中國統計學報
第 37 卷第 1 期
八十八年三月
53–77 頁

最大化最小內點距離的拉丁超方陣

馬瀰嘉　　林共進
國立成功大學統計學研究所　美國賓州州立大學管理科學及資訊系統系

摘　要

因爲計算機實驗 *(computer experiment)* 快速而且成本低廉，常被用來取代物理實驗。然而在計算機上所作的實驗，並沒有隨機誤差，因此一般使用完全因子設計的缺點在於就各個因子來看，有重複實驗浪費在該因子的各個水準上。*Mckay, Beckman* 與 *Conover(1979)* 提出使用拉丁超方陣 *(Latin hypercube)* 方法。n 點的拉丁超方陣設計矩陣是將每個因子的水準假設爲整數 $\{1,2,...,n\}$，經過隨機排列而構成，因此投影在每一因子的水準沒有重覆次數且有相等的間距，而使用此拉丁超方陣可使模式配適得較好。

本文利用最小距離的兩點座標差距來得到最大化最小內點距離的設計 *(maximin distance design)*，在 2 維平面上，得到 $n = k^2$ 點最大化最小內點距離的排列之一爲旋轉一平面上 k^2 標準因子實驗設計。若改用 n 點最小化最大內點距離的排列方法，則所得到的排列圖形沒有規則性和唯一性。當 $n \neq k^2$，使用最大化最小內點距離的排列方法，所得到的排列圖形也沒有規則性和唯一性。另外，我們擴展此方法至高維度空間上，得到 n 維度下最大化最小內點距離的 n 點座標及其最小內點距離。

關鍵詞：計算機實驗，拉丁超方陣，最大化最小內點距離。

1. 前言

在物理實驗上，因爲事先不知道哪些因子對反應變數的影響較大，因此常使用標準因子設計(standard factorial design)。Easterling(1989)指出標準因子設計在物理實驗上有許多良好的特性，例如：平衡性(每個因子有相同的水準數目)，對稱性(設計矩陣的每一行可重新排列仍得到相同的設計矩陣)，直交性(主效用可各自分開估計)，重疊性(可投影得到較低維度的因子實驗及投影至每一因子各水準有相等的間距)。如果實驗結果顯示某些因子對反應變數影響不大，那些因爲該因子而重覆設計的實驗次數常被用來估計系統的變異。因爲計算機實驗快速而且成本低廉，常被用來取代物理實驗，然而在計算機上所作的實驗，並沒有隨機誤差，因此標準因子設計利用較低維度因子的重覆實驗次數來估計隨機誤差的特性，在計算機實驗上並不適用。另外，當使用2^d設計，不管其他因子是否有影響，皆不可能估計任一因子的二次效用，在眞正的模式未知情況下，若有某些因子的影響是可忽略不計時，我們希望因爲該因子而重覆設計的實驗次數能夠用來改進模式的配適。

Koehler與Owen(1996)以及Beattie與Lin(1998)回顧一些關於計算機實驗過去和目前常用的方法。Mckay, Beckman與Conover(1979)提出使用拉丁超方陣(Latin hypercube)在計算機實驗上，n點的拉丁超方陣設計矩陣是將每個因子的水準假設爲整數$\{1,2,...,n\}$，經過隨機排列而構成，因此投影在每一因子的水準沒有重覆次數且有相等的間距，而使用此拉丁超方陣可使模式配適得較好。Box與Draper(1959)提出當眞正模式爲一不知次方的多項式時，最好的設計是將設計點平均分配在所有因子可實驗範圍內(若有d個因子則爲d維度的實驗範圍內)。如果沒有交互作用，最好的設計是將設計點平均分配在每一因子的可能實驗範圍內。因此在計算機實驗上多使用拉丁超方陣作實驗設計。然而當因子間有交互作用或相關性時，拉丁超方陣便不適用。Johnson, Moore與Ylvisaker(1990)提出最大化最小內點距離(minimum interpoint distance)的設計。Easterling(1989)對Sacks, Welch, Mitchell與Wynn(1989)一文的評語提到在d維度的$n = k^d$點最大化最小內點距離的設計即爲標準d因子，k水準的因子設計，因此在高維度時計算機實驗一樣須忍受標準因子設計重疊性的缺點。Morris與Mitchell(1992)及Tang(1994)提出使最小內點距離最大化的

拉丁超方陣設計，稱作最大化最小拉丁超方陣(maximin Latin hypercube)。Owen(1992)和Tang(1993)利用使拉丁超方陣設計直交化來改進設計點在空間上的分散程度。Park(1994)利用使IMSE最小化方法得到最佳拉丁超方陣設計。Owen(1994)研究隨機拉丁超方陣設計矩陣行和行之間的相關係數。Beattie與Lin(1998)利用旋轉一平面上k^2標準因子實驗設計來得到2因子k^2點的拉丁超方陣設計，並擴展至其它非k^2點的2因子實驗，並稱之爲旋轉因子設計(rotated factorial design)，旋轉因子設計的優點包括直交性，空間分散程度和因子設計相同，以及投影在每一因子的水準沒有重覆次數且有相等的間距。

本文在第二節利用最小內點距離的兩點座標差距來得到最大化最小內點距離的設計(maximin distance design)，在$d = 2$時，得到使$n = k^2$點最大化最小內點距離的排列之一爲旋轉一平面上k^2標準因子實驗設計，和最小內點距離爲$k^2 + 1$，並討論改用最小化最大內點距離(minimax)排列方法的可行性。在第三節，因爲當$n \neq k^2$時，使用最大化最小內點距離(maximin)的方法，所得到的排列圖形沒有規則性和唯一性，進而討論是否能在最大化最小內點距離所得到的衆多排列上使用附加條件，使所得到的排列圖形有唯一性。在第四節，我們擴展此方法至高維度空間上，使得尋找最大化最小內點距離的可能排列情形縮小範圍，並得到當$d = n$時最大化最小內點距離的n點座標。第五節爲結論，最後將所有定理證明放在附錄中。

2. 最大化最小內點距離法

假設兩點座標爲(x_1, y_1)和(x_2, y_2)，則兩點的距離定義爲$(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2$。Beattie與Lin(1998)利用旋轉因子設計旋轉一d維空間上k^d標準因子實驗設計可得到d因子$n = k^d$點的拉丁超方陣設計。當$d = 2$，Beattie與Lin定義旋轉角度θ爲：假設(x, y)爲標準因子設計上某點座標，經過順時針旋轉θ角度後的座標爲(x', y')=$(x\cos\theta + y\sin\theta, -x\sin\theta + y\cos\theta)$。因爲旋轉後的座標不爲整數，而$n = k^d$的拉丁超方陣設計矩陣是將每個因子的水準假設爲整數$\{1, 2, ..., n\}$，經過隨機排列而構成，因此他們將$(x', y')$乘上一大於1的常數$c$後平移(即$(cx' + a, cy' + b)$)，使其成爲整數。當$d = 2$時，此旋轉角度即爲拉丁超方陣圖形一邊與直角座標$X$軸之夾角。由上述方法欲得到拉丁超方陣

設計需藉由一2×2維旋轉矩陣轉換後再放大和平移，並不簡便，故我們改用最大化最小內點距離方法來探討所得到的排列與拉丁超方陣設計的關係。

假設n點的座標爲$(1,\tau_1),(2,\tau_2),\ldots,(n,\tau_n)$，其中$\underline{\tau}=(\tau_1,\ldots,\tau_n)$爲$(1,\ldots,$ n)的某種排列(permutation)。令$A_{\underline{\tau}}=\{(i,\tau_i),(j,\tau_j)|1\leq i,j\leq n\}$爲在排列$\underline{\tau}$下任兩點所構成的集合，內點距離爲$A_{\underline{\tau}}$中任兩點的距離。

首先針對$n=4$點之所有可能排列情形依最小內點距離作一分類，若將$4!=24$種排列依最小內點距離分割爲2個互斥集合，則最小內點距離爲2的排列有{ (1,2,3,4), (4,3,2,1), (1,3,2,4), (4,2,3,1), (3,2,4,1), (4,1,3,2), (2,3,1,4), (1,4,2,3), (3,4,2,1), (2,1,3,4), (4,3,1,2), (1,2,4,3), (2,3,4,1), (3,4,1,2), (4,1,2,3), (3,2,1,4), (2,1,4,3), (4,2,1,3), (1,3,4,2), (2,4,3,1), (3,1,2,4) }，共22種，最小內點距離爲5的排列有{(2,4,1,3), (3,1,4,2)}共2種。

<u>定理一</u>：若$n=k^2$，則

(1) 使n點最大化最小內點距離的排列之一爲$(k,2k,\ldots,k^2,k-1,2k-1,\ldots,k^2-1,\ldots,1,k+1,\ldots,(k-1)k+1)$，

(2) 此排列的最小內點距離爲k^2+1，

(3) 此n點的圖形即爲旋轉一平面上k^2標準因子實驗設計，旋轉角度$\theta=tan^{-1}(k)$或$\theta=tan^{-1}(1/k)$。

將上述定理舉例說明如下：

(1) 若$k=2,\ n=4$，最小內點距離不可能爲8，因爲有此最小內點距離的兩座標點只可能爲{(i,1), (i + 2,3)}或{(i,2), (i + 2,4)}，但含此兩座標點的所有可能排列有(1,2,3,4), (4,3,2,1), (2,3,4,1), (3,4,1,2), (4,1,2,3), (3,2,1,4), (2,1,4,3), (1,4,3,2)，其最小內點距離皆不可能爲8。若最小內點距離爲5，則排列$\underline{\tau}$中任相鄰的兩點須相差2以上(對應$A_{\underline{\tau}}$中任相鄰的兩點座標中的Y座標須相差2以上)，此種排列有(2,4,1,3)，或(3,1,4,2)(即點座標爲(1,2), (2,4), (3,1), (4,3)或(1,3), (2,1), (3,4), (4,2)，如圖1)。

(2) 若$k = 3,\ n = 9$，最小內點距離不可能爲13，因爲若最小內點距離爲13，則排列τ中任相鄰的兩點須相差4以上(對應A_τ中任相鄰的兩點座標中的Y座標須相差4以上)，排列τ中間隔一點的任兩點須相差3以上，此種排列不存在。若最小內點距離爲10，則排列τ中任相鄰的兩點須相差4以上，排列τ中任相鄰的兩點須相差3以上，間隔一點的任兩點須相差3以上，此種排列有(7,4,1,8,5,2,9,6,3)或(3,6,9,2,5,8,1,4,7)，如圖2。若排列爲(1,4,7,2,5,8,3,6,9)或(3,9,6,2,8,5,1,7,4)，則最小內點距離爲8，因排列(1,4,7,2,5,8,3,6,9)中兩座標點(2,4), (4,2)的距離爲8，或排列(3,9,6,2,8,5,1,7,4)中兩座標點(3,6), (5,8)的距離爲8，故排列τ中間隔一點的任兩點也須相差3以上，如圖3。

(3) 若$k = 4,\ n = 16$，最小內點距離不可能爲18，因爲若最小內點距離爲18，則排列τ中任相鄰的兩點須相差5以上，間隔1點的任兩點也須相差4以上，間隔2點的任兩點也須相差3以上，此種排列不存在。若最小內點距離爲17，則排列τ中任相鄰的兩點須相差4以上，間隔一點的任兩點須相差4以上，間隔2點的任兩點也須相差3以上，此種排列有 (4, 8, 12, 16, 3, 7, 11, 15, 2, 6, 10, 14, 1, 5, 9, 13)，(5, 11, 15, 2, 8, 12, 16, 4, 9, 13, 1, 6, 10, 14, 3, 7)，(13, 9, 5, 1, 14, 10, 6, 2, 15, 11, 7, 3, 16, 12, 8, 4) 或 (7, 3, 14, 10, 6, 1, 13, 9, 4, 16, 12, 8, 2, 15, 11, 5)，如圖4。

依此類推，n點中任相鄰的兩點須相差k以上的排列若爲$(\mathrm{k}, 2\mathrm{k}, \ldots, \mathrm{k}^2, k-1, 2k-1, \ldots, k^2-1, \ldots, 1, k+1, \ldots, (k-1)k+1)$，則最小內點距離爲$k^2+1$。但當$k \geq 4$時，使用最大化最小內點距離的方法得到的排列不只一個，故上述排列方法只是較易得到其中之一種排列。

若改用最小化最大內點距離的方法，所得到的排列圖形沒有規則性和唯一性。例如：$k = 2,\ n = 4$，24種所有可能排列下最大內點距離爲18的排列有(1,2,3,4), (4,3,2,1), (1,3,2,4), (4,2,3,1)共4種，最大內點距離爲13的排列有(3,2,4,1), (4,1,3,2), (2,3,1,4), (1,4,2,3), (3,4,2,1), (2,1,3,4), (4,3,1,2), (1,2,4,3)共8種。最大內點距離爲10的排列有(2,3,4,1), (3,4,1,2), (4,1,2,3), (3,2,1,4), (2,1,4,3), (1,4,3,2), (2,4,1,3), (3,1,4,2), (4,2,1,3), (1,3,4,2), (2,4,3,1), (3,1,2,4)共

12種，故最大內點距離爲最小的排列多達12種，且圖形上沒有規則性，如圖5。

3. 附加最小化最大內點內點距離法

當$n \neq k^2$，使用最大化最小內點距離的排列方法，所得到的排列圖形沒有規則性和唯一性。例如$n=3$，3!種排列下任兩點的距離最小皆爲2；又如$n=5$，若欲使最小內點距離爲5，則排列τ中任相鄰的兩點須相差2以上，此種排列有(4,1,3,5,2), (1,3,5,2,4), (3,5,2,4,1), (5,2,4,1,3), (2,4,1,5,3)等，但這些排列的圖形有些並不均勻且無對稱性，如圖6。

<u>定理二</u>：若$n=k^2$，將$n+1$加在n點最大化最小內點距離的排列之前或之後，可得到$n+1$點最大化最小內點距離的排列之一，即將n點最大化最小內點距離的圖形加一點可得到$n+1$點最大化最小內點距離的圖形。

例如：(1) $n=5$時，可利用$n=4$時最小內點距離爲5的排列(2,4,1,3)，將5加在原排列之前或之後即可得到最小內點距離爲5的排列之一。(2) $n=10$時，可利用$n=9$時最小內點距離爲10的排列有(3,6,9,2,5,8,1,4,7)則將10加在原排列之前或之後即可得到最小內點距離爲10的排列之一。

當$n \neq k^2$,除定理二的方法，也可利用最小內點距離的兩點座標差距來得到該種排列，例如$n=7$，最小內點距離不可能爲10，因爲若最小內點距離爲10，則排列τ中任相鄰的兩點須相差3以上，且間隔一點的任兩點也須相差3以上，在$n=7$時，此種排列不存在。若最小內點距離爲8，則排列τ中任相鄰的兩點須相差3以上，且間隔一點的任兩點也須相差2以上，在$n=7$時，此種排列只可能爲(3,6,1,4,7,2,5)或(5,2,7,4,1,6,3)，如圖7。

<u>定理三</u>：若$k^2 \leq n < (k+1)^2$，則n點最大化最小內點距離介於k^2+1和$(k+1)^2+1$之間，即$k^2+1 \leq max_{\underline{\tau}} min_{A_{\underline{\tau}}} D_{ij} \leq (k+1)^2+1$，其中$D_{ij}=(i-j)^2+(\tau_i-\tau_j)^2$爲兩點座標(i,$\tau_i$)與(j,$\tau_j$)間的距離。

當$n \neq k^2$，使用最大化最小內點距離的方法得到的排列不只一個，故使

用上述方法只是較易得到其中一種排列。由以上討論可知欲使一平面上的n點，n點座標爲$(1,\tau_1),\ldots,(n,\tau_n)$，其圖形較均勻地散布在2維的平面上，只是最大化最小內點距離的條件是不夠的，尚須附加其他的條件，例如$n=5$時，3須放排列的中間，$n=7$時，4須放排列的中間，$n=9$時，5須放排列的中間等，或是使排列的圖形所涵蓋的面積最大。

此附加條件不能使用最小化最大內點距離的方法在最大化最小內點距離所得到的衆多排列上。例如$n=5$，最大化最小內點距離所得到的排列有(2,4,1,5,3), (4,1,3,5,2), (1,3,5,2,4), (3,5,2,4,1), (5,2,4,1,3)等，這些排列的最大內點距離分別爲18, 20, 25, 25, 25。最小化最大內點距離的排列爲(2,4,1,5,3)，但此排列的圖形並不均勻且無對稱性，如圖6。但上述排列的圖形所涵蓋的面積分別爲9, 10, 7.5, 7.5, 7.5，其中涵蓋面積最大的排列爲(4,1,3,5,2)，此排列的圖形具對稱性。

4. 高維度的拉丁超方陣

Beattie與Lin(1998)擴展旋轉因子設計至d維空間上，得到當d爲2的次方時，旋轉一d維空間上k^d標準因子實驗設計可得到d因子k^d點的拉丁超方陣設計。然而此方法欲得到拉丁超方陣設計需藉由一$d\times d$維的旋轉矩陣來轉換，當$d\geq 3$時並不簡便，故我們改用最大化最小內點距離方法來探討高維度的排列與拉丁超方陣設計的關係。

假設一d維空間上的n點座標爲$(1,\tau_{11},\ldots,\tau_{d-1,1}),\ldots,(n,\tau_{1n},\ldots,\tau_{d-1,n})$，其中$\underline{\tau}_l=(\tau_{l1},\ldots,\tau_{ln})$爲$(1,\ldots,n)$的某種排列，$l=1,\ldots,d-1$。令$A_{(\underline{\tau}_1,\ldots,\underline{\tau}_{d-1})}$ $=\{\,(\mathrm{i},\tau_{1i},\ldots,\tau_{d-1,i}),(\mathrm{j},\tau_{1j},\ldots,\tau_{d-1,j})\mid 1\leq \mathrm{i},\mathrm{j}\leq \mathrm{n}\,\}$爲在排列$\underline{\tau}_1,\ldots,\underline{\tau}_{d-1}$下任兩點座標所構成的集合。假設$n$點中兩點座標爲$(\mathrm{i},\tau_{1i},\ldots,\tau_{d-1,i}),(\mathrm{j},\tau_{1j},\ldots,\tau_{d-1,j})$，定義此兩點的距離爲$D_{ij}=(i-j)^2+(\tau_{1i}-\tau_{1j})^2+\ldots+(\tau_{d-1,i}-\tau_{d-1,j})^2$，內點距離爲$A_{(\underline{\tau}_1,\ldots,\underline{\tau}_{d-1})}$中任兩點的距離。

當$d=3$時，使n點中最小內點距離爲最大的排列不具唯一性。例如：$n=3$，在3維空間上$(3!)^2=36$種排列下最小內點距離皆爲3，又如$n=4$，，最小內點距離爲9的排列不存在，(若存在最小內點距離爲9，則在兩點座標3維中必須有2維的座標點相差2以上，即最小距離的兩點座標須爲(i,τ_{1i},τ_{2i})

和$(i+1,\tau_{1i}+2,\tau_{2i}+2)$，而一維座標相差2以上的排列只有(2,4,1,3)或(3,1,4,2)，但3維空間上4點的座標：(1,2,2), (2,4,4), (3,1,1), (4,3,3)或(1,2,3), (2,4,1), (3,1,4), (4,3,2)，其中(1,2,2)和(3,1,1)的內點距離爲6或(1,2,3)和(3,1,4)的內點距離亦爲6)，故最小內點距離爲6的排列有92種(因爲固定第一維座標下，其餘2維中只要有一維座標是相差2以上的排列，其兩點間最短的距離即爲6)。

將2維平面的$n!$種所有可能排列依最小內點距離的兩點座標差距，如表1分割爲r個集合，假設可能排列數分別爲$A_1, A_2, \ldots, A_r$，其中$A_1+A_2+\ldots+A_r = n!$，並假設最大化最小內點距離的兩點座標爲$\{(i,\tau_i),(i+a_r,\tau_i+b_r)\}$的可能排列數爲$A_r$種，即此$A_r$種排列最小內點距離均爲$a_r^2+b_r^2$。

表1. 不同維度下，最小內點距離的兩點座標差距

	$d=2$		$d=3$		$d=4$	
no.	座標差	內點距離	座標差	內點距離	座標差	內點距離
1	(1,1)	2	(1,1,1)	3	(1,1,1,1)	4
2	(1,2)	5	(1,1,2)	6	(1,1,1,2)	7
3	(2,2)	8	(1,2,2)	9	(1,1,2,2)	10
4	(1,3)	10	(1,1,3)	11	(1,1,1,3)	12
5	(2,3)	13	(2,2,2)	12	(1,2,2,2)	13
6	(1,4)	17	(1,2,3)	14	(1,1,2,3)	15
7	(3,3)	18	(2,2,3)	17	(2,2,2,2)	16
8	(2,4)	20	(1,1,4)	18	(1,2,2,3)	18
9	(3,4)	25	(1,3,3)	19	(1,1,1,4)	19
10	(1,5)	26	(2,3,3)	22	(1,1,3,3)	20

我們擴展此方法至高維度空間上，使得尋找最小內點距離爲最大的可能排列情形縮小範圍。

定理四：

(1) 全部$(n!)^{d-1}=(A_1+\ldots+A_r)^{(d-1)}$種所有可能排列中可分割爲

$$\frac{(d-1)!}{m_1!\cdots m_r!}\prod_{l=1}^{r} A_l^{m_l}$$

種排列其內點距離爲 $1+\sum_{l=1}^{r} m_l b_l^2$，其中 $\sum_{l=1}^{r} m_l = d-1$，m_l 爲不小於0之整數。

(2) 內點距離爲 $a_r^2+(d-1)b_r^2$ 的排列有 A_r^{d-1} 種可能，但最小內點距離爲 $a_r^2+(d-1)b_r^2$ 的排列可能不存在。因此欲求最大化最小內點距離的排列只需考慮內點距離爲 $a_r^2+(d-1)b_r^2$ 的所有可能排列，計算其內點距離 $a_r^2+(d-1)b_r^2$ 是否爲最小，若不是，則考慮最小內點距離較 $a_r^2+(d-1)b_r^2$ 稍小的排列是否存在。

(3) 當 $d = n$ 時，最大化最小內點距離的排列對應之 n 點座標是 (1,2,...,n-1,n), (2,3,...,n,1), (3,4,...,1,2), ..., (n,1,...,n-2,n-1)，其最小內點距離爲 $n(n-1)$。

例如：

(1) 當 $n=4,\ d=2$ 時，最小內點距離爲2的排列有22種，(因爲最小內點距離的兩點座標須爲 (i,τ_i) 和 $(i+1,\tau_i+1)$)，而最小內點距離爲5的排列有2種，(因爲最小內點距離的兩點座標須爲 (i,τ_i) 和 $(i+1,\tau_i+2)$，4點排列中任相鄰的兩點相差2以上的排列只有(2,4,1,3)或(3,1,4,2)2種)。

(2) 當 $n=4,\ d=3$ 時，全部 $(4!)^{3-1}=(22+2)^{(3-1)}=576$ 種所有可能排列，有 $22^2=484$ 種可能排列最小內點距離爲 $1^2+(3-1)\times 1^2=3$，(因爲固定兩點座標的第一維爲 i 和 $i+1$ 下，其餘2維座標取4點排列中任相鄰的兩點相差1以上的排列，其最小內點距離即爲3)；有 $2\times 22\times 2=88$ 種可能排列最小內點距離爲 $1^2+1^2+2^2=6$，(因爲固定兩點座標的第一維爲 i 和 $i+1$ 下，其餘2維座標一維取4點排列中任相鄰的兩點相差1以上的排列，一維取相差2以上的排列，其最小內點距離即爲6)；有 $2^2=4$ 種可能排列最小內點距離爲 $1^2+2^2+2^2=9$，(因爲固定兩點座標的第一維爲 i 和 $i+1$ 下，其餘2維座標取4點排列中任相鄰的兩點

相差2以上的排列，其內點距離即爲9)，依定理四(2)欲求最大化最小內點距離的排列只需考慮內點距離爲$1^2+2^2+2^2=9$的所有可能排列，計算其最小內點距離是否爲9，若不是，則考慮最小內點距離較9小的排列是否存在，因爲對應內點距離爲9的4種可能排列之點座標不論是$\{(1,2,2), (2,4,4), (3,1,1), (4,3,3)\}$，(其中$(1,2,2)$和$(3,1,1)$的距離爲6)，$\{(1,2,3), (2,4,1), (3,1,4), (4,3,2)\}$，(其中$(1,2,3)$和$(3,1,4)$的距離爲6)，$\{(1,3,2), (2,1,4), (3,4,1), (4,2,3)\}$，(其中$(1,3,2)$和$(3,4,1)$的距離爲6)，或$\{(1,3,3), (2,1,1), (3,4,4), (4,2,2)\}$，(其中$(1,3,3)$和$(3,4,4)$的距離也爲6)，其最小內點距離皆爲6，故最小內點距離爲9的排列不存在，而最小內點距離爲6的排列有$88+4=92$種。

(3) 當$n=4$, $d=4$時，全部$(4!)^{4-1}=(22+2)^{(4-1)}=13824$種排列，有$22^3=10648$種排列最小內點距離爲$1^2+(4-1)1^2=4$，(因爲固定兩點座標的第一維爲$i$和$i+1$下，其餘3維座標取4點排列中任相鄰的兩點相差1以上的排列，故最小內點距離爲4)；但當4點座標是$(1,2,3,4), (2,3,4,1), (3,4,1,2), (4,1,2,3)$時，雖然固定兩點座標的第一維爲$i$和$i+1$下，其餘3維座標取4點排列中任相鄰的兩點相差1以上的排列，其最小內點距離卻爲12；有$3\times 22^2\times 2=2904$種排列最小內點距離爲$1^2+2\times 1^2+2^2=7$，(因爲固定兩點座標的第一維爲$i$和$i+1$下，其餘3維座標2維取4點排列中任相鄰的兩點相差1以上的排列，一維取相差2以上的排列，故最小內點距離即爲7)；有$3\times 22\times 2^2=264$種排列最小內點距離爲$1^2+1^2+2\times 2^2=10$，(因爲固定兩點座標的第一維爲i和$i+1$下，其餘3維座標1維取4點排列中任相鄰的兩點相差1以上的排列，2維取相差2以上的排列，故最小內點距離爲10)；有$2^3=8$種排列最小內點距離爲$1+3\times 2^2=13$，(因爲固定兩點座標的第一維爲i和$i+1$下，其餘3維座標取4點排列中任相鄰的兩點相差2以上的排列，故最小內點距離可能爲13)，依定理四(2)欲求最大化最小內點距離的排列只需考慮內點距離爲$1^2+3\times 2^2=13$的所有可能排列，計算其最小內點距離是否爲13，若不是，則考慮最小內點距離較13小的排列是否存在，因爲內點距

離爲 13 的 8 種可能排列的最小內點距離不爲 13，(如對應排列之點座標爲 $\{(1,2,2,2), (2,4,4,4), (3,1,1,1), (4,3,3,3)\}$ 或 $\{(1,2,3,2), (2,4,1,4), (3,1,4,1), (4,3,2,3)\}$，當兩點座標是 $(1,2,2,2)$ 和 $(3,1,1,1)$ 的距離爲 7 或 $(1,2,3,2)$ 和 $(3,1,4,1)$ 的距離亦爲 7。故 $n = 4$, $d = 4$ 時，最小內點距離爲 13 的排列不存在)。因此考慮最小內點距離較 13 小的排列，依照表 1，考慮最小內點距離爲 12 的排列是否存在，當 4 點座標是 $(1,2,3,4)$, $(2,3,4,1)$, $(3,4,1,2)$, $(4,1,2,3)$ 時，其最小內點距離爲 12，即所有排列中最小內點距離最大的。

(4) 當 $n = 16$, $d = 4$ 時，依定理四 (2) 欲求最大化最小內點距離的排列只需考慮內點距離爲 $1 + (4-1)4^2 = 49$ 的 $4^3 = 64$ 種所有可能排列，計算其最小內點距離是否爲 49，若不是，則考慮最小內點距離爲 $2^2 + 3^2 + 4^2 + 4^2 = 45$ 的排列是否存在，若不存在，再考慮最小內點距離爲 $1^2 + 3^2 + 4^2 + 4^2 = 42$ 的排列是否存在，依此類推，直到找到最小內點距離爲最大的排列爲止。

由以上討論得知，當 $d \neq n$ 時，使 d 維空間上 n 點最小內點距離爲最大的排列不具唯一性，欲使一 d 維空間上的 n 點，n 點座標爲 $(1, \tau_{11}, \ldots, \tau_{d-1,1}), \ldots, (n, \tau_{1n}, \ldots, \tau_{d-1,n})$，其圖形較均勻地散布在 d 維空間上，只是使 n 點最小內點距離爲最大的條件是不夠的，尚須其他的條件。

5. 結論

本文利用最小內點距離的兩點座標差距來尋找最小內點距離最大化的排列，得到以下結論：

(1) $n = k^2$ 點最大化最小內點距離的排列之一爲旋轉一平面上 k^2 標準因子實驗設計，旋轉角度爲 $tan^{-1}(k)$ 或 $tan^{-1}(1/k)$，此設計最小內點距離爲 $k^2 + 1$，

(2) 若改用 n 點最小化最大內點距離的方法，得到的排列圖形沒有規則性和唯一性。

(3) 當$n \neq k^2$，使用n點最大化最小內點距離的方法，得到的排列圖形沒有規則性和唯一性。欲使一平面上的n點，其圖形較均勻地散布在2維平面上，只是最大化最小內點距離的條件是不夠的，尚須附加其他的條件，例如$n = 2k + 1$時，$k + 1$須放排列的中間，或是使排列的圖形所涵蓋的面積最大。

(4) 附加條件不能使用最小化最大內點距離的方法在最大化最小內點距離所得到的衆多排列上。

(5) 在d維空間上，當$d = n$時，最大化最小內點距離的n點座標爲(1,2,...,n-1,n), (2,3,...,n,1), (3,4,...,1,2), ..., $(n, 1, \ldots, n-2, n-1)$，其內點距離爲$n(n-1)$；

(6) 當$d \neq n$，最大化最小內點距離的方法，所得到的排列圖形沒有規則性和唯一性。欲使d維空間上的n點，其圖形較均勻地散布在d維空間上，只是最大化最小內點距離的條件是不夠的，尚須附加其他的條件。

至於此方法是否可得到如Easterling(1989)提到在d維度的k^d點最大化最小內點距離的設計即爲標準d因子，k水準的因子設計或是當d爲2的次方時，k^d點最大化最小內點距離的設計即爲Beattie與Lin(1997)所提出在d維空間上，當d爲2的次方時，旋轉一d維k^d標準因子之實驗設計，尚待進一步研究。

6. 附錄

<u>**定理一之證明**</u>：假設在n點中兩點座標爲$(i, \tau_i), (j, \tau_j)$, 則此兩點的距離記爲$D_{ij} = (i-j)^2 + (\tau_i - \tau_j)^2$, 因$A_{\underline{\tau}} = \{(i, \tau_i), (j, \tau_j) | 1 \leq i, j \leq n\}$爲在排列$\underline{\tau}$下任兩點所構成的集合，欲求最小內點距離爲最大的排列，即求排列$\underline{\tau}$使得$\max_{\underline{\tau}} \min_{(i,\tau_i),(j,\tau_j) \in A_{\underline{\tau}}} D_{ij}$，將所有可能的$n!$種排列依最小內點距離分割(partition)爲數個互斥集合，則其對應最小內點距離的兩點座標分別爲：

(1) $\{(i, \tau_i), (i+1, \tau_i + 1)$或$(i, \tau_i), (i+1, \tau_i - 1)\}$(當最小內點距離爲2)，

(2) $\{(i, \tau_i), (i+1, \tau_i + 2)$或$(i, \tau_i), (i+1, \tau_i - 2)\}$(當最小內點距離爲5)，

(3) $\{(i,\tau_i),(i+2,\tau_i+2)$ 或 $(i,\tau_i),(i+2,\tau_i-2)\}$(當最小內點距離為8)，

(4) $\{(i,\tau_i),(i+1,\tau_i+3)$ 或 $(i,\tau_i),(i+1,\tau_i-3)\}$(當最小內點距離為10)，

(5) $\{(i,\tau_i),(i+2,\tau_i+3)$ 或 $(i,\tau_i),(i+2,\tau_i-3)\}$(當最小內點距離為13)，

(6) $\{(i,\tau_i),(i+1,\tau_i+4)$ 或 $(i,\tau_i),(i+1,\tau_i-4)\}$(當最小內點距離為17)，

(7) $\{(i,\tau_i),(i+3,\tau_i+3)$ 或 $(i,\tau_i),(i+3,\tau_i-3)\}$(當最小內點距離為18)，

依此類推。

若 $n=k^2$，最小內點距離不可能為 k^2+4。因為若最小內點距離為 k^2+4，任兩點的距離均須不小於 k^2+4，則排列 τ 中任相鄰兩點須相差 $k+1$ 以上，(對應 A_τ 中，任何 X 座標相鄰之兩點座標 $(i,\tau_i),(i+1,\tau_j)$ 中的 Y 座標須相差 $k+1$ 以上，即 $|\tau_i-\tau_j|\geq k+1$，此兩點的距離至少為 $(k+1)^2+1$，大於 k^2+4)，排列 τ 中間隔1點的任兩點須相差 $k+1$ 以上，(對應 A_τ 中，任何 X 座標間隔1點之兩點座標 $(i,\tau_i),(i+2,\tau_j)$ 中的 Y 座標也須相差 k 以上，當 $|\tau_i-\tau_j|=k$，此兩點的距離為 k^2+4，即最小內點距離)，排列 τ 中間隔2點的任兩點須相差 k 以上，(對應 A_τ 中任兩點座標 $(i,\tau_i),(i+3,\tau_j)$ 中的 Y 座標也須相差 k 以上，當 $|\tau_i-\tau_j|=k$，此兩點的內點距離為 k^2+9，大於 k^2+4)，依此類推，A_τ 中間隔 a 點的任兩點座標 $(i,\tau_i),(i+a+1,\tau_j)$ 中的 Y 座標須相差 b 以上(當 $|\tau_i-\tau_j|=b$，此 a,b 須使兩點的內點距離 $b^2+(a+1)^2$ 大於 k^2+4)，滿足上述規則的排列不存在。因為排列 $(k+1,2(k+1),\ldots,k^2-1,k,2k+1,\ldots,k^2-2,\ldots,2,k+3,\ldots,k^2-k,1,k+2,\ldots,k^2-k-1,k^2)$ 雖滿足任相鄰兩點須相差 $k+1$ 以上，但此排列中兩點座標 $(1,k+1),(k,k))$ 的距離為 $(k-1)^2+1$，小於 k^2+4。不滿足間隔 a 點的任兩點座標中的 Y 座標須相差 b 以上，a,b 須使兩點的內點距離 $b^2+(a+1)^2$ 大於 k^2+4。

若最小內點距離為 k^2+1，則排列 τ 中任相鄰的兩點須相差 k 以上(對應 A_τ 中任兩點座標 $(i,\tau_i),(i+1,\tau_j)$ 中的 Y 座標須相差 k 以上，當 $|\tau_i-\tau_j|=k$，此兩點的距離為 k^2+1，即最小內點距離)，排列 τ 間隔1點的任兩點也須相差 k 以上(此兩點的距離至少為 k^2+4，大於 k^2+1)，排列 τ 中間隔2點的任兩點也須相差 k 以上(此兩點的距離至少為 k^2+9，大於 k^2+1)，依此類推，排列 τ 中間隔 a 點的任兩點須相差 b 以上(此 a,b 須使兩點的距離 $b^2+(a+1)^2$

大於 k^2+1)，滿足上述規則的排列若爲 $(k, 2k, \ldots, k^2, k-1, 2k-1, \ldots, k^2-1, \ldots, 1, k+1, \ldots, (k-1)k+1)$，此排列下，$A_{\underline{\tau}}$ 中的最小內點距離爲 k^2+1。因座標 $(1,k), (k+1, k-1), \ldots, (k^2-2k+1, 2), (k^2-k+1, 1)$，此 k 點構成拉丁超方陣圖形之一邊，且因旋轉角度爲拉丁超方陣圖形一邊與 X 軸之夾角，故此 n 點的圖形爲旋轉一平面上 k^2 標準因子實驗設計，旋轉角度 $\theta = tan^{-1}(k)$ 或 $\theta = tan^{-1}(1/k)$。

<u>定理二之證明</u>：依定理一可得 n 點最大化最小內點距離的排列之一爲(k, 2k, …, k^2, k-1, 2k-1, …, k^2-1, …, 1, k+1, …, (k-1)k+1)，將 $n+1$ 加在 n 點最大化最小內點距離的排列之前，則可得到 $n+1$ 點的排列爲 $(k^2+1, k, 2k, \ldots, k^2, k-1, 2k-1, \ldots, k^2-1, \ldots, 1, k+1, \ldots, (k-1)k+1)$，因爲此排列後 n 點任兩點的距離最小爲 k^2+1，欲求 $n+1$ 點排列下任兩點的距離最小值，只需計算點座標 $(1, k^2+1)$ 與其他 n 點座標 $(2,k), (3,2k), \ldots, (k+1, k^2)$，$(k+2, k-1), \ldots, (k^2+1, (k-1)k+1)$ 的距離是否小於 k^2+1。因點座標 $(1, k^2+1)$ 和 $(2,k)$ 距離爲 $1+(k^2+1-k)^2 \geq k^2+1$，點座標 $(1, k^2+1)$ 和 $(3, 2k)$ 距離爲 $4+(k^2-2k+1)^2 \geq k^2+1, \ldots$，點座標 $(1, k^2+1)$ 和 $(k^2+1, (k-1)k+1)$ 距離爲 $k^4+k^2 \geq k^2+1$，故此排列下任兩點的最小內點距離爲 k^2+1。

接著考慮是否存在其他排列的最小內點距離大於 k^2+1，若存在最小內點距離爲 k^2+4 的排列，該排列下任兩點的內點距離須不小於 k^2+4，則 $n+1$ 點排列 $\underline{\tau} = (\tau_1, \ldots, \tau_{n+1})$ 中任相鄰的兩點須相差 $k+1$ 以上(此兩點的距離至少爲 $(k+1)^2+1$, 大於 k^2+4)，排列 $\underline{\tau}$ 中間隔 1 點的任兩點也須相差 k 以上(此兩點的距離至少爲 k^2+4，即最小內點距離)，排列 $\underline{\tau}$ 中間隔 2 點的任兩點也須相差 k 以上(此兩點的距離至少爲 k^2+9，大於 k^2+4)，依此類推，排列 $\underline{\tau}$ 中間隔 a 點的任兩點也須相差 b 以上(此 a, b 須使兩點的距離 $b^2+(a+1)^2$ 大於 k^2+4)，滿足上述規則的排列不存在，因排列若爲 $(k^2+1, k+1, 2(k+1), \ldots, k^2-1, k, 2k+1, \ldots, k^2-2, \ldots, 2, k+3, \ldots, k^2-k, 1, k+2, \ldots, k^2-k-1, k^2)$，此排列雖滿足任相鄰兩點須相差 $k+1$ 以上，但此排列中兩座標點 $(1, k^2+1), (k, k^2-1)$ 的距離爲 $(k-1)^2+4$, 小於 k^2+4。同理可證將 $n+1$ 加在 n 點最大化最小內點距離的排列之後的情形，則可得到 $n+1$ 點的最大化最小內點距離的排列之一爲 $(k^2+1, k, 2k, \ldots, k^2, k-1, 2k-1, \ldots, k^2-1, \ldots, 1, k+1, \ldots, (k-1)k+1)$, 或

$(k, 2k, \ldots, k^2, k-1, 2k-1, \ldots, k^2-1, \ldots, 1, k+1, \ldots, (k-1)k+1, k^2+1)$。

<u>定理三之證明</u>：依定理一 k^2 點最大化最小內點距離為 k^2+1，$(k+1)^2$ 點最大化最小內點距離為 $(k+1)^2+1$，依定理二 k^2+1 點最大化最小內點距離至少為 k^2+1。

假設 $n = k^2+2k < (k+1)^2$，且 n 點最大化最小內點距離大於 $(k+1)^2+1$，若存在最小內點距離大於 $(k+1)^2+1$ 的排列，該排列下任兩點的內點距離須不小於 $(k+1)^2+4$，則 n 點排列 $\underline{\tau} = (\tau_1, \ldots, \tau_n)$ 中任相鄰的兩點須相差 $k+2$ 以上(此兩點的距離至少為 $(k+2)^2+1$, 大於 $(k+1)^2+4$)，排列 $\underline{\tau}$ 中間隔1點的任兩點也須相差 $k+1$ 以上(此兩點的距離至少為 $(k+1)^2+4$，即最小內點距離)，排列 $\underline{\tau}$ 中間隔2點的任兩點也須相差 $k+1$ 以上(此兩點的距離至少為 $(k+1)^2+9$，大於 $(k+1)^2+4$)，依此類推，排列 $\underline{\tau}$ 中間隔 a 點的任兩點也須相差 b 以上(此 a, b 須使兩點的距離 $b^2+(a+1)^2$ 大於 $(k+1)^2+4$)，滿足上述假設的排列不存在，因排列若為 $(k+2, 2(k+2), \ldots, k(k+2), k+1, 2k+3, \ldots, k^2+2k-1, \ldots, 2, k+4, \ldots, k^2+k, 1, k+3, \ldots, k^2+k-1)$，此排列雖滿足任相鄰兩點須相差 $k+2$ 以上，但此排列中兩座標點 $(1, k+2), (k+1, k+1)$ 的距離為 k^2+1, 小於 $(k+1)^2+1$。同理可證若 $n < k^2+2k$，且 n 點最大化最小內點距離大於 $(k+1)^2+1$ 的排列不存在。

<u>定理四之證明</u>：

(1) 因為固定兩點座標的第一維為 i 和 $i+1$，其餘 $d-1$ 維座標有 m_l 維取相差 b_l 以上的排列，其兩點間距離即為 $1+\sum_{l=1}^{r} m_l b_l^2$，其中 $\sum_{l=1}^{r} m_l$=d-1。

(2) 因為固定兩點座標的第一維為 i 和 $i+a_r$ 下，其餘 $d-1$ 維座標取相差 b_r 以上的排列，其兩點間的距離即為 $a_r^2+(d-1)b_r^2$。

(3) 因為 $d = n$，當 n 點座標是 (1,2,...,n-1,n), (2,3,...,n,1), (3,4,...,1,2), ..., (n,1,...,n-2,n-1)時，任兩點座標 d 維中有一維相差 $n-1$，其最小內點距離為 $n(n-1)$。接著考慮 d 維下是否存在其他排列的最小內點距離大於 $n(n-1)$。假設 $k^2 < n < (k+1)^2$，由定理三，2維下 n 點最大化最

小內點距離不大於$(k+1)^2+1$，則2維下最大化最小內點距離的排列中，任相鄰的兩點須相差$k+1$以上(此兩點的距離至少為$(k+1)^2+1$)，欲求d維下最大化最小內點距離的排列，固定兩點座標的第一維為i和$i+1$下，其餘$d-1$維座標取相差$k+1$以上的排列，其兩點間的距離為$1+(n-1)(k+1)^2 \geq 1+n(n-1)$，但此距離並不是最小內點距離，因$d$維下$n$點座標若為(1,k+1,...,k+1), (2,2(k+1),...,2(k+1)), ..., (k-1,$k^2-1,\ldots,k^2-1), (k,k,\ldots,k),\ldots,(n,k^2,\ldots,k^2)$，此排列雖滿足兩點座標中其餘$d-1$維座標相差$k+1$以上，但此排列中兩座標點$(1,k+1,\ldots,k+1)$和$(k,k,\ldots,k)$的距離為$(k-1)^2+(n-1)$，小於$(n-1)^2+(n-1)=n(n-1)$，故對應最小內點距離為$n(n-1)+1$的排列不存在。

參考文獻

Beattie, S.D. and Lin, D.K.J. (1998). Rotated factorial designs for computer experiments. Technical Report TR#98-01, The Pennsylvania State University, Department of Statistics. Submitted to the Journal of the Royal Statistical Society, Series B.

Beattie, S.D., Lin, D.K.J., and Morris, M.D. (1997). Designing computer experiments: Rotated factorial designs. Technical Report TR#97-06, The Pennsylvania State University, Department of Statistics.

Box, G.E.P. and Draper, N.R. (1959). A basis for the selection of a response surface design. Journal of the American Statistical Association, 54, 622-654.

Easterling, R.G. (1989). Comment: Design and analysis of computer experiments. Statistical Science, 4, 425-427.

Johnson, M.E., Moore, L.M. and Ylvisaker, D. (1990). Minimax and maximin distance designs. Journal of Statistical Planning and Inference, 26, 131-148.

Koehler, J.R. and Owen, A.B. (1996). Computer experiments. In S. Ghosh and C.R. Rao (Eds.), Handbook of Statistics, Volume 13, Chapter 9, pp.261-308. Elsevier Science B. V.

McKay, M.D., Beckman, R.J. and Conover, W.J. (1979). A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. Technometrics, 21, 239-245.

Morris, M.D.and Mitchell, T.J. (1992). Exploratory designs for computational experiments. Technical Report TM-12045, Oak Ridge National Laboratory.

Owen, A.B. (1992). Orthogonal arrays for computer experiments, integration and visualization. Statistica Sinica, 2, 439-452.

Owen, A.B. (1994). Controlling correlations in Latin hypercube samples. Journal of the American Statistical Association, 89, 1517-1522.

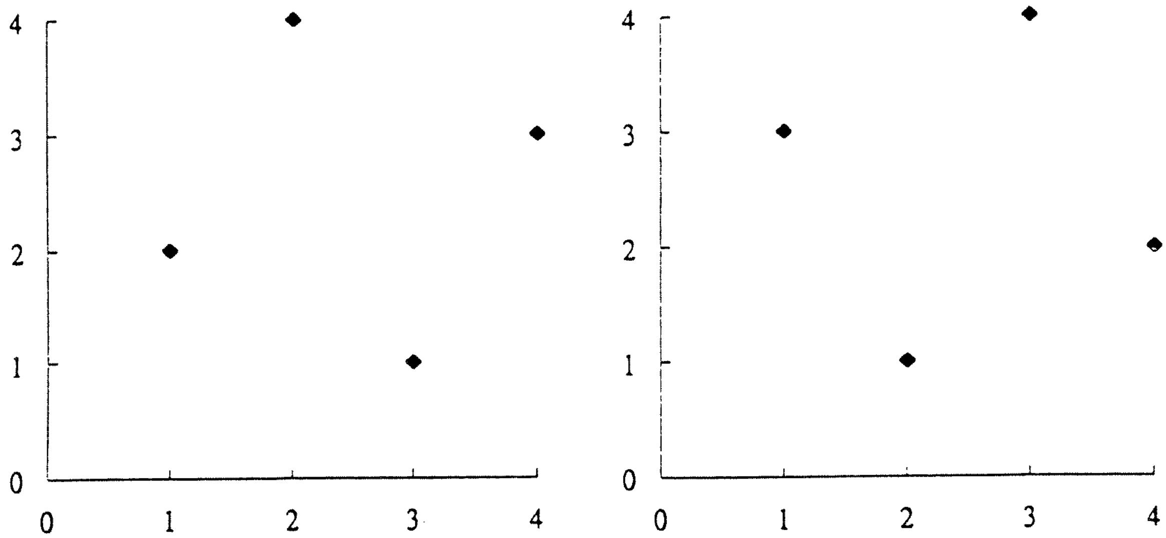
Park, J.S. (1994). Optimal Latin-hypercube designs for computer experiments. Journal of Statistical Planning and Inference, 39, 95-111.

Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J. and Wynn, H.P. (1989). Design and analysis of computer experiments. Statistical Science, 4, 409-423.

Tang, B. (1993). Orthogonal array-based Latin hypercubes. Journal of the American Statistical Association, 88, 1392-1397.

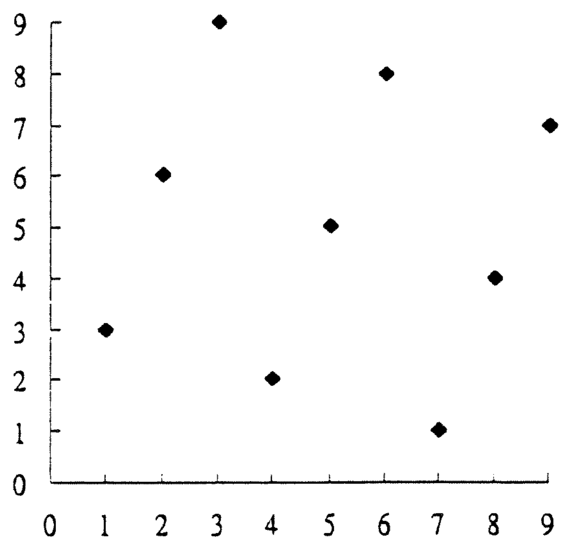
Tang, B. (1994). A theorem for selecting OA-based Latin hypercubes using a distance criterion. Communications in Statistics: Theory and Methods, 23, 2047-2058.

圖1. 4點最大化最小內點距離拉丁超方陣設計



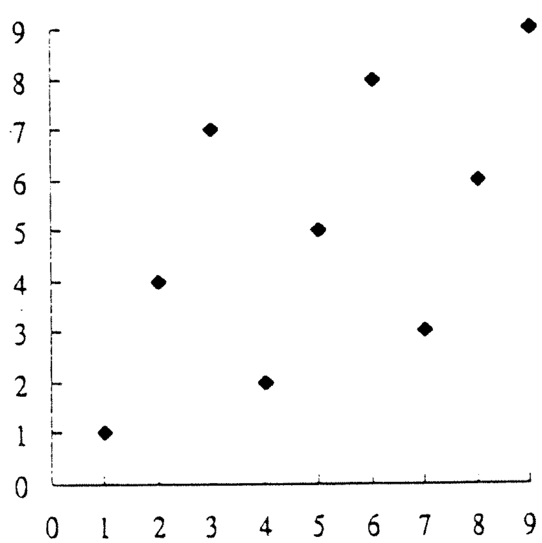
$\tau = (2, 4, 1, 3)$ $\tau = (3, 1, 4, 2)$

圖2. 9點最大化最小內點距離超方陣設計



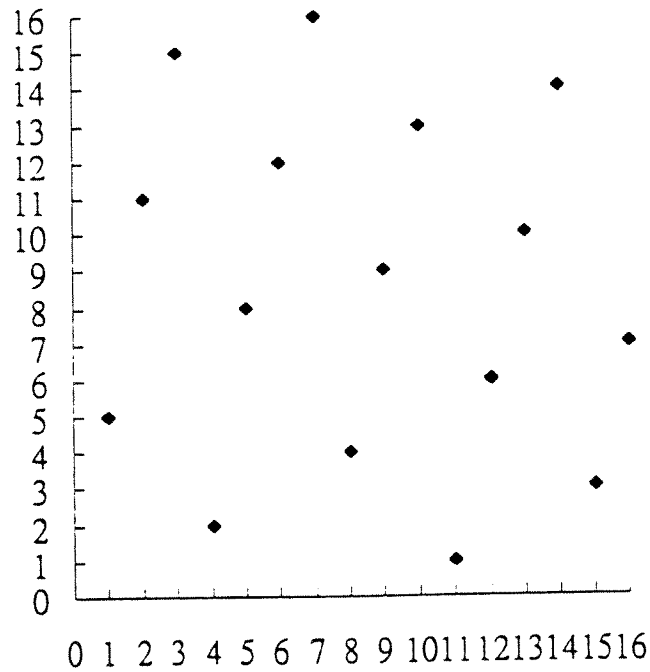
$\tau=(3,6,9,2,5,8,1,4,7)$

圖3. 9點非最大化最小內點距離超方陣設計

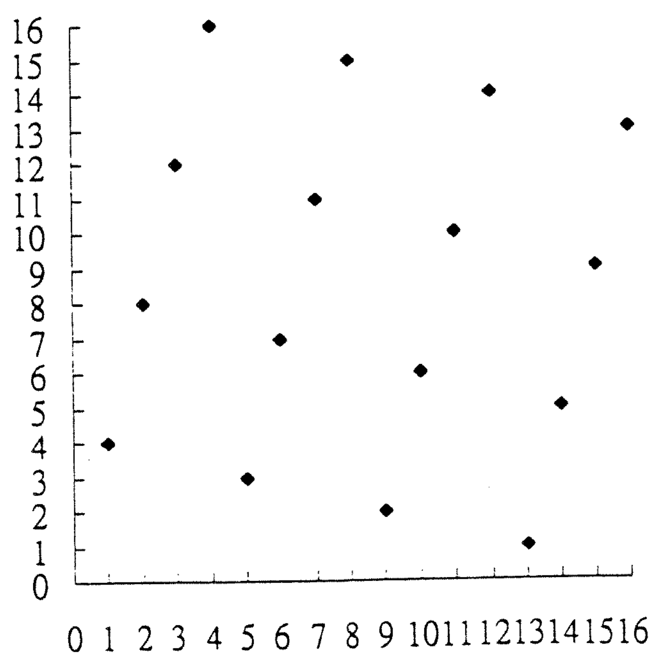


$\tau=(1,4,7,2,5,8,3,6,9)$

圖4.　16點最大化最小內點距離超方陣設計

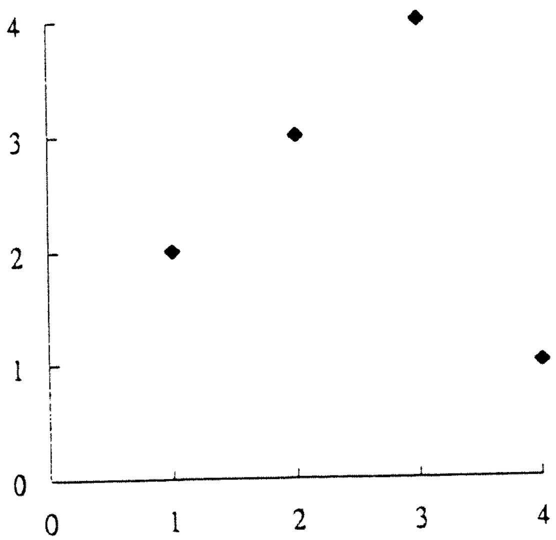


τ=(5, 11, 15, 2, 8, 12, 16, 4, 9, 13, 1, 6, 10, 14, 3, 7)

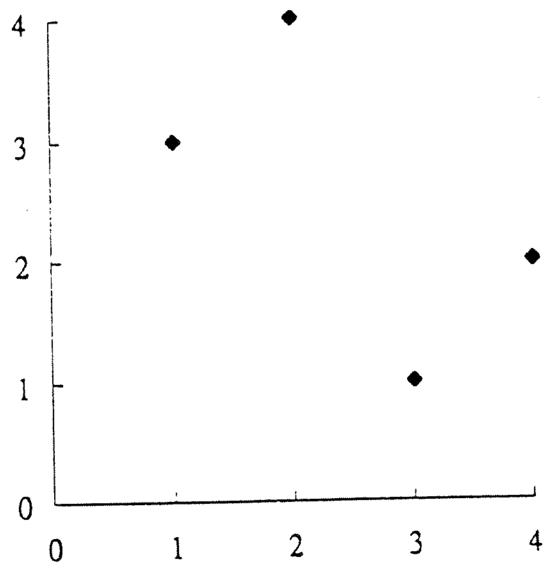


τ=(4, 8, 12, 16, 3, 7, 11, 15, 2, 6, 10, 14, 1, 5, 9, 13)

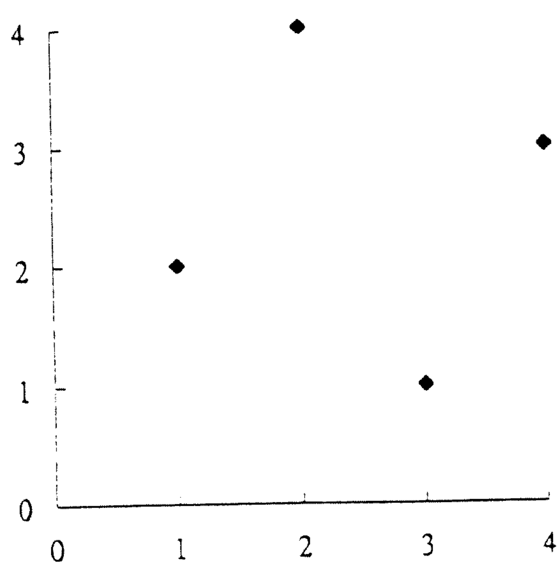
圖5. $n = 4$，用最小化最大內點距離方法所找到的排列圖形沒有規則性



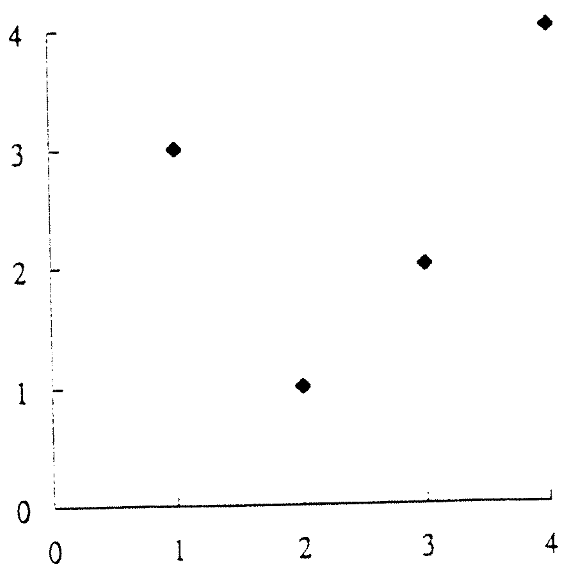
$\tau = (2, 3, 4, 1)$



$\tau = (3, 4, 1, 2)$

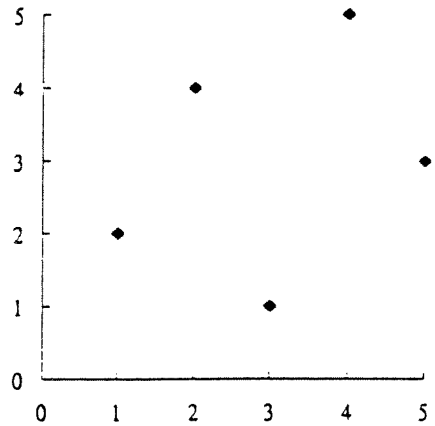


$\tau = (2, 4, 1, 3)$

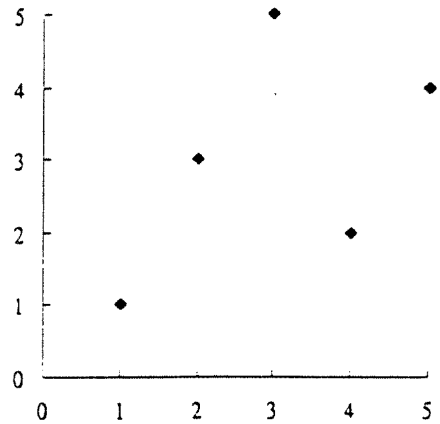


$\tau = (3, 1, 2, 4)$

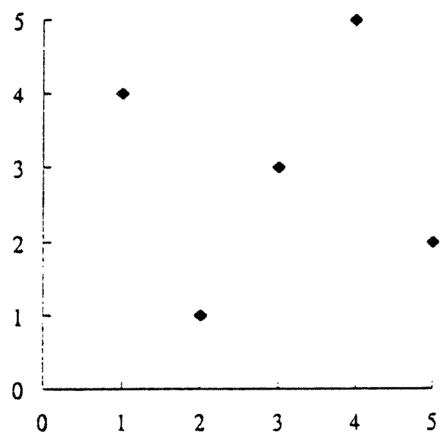
圖6. 當$n \neq k^2$，用最大化最小內點距離方法所找到的排列圖形沒有規則性和唯一性



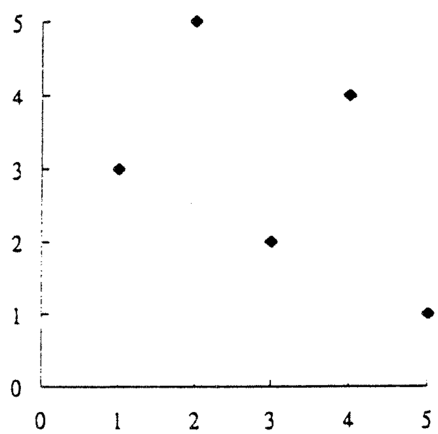
$\tau=(2,4,1,5,3)$



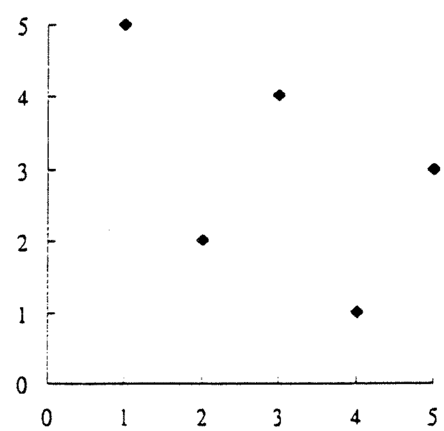
$\tau=(1,3,5,2,4)$



$\tau=(4,1,3,5,2)$

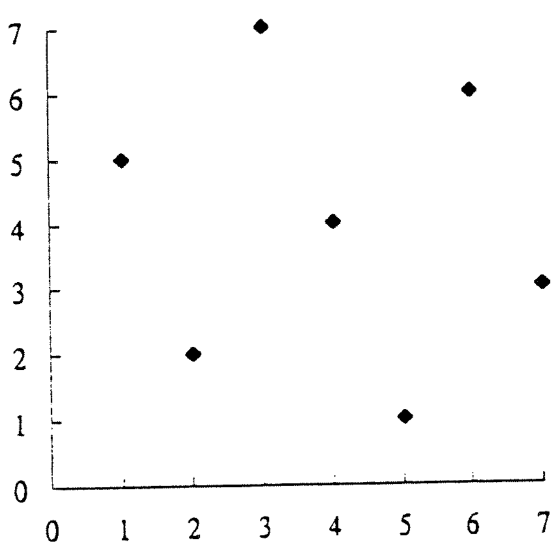


$\tau=(3,5,2,4,1)$

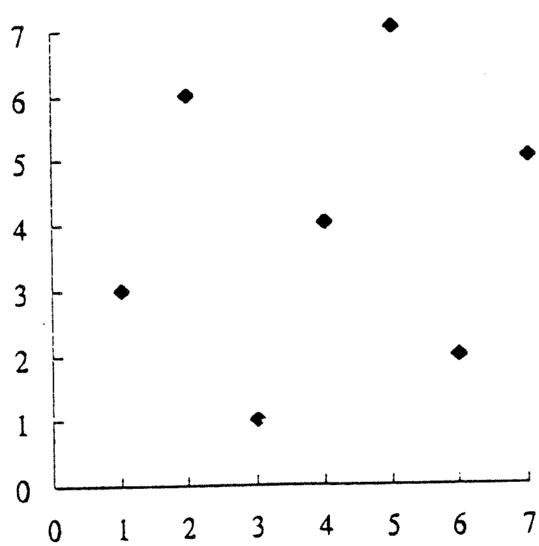


$\tau=(3,5,4,1,3)$

圖7. 7點最大化最小內點距離超方陣設計



$\tau = (5, 2, 7, 4, 1, 6, 3)$



$\tau = (3, 6, 1, 4, 7, 2, 5)$

MaxMin MID Latin Hypercube

Mi-Chia Ma
Department of Statistics
National Cheng-Kung University
Dennis K.J. Lin
Department of Management Science and Information Systems
The Pennsylvania State University

ABSTRACT

Computer experiments usually are used to instead of expensive physical experiment because it is more cheap and rapid. Because there is no random error in computer experiments, standard factorial designs are inadequate in the absence of certain main effects. The replication of standard factorial designs can not be used to estimate this error, but instead produces redundancy. Mckay, Beckman, and Conover (1979) use the latin hypercube in computer experiments. A n-point ($n = k^d$) latin hypercube design matrix is constructed by randomly permuting the integers $\{1, \cdots, n\}$ for each factor and rescaling to the experimental region, so that the points project uniquely and equally-spaced to each dimension. Because of the unique projections, use of latin hypercubes allows for great flexibility in model fitting.

This paper uses the difference of two point coordinates of minimum interpoint distance to find the maximum distance in $d = 2$ dimension space. The maximum distance design for $n = k^2$ is the same as the k^2-point rotated full factorial design of Beattie, Lin, and Morris (1997) by rotated standard k^2 factorial design and the corresponding maximum distance is $k^2 + 1$. If ones minimize the maximum interpoint distance, the design can not be unique and have no regularity. The maximum distance for $n \neq k^2$ are also not unique and have no regularity. Finally, if $d = n$, the coordinates of n points of maximum distance design and the corresponding maximum distance are obtained.

Key words and phrases: Computer experiment, Latin hypercube, maximum distance.