, m, 2, 4)$ 。

(3) $a_i b_i$ 、 $a_j b_j$ 、 b_i 以及 b_j 是 T_k 中完全相異的四個效應。

下面一個定理是本文大部分結果的基礎，它提供了 $\xi_{2,4}(D)$ 的一個下界。雖然此下界在一些情況下不是精確的 (tight)，但足以幫助我們論證部分設計的 Σ 最佳性。

定理二. 令 $D = (d_1, \dots, d_m)$ 由公式 (2) 生成，且 D 是 $SOA(2+)$ ，則 D 中至少有 $3m - N + 1$ 對 (d_i, d_j) 不能均勻填充 4×4 網格。

證明. 根據定理一， A 中不能有重複的效應，因此 \bar{A} 中至多只會有 $N - 1 - m$ 個效應。此外，根據 [He, Cheng and Tang \(2018\)](#)， $B = (b_1, \dots, b_m)$ 以及 $AB = (a_1 b_1, \dots, a_m b_m)$ 中的所有 $2m$ 個效應必屬於 \bar{A} 。那麼我們可推論出，這 $2m$ 個效應當中至少會有 $2m - (N - m - 1) = 3m - N + 1$ 個是重複的。又性質三說明了重複的效應必導致 D 失去 4×4 的均勻填充性質，故得證。 \square

請注意，雖然在邏輯上 $3m - N + 1 < 0$ 並不造成矛盾，但是會導致上述定理並沒有實際提供 $\xi_{2,4}(D)$ 一個下界。不過如同前述，我們已經限制了因子數 $m \geq (N - 1)/3$ ，因此 $3m - N + 1$ 必不為負數。在接下來的章節，我們會描述不同因子數情形下構造 Σ 最佳設計的方法。

3.1 試驗次數為 $N = 2^4$ 時之建構方法

在 $N = 2^4$ 時且 $m \leq 5$ 時，則根據性質二，必可構造 D 使所有 4×4 網格被均勻填充。因此本小節首先考慮 $m = 6$ 的情形。根據定理二，至少會有

$3 \times 6 - 2^4 + 1 = 3$ 對 (d_i, d_j) 無法均勻填充 4×4 網格（以下簡稱失均）。以下我們將提出一種構造方法使 D 恰好有 3 對 (d_i, d_j) 失均。第一步，需先將 T_4 的 15 個效應分割成 5 個彼此不相交的子集合 G_1, \dots, G_5 。並且，每一個 G_i 都可以表示成 $G_i = (g_{i1}, g_{i2}, g_{i3})$ ，其中 $g_{i1}g_{i2} = g_{i3}$ 。Wu (1989) 證明了上述的分割確實存在。雖然分割的方法並不唯一，但為簡化符號和方便討論，以下建構過程中，我們僅考慮特例，它足以被推廣到一般化情形。將 T_4 做如下分割：

$$\begin{aligned} G_1 &= (1, 2, 12), G_2 = (3, 4, 34), G_3 = (13, 24, 1234), \\ G_4 &= (23, 124, 134), G_5 = (123, 14, 234). \end{aligned} \quad (3)$$

任取兩個 G_i 和 G_j ，此處取 G_4 和 G_5 為例，一般情形下的分割方法可見 Wu (1989)。固定 $G_4 = (23, 124, 134)$ ，調整 G_5 中三個效應的順序，使得 G_4 和 G_5 對應的行相乘之後，得到的三個效應在 G_1, G_2 和 G_3 之中各出現一次。將調整過後的 G_5 記做 $G'_5 = (g'_{51}, g'_{52}, g'_{53})$ 。舉例而言，可以讓 G_5 調整成 $G'_5 = (14, 123, 234)$ ，則 $G_4 G'_5 = (1234, 34, 12)$ 。接著取 A 和 B 如下：

$$\begin{aligned} A &= (g_{41}, g'_{51}, g_{42}, g'_{52}, g_{43}, g'_{53}) = (23, 14, 124, 123, 134, 234), \\ B &= (g_{42}g'_{52}, g_{42}g'_{52}, g_{43}g'_{53}, g_{43}g'_{53}, g_{41}g'_{51}, g_{41}g'_{51}) = (12, 12, 1234, 1234, 34, 34). \end{aligned} \quad (4)$$

此處 B 是由 $G_4 G'_5$ 向右平移，再讓每一個效應重複兩次得到。最後，構造 $D = A + B/2 + 3/2$ 。我們有以下定理，證明（一般化情形適用）請見附錄。

定理三. 在所有 (2) 所能構造的試驗數為 16，因子數為 6 的 SOA(2+) 中，透過上述步驟構造出的 D 為 Σ 最佳，且 $D = (d_1, \dots, d_6)$ 之中恰好有 3 對 (d_i, d_j) 不能填滿 4×4 網格。

接著考慮 $m = 7$ 的情形。根據定理二，至少會有 $3 \times 7 - 2^4 + 1 = 6$ 對 (d_i, d_j) 失均。以下我們將提出一種構造方法使 D 恰好有 6 對 (d_i, d_j) 失均。第一步，仍需先將 T_4 按照 (3) 分割成 G_1, \dots, G_5 。同先前的理由，下面陳述僅考慮特例。任取兩個 G_i 和 G_j ，假設取 G_1 和 G_2 。計算 $G_1G_2 = \{13, 24, 1234\}$ 。接著，調整 G_2 的順序得 G'_2 ，使 G_1G_2 和 $G_1G'_2$ 每個位置的效應沒有交集。舉例而言，可以將 G_2 調整成 $G'_2 = \{4, 34, 3\}$ ，則 $G_1G'_2 = \{14, 234, 123\}$ 。排除 G_1 、 G_2 、 G_1G_2 和 $G_1G'_2$ 所使用的 12 個效應後， T_4 中仍有 $15 - 12 = 3$ 個效應，稱「剩餘效應」。以本例而言，剩餘效應為 $(r_1, r_2, r_3) = (23, 124, 134)$ 。構造 $D = A + B/2 + 3/2$ ，其中取

$$A = (G_1G_2, G_1G'_2, r_1) = (13, 24, 1234, 14, 234, 123, 23),$$

$$B = (G_1, G_1, r_2) = (1, 2, 12, 1, 2, 12, 23)。$$

定理四. 在所有 (2) 所能構造的試驗數為 16，因子數為 7 的 SOA(2+) 中，透過上述步驟構造出的 D 為 Σ 最佳，且 $D = (d_1, \dots, d_7)$ 之中恰好有 6 對 (d_i, d_j) 不能填滿 4×4 網格。

對於 $m = 8, 9, 10$ 的情形，我們未能以系統化方式建構 Σ 最佳設計，故對所有可能的情況進行窮舉。值得一提的是，此時找到的 Σ 最佳設計都沒有達到定理二之界限 $3m - N + 1$ 。表一列出了 $m = 6, \dots, 10$ 對應的 Σ 最佳設計之矩陣 A 、 B 以及 AB 。對於 $m > 10$ ，由於 SOA(2+) 不存在，故不屬於本文討論範圍。

表一: $N = 16$ 時, Σ 最佳設計之 A 、 B 與 AB

m	具有最佳 Σ 準則之設計所對應之 A 、 B 與 AB
$m = 6$	$A = \{23, 14, 124, 123, 134, 234\}$ $B = \{12, 12, 1234, 1234, 34, 34\}$ $AB = \{13, 24, 3, 4, 1, 2\}$
$m = 7$	$A = \{13, 24, 1234, 14, 234, 123, 23\}$ $B = \{1, 2, 12, 1, 2, 12, 124\}$ $AB = \{3, 4, 34, 4, 34, 3, 134\}$
$m = 8$	$A = \{1, 2, 12, 3, 13, 23, 14, 24\}$ $B = \{34, 34, 124, 1234, 134, 4, 234, 123\}$ $AB = \{134, 234, 4, 124, 4, 234, 123, 134\}$
$m = 9$	$A = \{23, 124, 134, 14, 123, 234, 13, 24, 1234\}$ $B = \{2, 12, 1, 1, 12, 2, 1, 2, 12\}$ $AB = \{3, 4, 34, 4, 3, 34, 3, 4, 34\}$
$m = 10$	$A = \{1, 2, 3, 4, 12, 13, 14, 23, 24, 34\}$ $B = \{1234, 1234, 1234, 1234, 134, 124, 123, 124, 123, 123\}$ $AB = \{234, 134, 124, 123, 234, 234, 234, 134, 134, 124\}$

3.2 試驗次數為 $N = 2^5$ 時之建構方法

在 $N = 2^5$ 且 $m \leq 9$ 時, 則根據性質二, 必可構造 D 使所有 4×4 網格被均勻填充。因此, 我們的構造法將會著重於 $m = 10, 11$ 的情形。首先, 需將 T_5 的 31 個效應分割成 9 個兩兩不相交的子集合 G_1, \dots, G_9 以及 4 個未被使用的效應, 稱剩餘效應。和之前相同, 此處每一個 G_i 都可以表示成 $G_i = \{g_{i1}, g_{i2}, g_{i3}\}$, 其中 $g_{i1}g_{i2} = g_{i3}$ 。Wu (1989) 證明了上述的分割確實存在。例如, 可將 T_5 做如下分割:

$$G_1 = (1, 2, 12), G_2 = (4, 5, 45), G_3 = (14, 25, 1245),$$

$$G_4 = (24, 35, 2345), G_5 = (124, 235, 1345), G_6 = (34, 125, 12345),$$

$$G_7 = (134, 15, 345), G_8 = (234, 1235, 145), G_9 = (1234, 135, 245)。$$

將剩餘效應 $(3, 13, 23, 123)$ 和 G_1 合併且記做 R 。可以證明，不論如何分割， R 必可表示為 $R = \{r_1, r_2, r_3, r_1r_2, r_2r_3, r_1r_3, r_1r_2r_3\}$ 。本例中，恰好有 $r_1 = 1$ ， $r_2 = 2$ 且 $r_3 = 3$ 。當 $m = 10$ 時，取 A 和 B 如下：

$$A = (r_1, r_1r_3, g_{21}, g_{31}, \dots, g_{91}),$$

$$B = (r_2, r_2r_3, g_{22}, g_{32}, \dots, g_{92})。$$

本例子中，

$$A = (1, 13, 4, 14, 24, 124, 34, 134, 234, 1234),$$

$$B = (2, 23, 5, 25, 35, 235, 125, 15, 1235, 135),$$

$$AB = (12, 12, 45, 1245, 2345, 1345, 12345, 345, 145, 245)。$$

根據性質三，若令 $D = A + B/2 + 3/2$ ，則 D 僅有一組 (d_i, d_j) 失均，為 Σ 最佳。此結論對於一般化情形也都成立，記載為定理如下，其證明請見附錄。

定理五. 在所有 (2) 所能構造的試驗數為 32，因子數為 10 的 SOA(2+) 中，透過上述步驟構造出的 D 為 Σ 最佳，僅有一對 (d_i, d_j) 不能填滿 4×4 網格。

因子數 $m = 11$ 時的構造方法與 $m = 10$ 大致雷同。取 A 和 B 如下：

$$A = (r_1, r_2, r_1r_2, g_{21}, g_{31}, \dots, g_{91}),$$

$$B = (r_3, r_3, r_3, g_{22}, g_{32}, \dots, g_{92})。$$

本例子中，

$$A = (1, 2, 12, 4, 14, 24, 124, 34, 134, 234, 1234),$$

$$B = (3, 3, 3, 5, 25, 35, 235, 125, 15, 1235, 135),$$

$$AB = (13, 23, 123, 45, 1245, 2345, 1345, 12345, 345, 145, 245)。$$

根據性質三，若令 $D = A + B/2 + 3/2$ ，則 D 僅有三組 (d_i, d_j) 失均，為 Σ 最佳。此結論對於一般化情形也都成立，記載為定理如下，其證明請見附錄。

定理六. 在所有 (2) 所能構造的試驗數為 32，因子數為 11 的 SOA(2+) 中，透過上述步驟構造出的 D 為 Σ 最佳，恰有三對 (d_i, d_j) 不能填滿 4×4 網格。

請注意，對於 $N = 32$ 之設計，當 $m = 10$ 和 11 時， $3m - N + 1$ 分別為 -1 和 2 。因此，定理五和六建構的設計 D 並沒有達到定理二中的界限。正因如此，本小節構造方法的 Σ 最佳性之證明較為複雜，具體內容請見附錄。

對於 $m = 12$ 到 15 的情況，雖然尚未找到系統化建構最佳設計的方式，但確實都存在達到定理二界限的設計。表二給出了當 $N = 2^5$ 時， $m = 10, \dots, 15$ 的 Σ 最佳設計應如何構造。最後，對於 $m = 16, \dots, 22$ ，雖然存在 SOA(2+)，但由於規模較大且時間有限，對應設計將留作未來探討。

表二: $N = 32$ 時， Σ 最佳設計之 A 、 B 與 AB

m	具有最佳 Σ 準則之設計所對應之 A 、 B 與 AB
$m = 10$	$A = \{1, 2, 4, 234, 1234, 134, 14, 124, 24, 34\}$ $B = \{3, 3, 5, 1235, 135, 15, 25, 235, 35, 125\}$ $AB = \{13, 23, 45, 145, 245, 345, 1245, 1345, 2345, 12345\}$
$m = 11$	$A = \{1, 2, 12, 4, 234, 1234, 134, 14, 124, 24, 34\}$ $B = \{3, 3, 3, 5, 1235, 135, 15, 25, 235, 35, 125\}$ $AB = \{13, 23, 123, 45, 145, 245, 345, 1245, 1345, 2345, 12345\}$
$m = 12$	$A = \{2, 12, 5, 234, 1234, 1235, 135, 15, 25, 124, 24, 125\}$ $B = \{3, 13, 4, 35, 123, 1, 34, 134, 14, 235, 35, 34\}$ $AB = \{23, 23, 45, 245, 4, 235, 145, 345, 1245, 1345, 2345, 12345\}$
$m = 13$	$A = \{1, 2, 12, 4, 234, 1234, 1235, 135, 15, 25, 124, 24, 125\}$ $B = \{3, 3, 13, 5, 35, 234, 123, 134, 134, 14, 235, 35, 34\}$ $AB = \{13, 23, 23, 45, 245, 145, 5, 45, 345, 1245, 1345, 2345, 12345\}$
$m = 14$	$A = \{1, 2, 12, 45, 1234, 1235, 135, 145, 245, 15, 1245, 124, 24, 125\}$ $B = \{3, 3, 13, 4, 1345, 123, 14, 134, 34, 234, 14, 235, 35, 34\}$ $AB = \{13, 23, 23, 5, 25, 5, 345, 35, 235, 12345, 25, 1345, 2345, 12345\}$
$m = 15$	$A = \{1, 2, 3, 4, 12, 13, 14, 23, 24, 34, 123, 124, 1245, 234, 2345\}$ $B = \{135, 1234, 345, 12345, 35, 345, 15, 5, 5, 12345, 245, 25, 134, 125, 1234\}$ $AB = \{35, 134, 45, 1235, 1235, 145, 45, 235, 245, 125, 1345, 145, 235, 1345, 15\}$

3.3 更高試驗數之情形

在這個章節，我們將說明對於規模更大的 Σ 最佳設計，可以用規模較小的 Σ 最佳設計以遞迴方式建構出來。事實上，遞迴建構是實驗設計領域中的一種常見手法。我們用以下定理作為本小節之開端。

定理七. 令 D 是由公式 (2) 所構造的 SOA(2+), 且試驗次數為 $N = 2^k$, 因子數為 m 。若 $m < (N - 1)/2$ 且 $D = (d_1, \dots, d_m)$ 恰好有 $3m - N + 1$ 對 (d_i, d_j) 不能填滿 4×4 網格。定義由 T_{k+2} 中取出的矩陣 A^* 和 B^* 如下：

$$A^* = (A, A \cdot (k+1), A \cdot (k+2), A \cdot (k+1)(k+2), k+1),$$

$$B^* = (B, B \cdot (k+2), B \cdot (k+1)(k+2), B \cdot (k+1), k+2)。$$

則 $D^* = A^* + B^*/2 + 3/2$ 為公式 (2) 所能建構的試驗數為 $4N$, 因子數為 $4m + 1$ 的 Σ 最佳設計。

證明. 首先， D^* 為 2^{k+2} 次試驗、 $4m + 1$ 因子為顯然。故僅需計算 D^* 中失均的 (d_i, d_j) 個數。已知失均的 (d_i, d_j) 個數可透過計算 B^* 以及 A^*B^* 中重複使用的因子數得到，而 $A^*B^* = (AB, AB \cdot (k+1)(k+2), AB \cdot (k+1), AB \cdot (k+2), (k+1)(k+2))$ ，因此，假設 B 和 AB 中的某一因子 \bar{a}_i 被使用了 t 次，則在 B^* 以及 A^*B^* 中， $\bar{a}_i, \bar{a}_i \cdot (k+1), \bar{a}_i \cdot (k+2), \bar{a}_i \cdot (k+1)(k+2)$ 各自會被使用了 t 次，故 D^* 失均的 (d_i, d_j) 個數會是原本 D 失均的 (d_i, d_j) 個數的 4 倍，也就是 $4 \times (3m - 2^k + 1) = 12m - 2^{k+2} + 4$ 。透過定理二，可知對於一 2^{k+2} 次試驗、 $4m + 1$ 因子之設計，其失均的 (d_i, d_j) 個數至少為 $3 \times (4m + 1) - 2^{k+2} + 1 = 12m - 2^{k+2} + 4$ ，而 D^* 達到該界限，因此 D^* 為 2^{k+2} 次試驗、 $4m + 1$ 因子的 Σ 最佳設計。 \square

範例一. 考慮如下的矩陣 A 和 B :

$$A = (23, 14, 124, 123, 134, 234) ,$$

$$B = (12, 12, 1234, 1234, 34, 34) .$$

事實上，這是我們在3.1小節中講述構造方法時所舉的例子（見 (4)）。根據定理三， $D = A + B/2 + 3/2$ 滿足定理七之條件。令

$$A^* = (A, A \cdot 5, A \cdot 6, A \cdot 56, 5) ,$$

$$B^* = (B, B \cdot 6, B \cdot 56, B \cdot 5, 6) .$$

則透過 $D^* = A^* + B^*/2 + 3/2$ 可構造 $N = 2^6$ 、 $m = 25$ 之 Σ 最佳設計。

將定理七搭配3.1小節的 16×6 和 16×7 Σ 最佳設計，可以構造出一些因子數為 $4m + 1$ 的設計。我們將這些設計列於表三。可以發現，能夠得到的設計並不多，故接下來我們嘗試將定理七改進，使其用途更廣。

表 三: 定理七所能建構之 Σ 最佳設計

試驗次數 N	最佳 Σ 設計之因子數 m
$N = 2^6$	$m = 25, 29$
$N = 2^7$	$m = 49, 53, 57, 61$
$N = 2^8$	$m = 101, 117$

定理八. 令 D_1, D_2 由公式 (2) 用 A_1, B_1 和 A_2, B_2 構造，且試驗次數 $N = 2^k$ ，因子數分別為 m_1, m_2 。若 $m_1, m_2 < (N - 1)/2$ 且 $D_i = (d_{i1}, \dots, d_{im_i})$ 恰好有

$3m_i - N + 1$ 對 (d_i, d_j) 不能填滿 4×4 網格。定義由 T_{k+2} 中取出的矩陣 A^* 和 B^* 如下：

$$A^* = (A_1, A_2 \cdot (k+1), A_2 \cdot (k+2), A_2 \cdot (k+1)(k+2), k+1),$$

$$B^* = (B_1, B_2 \cdot (k+2), B_2 \cdot (k+1)(k+2), B_2 \cdot (k+1), k+2)。$$

則 $D^* = A^* + B^*/2 + 3/2$ 為公式 (2) 所能建構的試驗數為 $4N$ ，因子數為 $m_1 + 3m_2 + 1$ 的 Σ 最佳設計。

證明. 首先， D^* 為 2^{k+2} 次試驗、 $m_1 + 3m_2 + 1$ 因子為顯然。故僅需計算 D^* 中失均的 (d_i, d_j) 個數。而 $A^*B^* = (A_1B_1, A_2B_2 \cdot (k+1)(k+2), A_2B_2 \cdot (k+1), A_2B_2 \cdot (k+2), (k+1)(k+2))$ ，因此，類似於定理七之證明之情形，假設 B_2 和 A_2B_2 中的某一因子 \bar{a}_{i_2} 被使用了 t_2 次，則在 B^* 以及 A^*B^* 中， $\bar{a}_{i_2} \cdot (k+1), \bar{a}_{i_2} \cdot (k+2), \bar{a}_{i_2} \cdot (k+1)(k+2)$ 各自會被使用了 t_2 次，假設 B_1 和 A_1B_1 中的某一因子 \bar{a}_{i_1} 被使用了 t_1 次，則在 B^* 以及 A^*B^* 中， \bar{a}_{i_1} 會被使用了 t_1 次。也因此 D^* 失均的 (d_i, d_j) 個數會是原本 D_2 失均的 (d_i, d_j) 個數的 3 倍再加上 D_1 失均的 (d_i, d_j) 個數，也就是 $(3m_1 - 2^k + 1) + 3 \times (3m_2 - 2^k + 1) = 3m_1 + 9m_2 - 2^{k+2} + 4$ 。透過定理二，可知 2^{k+2} 次試驗、 $m_1 + 3m_2 + 1$ 因子之設計失均的 (d_i, d_j) 個數至少為 $3 \times (m_1 + 3m_2 + 1) - 2^{k+2} + 1 = 3m_1 + 9m_2 - 2^{k+2} + 4$ ，而 D^* 達到該界限，故 D^* 為 2^{k+2} 次試驗、 $m_1 + 3m_2 + 1$ 因子之 Σ 最佳設計。 \square

範例二. 考慮如下的矩陣 A_1 和 B_1 ：

$$A_1 = (23, 14, 124, 123, 134, 234),$$

$$B_1 = (12, 12, 1234, 1234, 34, 34)。$$

根據定理三， $D_1 = A_1 + B_1/2 + 3/2$ 滿足定理七之條件。接著考慮如下的矩陣 A_2 和 B_2 ：

$$A_2 = (13, 24, 1234, 14, 234, 123, 23),$$

$$B_2 = (1, 2, 12, 1, 2, 12, 124)。$$

根據定理四， $D_2 = A_2 + B_2/2 + 3/2$ 滿足定理七之條件。令

$$A^* = (A_1, A_2 \cdot 5, A_2 \cdot 6, A_2 \cdot 56, 5),$$

$$B^* = (B_1, B_2 \cdot 6, B_2 \cdot 56, B_2 \cdot 5, 6)。$$

則透過 $D^* = A^* + B^*/2 + 3/2$ 可構造 $N = 2^6$ 、 $m = 28$ 之 Σ 最佳設計。

利用定理八構造出的 Σ 最佳設計，其因子數不會如定理七被侷限於 $4m + 1$ 。表四列舉了當試驗次數 $N \leq 2^8$ 時，定理七或定理八所能構造的設計。最後，對於定理八我們有兩點注意事項。第一，當 $m_1 = m_2 = m$ ，其結論完全等價於定理七。第二，當 $3m_1 - N + 1 = 0$ 時，雖然 D_1 對應到的是 $OA(N, m_1, 4, 2)$ ，但搭配 $D_2 \in SOA(2+)$ ，仍然可以建構出更大規模的 Σ 最佳設計。

表 四: 定理七或八所能建構之 Σ 最佳設計

試驗次數 N	最佳 Σ 設計之因子數 m
$N = 2^6$	$m = 22, \dots, 29$
$N = 2^7$	$m = 49, \dots, 61$
$N = 2^8$	$m = 86, \dots, 117$

四、數值結果

在本節中，我們透過簡單的數值模擬，展示 Σ 最佳設計相較於一些現有的空間填充設計之優越性。考慮 $N = 32$ 、 $m = 15$ 之情形。需要比較的設計總共有五種：(1) 基於 Σ 最佳設計的 LHD、(2) 基於分層樣態下最佳設計（恰好為一個 SOA(3)）的 LHD、(3) Maximin LHD (Ba, Myers and Brenneman 2015)、(4) MaxPro LHD (Joseph, Gul and Ba 2015)、以及 (5) 隨機 LHD。其中， Σ 最佳設計可從表二得到；分層樣態下最佳設計可從 He and Tang (2013) 得到，它能均勻填滿所有分割數為 8 的網格（包含 4×2 、 2×4 和 $2 \times 2 \times 2$ ），記為 SOA(3)；而 Maximin LHD 和 MaxPro LHD 皆可用現成的 R 套件生成。請注意，我們並不是直接使用 4 水準設計訓練模型，而是用基於 4 水準設計生成的 LHD，具體生成辦法請參考 Tang (1993)。另外，這些 LHD 都需縮放調整至單位立方體 $[0, 1]^m$ 中，原因請見後續解釋。

假設一（無誤差項的）電腦實驗之真實模型為 $y = f(\mathbf{x})$ ，其中輸入值為一 m^* 維向量 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_{m^*})$ 。在後續的模擬中，我們會取 $m^* < 15$ ，亦即輸出值僅會由一部分的因子所決定，剩餘的因子為惰性因子（inert factors）。惰性因子的存在是實驗之常見現象，也正是這個原因導致我們需要追求設計在投影空間中的空間填充性。為了敘述方便，通常假定 $\mathbf{x} \in [0, 1]^{m^*}$ ，即真實模型 $f(\mathbf{x})$ 定義在單位立方體之中。當給定設計矩陣 $D = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ ，其實驗後所得到之訓練集為 $\{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, \dots, N\}$ ，其中 $y_i = f(\mathbf{x}_i)$ 。我們在此訓練集上，利用高斯過程（Gaussian process）建立預測模型 $\hat{f}(\mathbf{x})$ ，並計算 NMSE

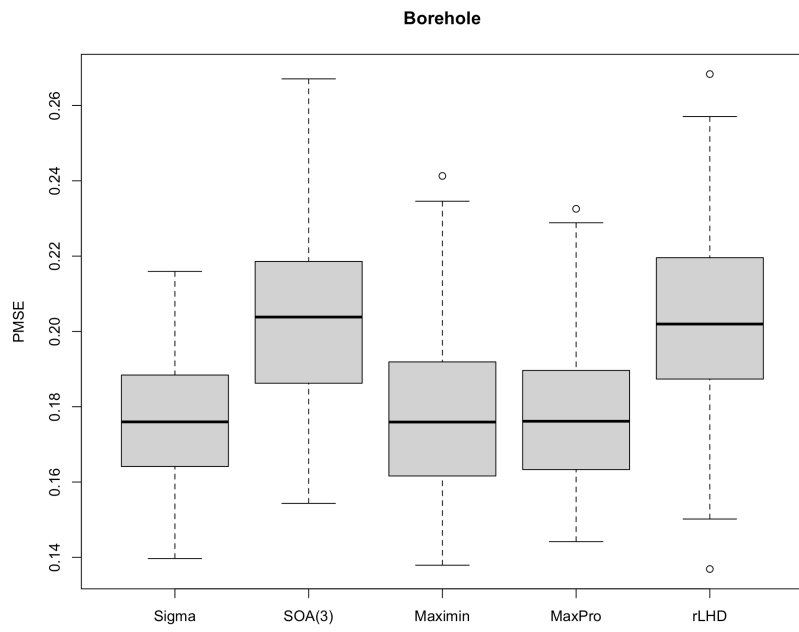
(Normalized prediction Mean Squared Error)。具體的計算方法如下。首先生成獨立的測試集 $\{(\mathbf{x}_i^*, y_i^*) : i = 1, \dots, N_{test}\}$ ，其中 \mathbf{x}_i^* 是由均勻分配 $U(0, 1)^m$ 生成，且 $y_i^* = f(\mathbf{x}_i^*)$ 。計算 NMSE 如下。

$$\text{NMSE} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{test}} (\hat{f}(\mathbf{x}_i^*) - y_i^*)^2}{\sum_{i=1}^{N_{test}} (\bar{y} - y_i^*)^2},$$

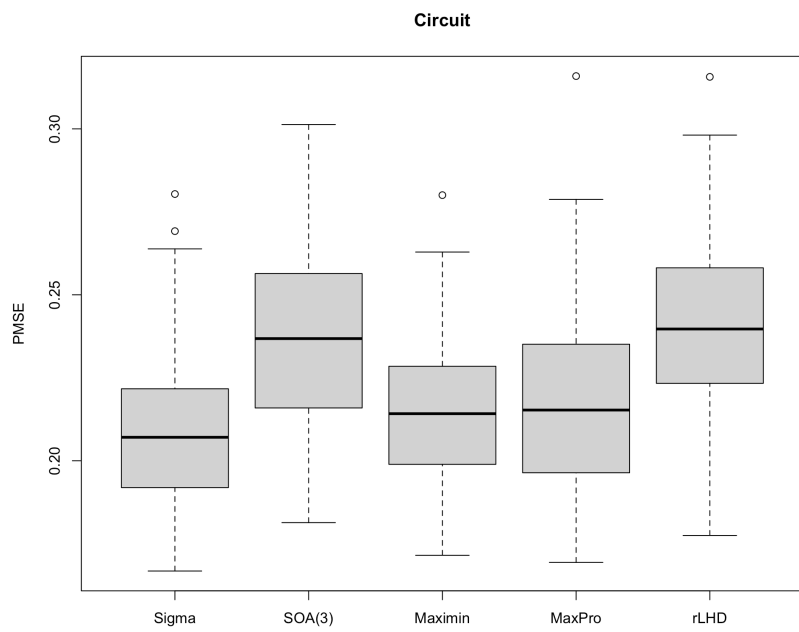
其中 $\bar{y} = (1/N) \cdot \sum_{i=1}^N y_i$ 。NMSE 可評估訓練模型 $\hat{f}(\mathbf{x})$ 的預測準確度，數值越小好，類似於線性模式中的 $1 - R^2$ （但 NMSE 可能大於 1）。如果 NMSE 接近 1，就表示訓練出的模型 $\hat{f}(\mathbf{x})$ ，比起 $\hat{f} \equiv \bar{y}$ 這種常數預測模型幾乎沒有差異。

在接下來的模擬中，皆設定 $N_{test} = 1000$ 。此外，配適高斯過程模型時，採用馬特恩共變異函數（Matérn covariance function），參數 $\nu = 2.5$ 。而關於真實模型 $f(\mathbf{x})$ 之選取，我們考慮 Derek Bingham 教授所建置的網頁（<https://www.sfu.ca/~ssurjano/index.html>）中常用的測試函數。這些函數的定義域大都已经調整為單位立方體 $[0, 1)^{m^*}$ 。對於上述五種不同設計的每一種，我們會在其上訓練 $\hat{f}(\mathbf{x})$ 共 $K = 100$ 次。並且，在每一次配適模型之前，需先將設計矩陣 D 做一次行重排，取前 m^* 個因子用來計算輸出值 y_i 。這是因為在真實的實驗中，我們無法事先確定哪些因子是惰性因子。

首先考慮的情境為： $f(\mathbf{x})$ 為 Borehole 函數，此時 $m^* = 8$ ，有 7 個惰性因子。模擬結果之盒鬚圖如圖一所示。可以發現，基於 Σ 最佳設計的 LHD 有最好的預測表現，和 Maximin、MaxPro LHD 兩者差不多。情境二將真實模型換成 Circuit 函數，此時 $m^* = 6$ ，有 9 個惰性因子，模擬結果如圖二所示。在這兩種情境中，模擬結果都顯示了 Σ 最佳設計相較於其他空間填充設計，能訓練出預測表現更好的模型，為我們所建構的設計提供了簡單的辯證。



圖一：真實模型為 Borehole 之模擬結果



圖二：真實模型為 Circuit 之模擬結果

五、結論

本文基於Sun, Cheng and Phoa (2024)的 Σ 樣態，建構出在該樣態下的最佳設計，並以遞迴構造的方式使用較低試驗數的最佳設計延伸建構較高試驗數的最佳設計。然而，這個問題仍存在某些困難。例如，在 $N = 16, m = 8, 9, 10$ 的情形下尚未找出有系統性的建構方式，並且在更高試驗數之情形，可被構造出的設計仍侷限於因子數小於試驗數一半的情形，因子數更大的情況目前仍難以構造。因此，未來的研究方向可以著重在較高因子數的情況下如何使用具系統性的建構方式構造 Σ 最佳設計。

總結而言，本文透過數值分析表現 Σ 最佳設計相較於其他空間填充設計具有其優勢，並且提供了部分情況下 Σ 最佳設計的建構法，提供使用者一個在執行實驗時新的設計選擇。



附錄

定理三的證明. 由上述步驟建構出的 A 與 B 集合，可確保 AB 集合中必無與 B 集合重複的因子。首先，假設 A 集合中的前兩個因子分別為 g_{41}, g_{51} ，而 B 集合中的前兩個因子皆為 g_{11} ，則 AB 中的前兩個因子分別為 $g_{41}g_{11}, g_{51}g_{11}$ 。由引理一之證明，可知 $g_{41}g_{11}$ 不會屬於 $G_4 \cup G_1$ ，並且由於 g_{11} 是由 G_4 和 G_5 的元素相乘所得，假設 $g_{11} = g_{42}g_{52}$ ，則 $g_{41}g_{11} = g_{41}g_{42}g_{52} = g_{43}g_{52}$ ，由引理一的證明可知 $g_{41}g_{11}$ 不會屬於 $G_4 \cup G_5$ 。因此， $g_{41}g_{11}$ 必屬於 $G_2 \cup G_3$ ，同理 $g_{51}g_{11}$ 必屬於 $G_2 \cup G_3$ 。最後，由於第一步中確保 $g_{41}g_{51}$ 屬於 G_2 或 G_3 某一個集合，不失一般性假設 $g_{41}g_{51} \in G_3$ ，則 $g_{41}g_{51} = g_{41}g_{11}g_{51}g_{11} \in G_3$ 。若 $g_{41}g_{11}, g_{51}g_{11} \in G_2$ ，則 $g_{41}g_{11}g_{51}g_{11} \in G_2$ ，矛盾。若 $g_{41}g_{11} \in G_2, g_{51}g_{11} \in G_3$ 或 $g_{41}g_{11} \in G_3, g_{51}g_{11} \in G_2$ ，則根據引理一的證明 $g_{41}g_{11}g_{51}g_{11}$ 不屬於 $G_2 \cup G_3$ ，矛盾。因此， $g_{41}g_{11}, g_{51}g_{11} \in G_3$ ，並且 $g_{41}g_{11} \neq g_{51}g_{11} \neq g_{41}g_{51}$ 。因此， AB 中的前兩個元素與 B 集合裡的所有元素皆不同，同理，也可對 AB 中其餘的元素進行相同的論述，可得 AB 中的所有元素皆為不同的元素，且與 B 集合中所使用的所有元素皆有所不同。因此， B 、 AB 兩集合中所重複使用的元素個數即為 B 集合中所重複使用的 3 對元素，也因此有 3 對因子不具 4×4 空間的均勻分布性質。 \square

定理四的證明. 首先，在步驟 5 中 B 的選取已經確保 G_1 中的 3 個因子必會被各重複使用 1 次。接著，由步驟 2 與步驟 3 中可知步驟 5 所建構出的 A 、 B 集合，其 AB 集合中的前 6 個因子必來自 G_2 且 G_2 中的 3 個因子必會被個重複

使用 1 次。最後 A 、 B 以及 AB 集合中的最後一個元素，由於與 G_1 、 G_2 、 G_1^* 以及 G_2^* 皆無關，因此這 3 個因子與 B 、 AB 兩集合中的前 6 個因子皆不同。因此，可計算 B 、 AB 兩集合中重複使用的因子有 6 個，也就是有 6 對因子不具 4×4 空間的均勻分布性質。 \square

定理五的證明. 在 $m = 10$ 的情形，根據定理二，至少有 0 對 (i, j) ， $i \neq j$ 使得 (d_i, d_j) 不具 4×4 空間的均勻分布性質，但若存在一個設計 D 達成這個下界，代表我們存在一個分割方法可以將所有 31 個因子分割成 10 個集合，Wu (1989) 中的結果矛盾。因此，至少有 1 對 (i, j) ， $i \neq j$ 使得 (d_i, d_j) 不具 4×4 空間的均勻分布性質。

根據建構法，可得選取的 $B = (r_2, r_2r_3, g_{22}, g_{32}, \dots, g_{92})$ ，而在這個情況可以計算 $AB = (r_1r_2, r_1r_2, g_{23}, g_{33}, \dots, g_{93})$ 。故若計算 AB 中的因子計算 B 與 AB 重複使用的效應數，就只會有 1 對，也就是 AB 矩陣的前 2 個效應，達到先前論述的新界限。因此，構造出的設計 D 為 Σ 準則下的最佳設計。 \square

定理六的證明. 在 $m = 11$ 的情形，根據定理二，至少有 2 對 (i, j) ， $i \neq j$ 使得 (d_i, d_j) 不具 4×4 空間的均勻分布性質，然而，我們可以透過以下論述說明這個下界是無法達到的。

首先，若存在達到根據定理二中所提出之下界的設計 D ，並假設 D 是由 A 、 B 透過先前方法構造而來，則可知 B 和 AB 中應只有 2 組被重複使用的因子，假設 A 中的 20 個因子分別為 $\bar{a}_1, \dots, \bar{a}_{20}$ ，不失一般性，假設被重複使用的因子為 \bar{a}_1 以及 \bar{a}_2 ，則達到下界的 B 和 AB 構造有下列兩種情況：

1. $B = (\bar{a}_1, \bar{a}_1, \bar{a}_3, \dots, \bar{a}_{11})$ 、 $AB = (\bar{a}_{12}, \bar{a}_2, \bar{a}_2, \bar{a}_{13}, \dots, \bar{a}_{20})$ 。在此情況，若看

第 1 以及第 3, ..., 11 個因子，會發現這 10 組因子可以構成 10 組不同的分割集合 G_1, \dots, G_{10} ，與先前結論矛盾。

2. $B = (\bar{a}_1, \bar{a}_1, \bar{a}_3, \dots, \bar{a}_{11})$ 、 $AB = (\bar{a}_{12}, \bar{a}_{13}, \bar{a}_2, \bar{a}_2, \bar{a}_{14}, \dots, \bar{a}_{20})$ 。在此情況，若看第 1、第 3 以及第 5, ..., 11 個因子，會發現這 9 組因子可以構成 9 組不同的分割集合 G_1, \dots, G_9 ，而分割後未被使用的 4 個因子分別為 \bar{a}_4 、 \bar{a}_{13} 、 $\bar{a}_1\bar{a}_4$ 、 $\bar{a}_2\bar{a}_{13}$ ，但由於所有因子相乘的結果必須為 I ，因此 $\bar{a}_4 \cdot \bar{a}_{13} \cdot \bar{a}_1\bar{a}_4 \cdot \bar{a}_2\bar{a}_{13} = I$ ，得 $\bar{a}_1 = \bar{a}_2$ ，矛盾。

因此，在 $m = 11$ 時，至少有 3 對 (i, j) ， $i \neq j$ 使得 (d_i, d_j) 不具 4×4 空間的均勻分布性質。

根據建構法，可得選取的 $B = (r_3, r_3, r_3, g_{22}, g_{32}, \dots, g_{92})$ ，而在這個情況可以計算 $AB = (r_1r_3, r_2r_3, r_1r_2r_3, g_{23}, g_{33}, \dots, g_{93})$ ，故若計算 AB 中的因子計算 B 與 AB 重複使用的因子數，就只會有 3 對，也就是 AB 矩陣的前 3 個效應中任取 2 個效應所形成的 3 對，達到先前論述的新界限。因此，構造出的設計 D 為 Σ 準則下的最佳設計。 □

參考文獻

- Ba, S., Myers, W. R. and Brenneman, W. A. (2015), ‘Optimal sliced latin hypercube designs’, *Technometrics* **57**, 479–487.
- Block, R. M. and Mee, R. W. (2003), ‘Second order saturated resolution IV designs’, *Journal of Statistical Theory and Applications* **2**, 96–112.
- Cheng, C.-S., He, Y. and Tang, B. (2021), ‘Minimal second order saturated designs and their applications to space-filling designs’, *Statistica Sinica* **31**, 867–890.
- He, Y., Cheng, C.-S. and Tang, B. (2018), ‘Strong orthogonal arrays of strength two plus’, *The Annals of Statistics* **46**, 457–468.
- He, Y. and Tang, B. (2013), ‘Strong orthogonal arrays and associated latin hypercubes for computer experiments.’, *Biometrika* **100**, 254–260.
- Hickernell, F. (1998), ‘A generalized discrepancy and quadrature error bound’, *Mathematics of Computation* **67**, 299–322.
- Johnson, M. E., Moore, L. M. and Ylvisaker, D. (1990), ‘Minimax and maximin distance designs.’, *Journal of Statistical Planning and Inference* **26**, 131–148.
- Joseph, V. R., Gul, E. and Ba, S. (2015), ‘Maximum projection designs for computer experiments’, *Biometrika* **102**, 371–380.

- McKay, M. D., Beckman, R. J. and Conover, W. J. (2000), ‘A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code’, *Technometrics* **42**, 55–61.
- Shi, C. and Tang, B. (2019), ‘Design selection for strong orthogonal arrays’, *The Canadian Journal of Statistics* **47**, 302–314.
- Shi, C. and Xu, H. (2023), ‘A projection space-filling criterion and related optimality results’, *Journal of the American Statistical Association* pp. 1–23, to appear.
- Sun, C.-Y., Cheng, S.-W. and Phoa, F. K.-H. (2024), ‘Space-filling regular designs under a minimum aberration-type criterion’, *unpublished manuscript*.
- Tang, B. (1993), ‘Orthogonal array-based latin hypercubes’, *Journal of the American Statistical Association* **88**, 1392–1397.
- Tian, Y. and Xu, H. (2022), ‘A minimum aberration-type criterion for selecting space-filling designs’, *Biometrika* **109**, 489–501.
- Wu, C.-F. J. (1989), ‘Construction of $2^m 4^n$ designs via a grouping scheme’, *The Annals of Statistics* **17**, 1880–1885.
- Xu, H. and Wu, C.-F. J. (2001), ‘Generalized minimum aberration for asymmetrical fractional factorial designs’, *The Annals of Statistics* **29**, 549–560.