中國統計學報
第 38 卷第 4 期
八十九年十二月
331-351 頁

均勻試驗設計的理論及其應用

方開泰 林共進
香港浸會大學數學系 美國賓州州立大學管理科學及資訊系統系

摘 要

本文扼要介紹了均勻設計的理論和方法。均勻設計是部份因子實施的設計方法之一，具有使用方便、可選擇設計豐富、試驗次數少、對模型的變化穩健等優點。均勻設計也是電腦仿眞試驗的主要方法之一。本文介紹均勻設計的基本想法和一些近來發展，其中包括了各種建模方法和均勻設計的優良性。

關鍵詞： 均勻設計，部分因子實施，電腦仿眞試驗。

美國數學會分類索引： 主要 62K99；次要 62K15。

1. 引言

科學試驗是人類文明和科技進步的重要手段，許多行之有效的統計試驗設計方法，如隨機區組試驗、拉丁方格設計、不完全拉丁方格設計、正交試驗設計、最優設計、穩健設計、田口設計等已在各領域中普遍使用。隨著當代高科技的發展，要求有更多種類的試驗設計方法。例如，在一個系統中，有s個輸入參數$x_1,\ldots,x_s$，經過複雜的計算後可求得輸出y，顯然y之期望值是$x_1,\ldots,x_s$的一個函數，$y=g(x_1,\ldots,x_s)$，但函數g可能沒有明顯地解析表達式，且由$x_1,\ldots,x_s$計算$y=g(x_1,\ldots,x_s)$頗爲複雜(例如解一系列微分方程組)，即使用電腦也需較長時間，該系統的管理者希望外達到下列幾個目標：

(a) 希望知道y在試驗範圍內的均值。不失一般性，可假定試驗範圍(即輸入參數$x_1,\ldots,x_s$的取值範圍)爲s維空間中的單位立方體$C^s=[0,1]^s$。輸出y在C^s上的均值是函數$g(x_1,\ldots,x_s)$在C^s上的積分

$$E(y)=\int_{C^s} g(x_1,\ldots,x_s)\,dx_1\cdots dx_s=m(g)\,, \tag{1.1}$$

(b) 希望能給出y和$x_1,\ldots,x_s$之間一個近似的解析表達式，例如

$$y\approx\sum_{i=1}^{k}\beta_i g_i(x_1,\ldots,x_s)。 \tag{1.2}$$

式中函數g_i已知，β_i未知。這個表達式簡單、易算。

(c) 希望能知道輸出y的極大值(或極小值)和相應的最佳輸入參數組合$(x_1^*,\ldots,x_s^*)$。

如何解決上述的問題呢？最直接的想法是將輸入參數打成網格，對每個網格點預先算出相應的輸出，建立一個數據庫，使用時就像查字典一樣或用字典上的值進行插值。這個想法一般是行不通的，因爲輸入參數的範圍常常很大，預先算出這本“字典”需要數年時間。一個可行的想法是精選一批有代表的、爲數不多的n個參數組合，預先算出它們的輸出，得一數據集$\{x_{k1},\ldots,x_{ks},\ y_k,\ k=1,\ldots,n\}$，然後建立$y$與$x_1,\ldots,x_s$之間的近似關係(例如模型(1.2))用來代替原模型$y=g(x_1,\ldots,x_s)$，詳見圖1。這一想法提出了兩個要求：

(1) 給出能填滿 C^s 空間的試驗設計方法；

(2) 給出一套建立輸入和輸出統計模型的方法。

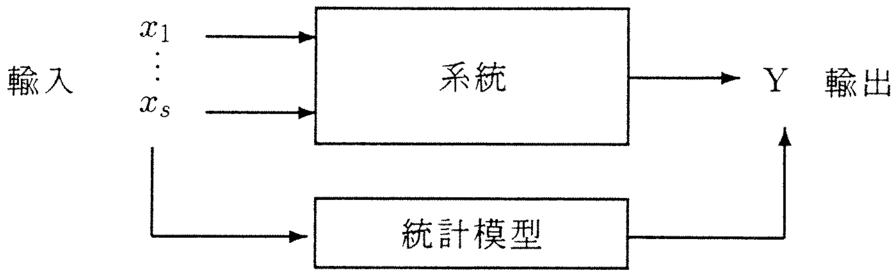


圖1

為了解決上述的問題，形成了一個新的試驗設計的分枝，稱為電腦仿眞試驗設計(Design of computer experiments)。許多作者提出了不少方法，近期的綜合評述可見Bates, Buck, Riccomago and Wynn (1996) 及Koehler and Owen (1996)。在所有的方法之中，上述兩篇綜述，均給予均勻設計充分肯定。

均勻設計是由王元和方開泰(方開泰(1980)，Wang and Fang(1981)) 首先提出的，促使他們發明均勻設計的動力正是來自於上述的電腦仿眞試驗問題，由於當時的電腦計算速度很慢(和現代電腦相比)，對電腦仿眞試驗設計的要求更為迫切。均勻設計在過去的廿年中，理論有深入的發展，應用面越來越廣，因為均勻設計也可以看成部份因子設計(Fractional factorial design)中的一種方法，同時又可以看成為穩健設計(Robust design)的一種方法。目前均勻設計如正交設計一樣，已將設計表格化，很受使用者歡迎，所有均勻設計表均列於網頁http://www.math.hkbu.edu.hk/UniformDesign 。本文對均勻設計作一簡單介紹，希望能引起讀者對均勻設計的了解和興趣。本文大致安排如下：

第二節介紹均勻設計的基本想法並透過一個實例來說明均勻設計在實際應用的作業情形。

第三節進一步探討如何將現有給定的均勻設計表格靈活應用在幾種有特殊需求狀況。

第四節針均勻設計的理論部份做一個概略性的介紹並對未來發展提出一

些粗淺的建議。

2. 均勻設計

在一個試驗中有s個因素，若計劃作n次試驗，試驗的範圍不妨設爲單位立方體C^s。均勻設計是在C^s上取點集$\mathcal{P}_n=\{\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_n\}$使其在$C^s$上均勻散佈。給定$n$和$s$，如何求得均勻設計，有幾個問題需要研究：

(a) 如何制定均勻性準則；

(b) 在給定的均勻性準則下如何獲得最優化均勻設計；

(c) 試驗後的建模(modeling)和數據分析。

本節對上述三點逐一進行介紹：

2.1 均勻性測度

令$\mathcal{P}=\{\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_n\}$爲$C^s$上的點集，在數論方法(number-theoretic methods)或擬蒙特卡羅方法(quasi-Monte Carlo methods)中，普遍使用L_p−星偏差(Star L_p- discrepancy)。其定義爲

$$D_p(\mathcal{P}_n)=\left[\int_{C_s}\left|\frac{N(\mathcal{P}_n,[\mathbf{0},\boldsymbol{x}))}{n}-Vol([\mathbf{0},\boldsymbol{x}))\right|^p\ d\boldsymbol{x}\right]^{1/p}, \tag{2.1}$$

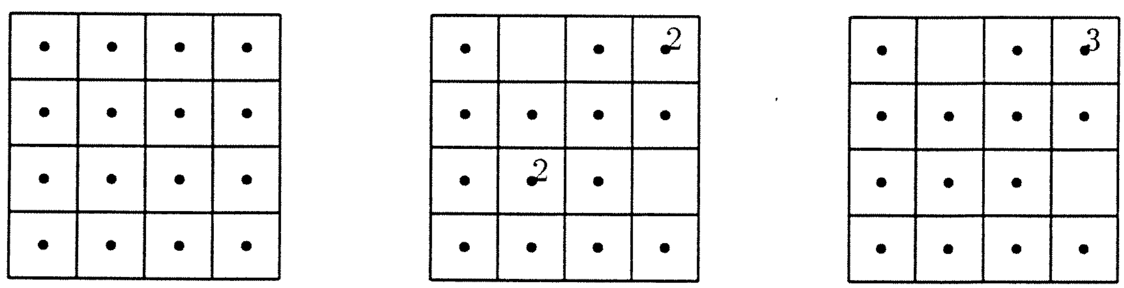
式中$[\mathbf{0},\boldsymbol{x})=[0,x_1)\times\cdots\times[0,x_s)$，$Vol([\mathbf{0},\boldsymbol{x}))$爲$[\mathbf{0},\boldsymbol{x})$的體積，顯然，$\mathrm{Vol}([\mathbf{0},\boldsymbol{x}))=x_1\ldots x_s$，$N(\mathcal{P}_n,[\mathbf{0},\boldsymbol{x}))$爲$\mathcal{P}_n$中的點落入到$[\mathbf{0},\boldsymbol{x})$中的點數。顯見，$D_p(\mathcal{P}_n)$越小，表示$\mathcal{P}_n$在$C_s$上散度越均勻。在理論和實用中，以$D_\infty(\mathcal{P}_n)$和$D_2(\mathcal{P}_n)$最爲普遍，其中

$$D(\mathcal{P}_n)\equiv D_\infty(\mathcal{P}_n)=\max_{\boldsymbol{x}\in C_s}\left|\frac{N(\mathcal{P}_n,[\mathbf{0},\boldsymbol{x}))}{n}-\mathrm{Vol}([\mathbf{0},\boldsymbol{x}))\right| \tag{2.2}$$

稱爲$\mathcal{P}$的星偏差，它在統計的分布擬合試驗(Goodness-of-fit test)中稱爲Smirnov-Kolmogorov統計量。Fang等(2000)發現$D(\mathcal{P}_n)$不夠靈敏，而$D_2(\mathcal{P}_n)$由於忽略了所有低維空間的投影偏差$\left|\frac{N(\mathcal{P}_n,[\mathbf{0},\boldsymbol{x}))}{n}-\mathrm{Vol}([\mathbf{0},\boldsymbol{x}))\right|$，也會導致不合理結果。例如圖2給出了三個二因素設計，有16個試驗點，設計(a)是4×4網格

點；設計(b)是將設計(a)移動兩點至另兩個試驗點處，使其重覆兩次；設計(c)是移動設計(a)的兩點至右上角使該點重覆三次。顯見，(a)的均勻性比(b)好，(b)的均勻性比(c)好。但數值結果顯示，三個設計有相同的D值，而(c)有最小的D_2值。爲此，Hickernell(1998a,b)提出了一些新的均勻性測度，其中以中心化L_2-偏差(Centered L_2-discrepancy)和可卷L_2-偏差(Wrap-around L_2-discrepancy)的性質爲最好。本文以下的討論均用中心化L_2-偏差(簡記DL_2)來說明。DL_2易於計算，便於比較不同設計的均勻性，和尋求均勻設計。給定n和s，所謂均勻設計就是求點集$\mathcal{P}_n^* = \{\boldsymbol{x}_1^*, \ldots, \boldsymbol{x}_n^*\} \subset C^s$使

$$DL_2(\mathcal{P}_n^*) = \min_{\mathcal{P}_n} DL_2(\mathcal{P}_n)。 \tag{2.3}$$



(a)正交設計 $CL_2^2 = .01138$ $DL_2^2 = .00357$ $D = .23438$

(b) U-設計 $CL_2^2 = .01236$ $DL_2^2 = .00454$ $D = .23438$

(c)非U-設計 $CL_2^2 = .01797$ $DL_2^2 = .00345$ $D = .23438$

圖2 三種設計

2.2 均勻設計表的構造

對於單因素試驗($s = 1$)，Fang, Ma and Winker (1999)證明，均勻設計爲等距離點集$\mathcal{P}_n^* = \{\frac{1}{2n}, \frac{3}{2n}, \ldots, \frac{2n-1}{2n}\}$，其$DL_2(\mathcal{P}_n^*) = \frac{1}{\sqrt{12n}}$，對於多因素試驗，當$n$和$s$增加時，求均勻設計的計算複雜性(complexity of the computation)可能是一個NP Hard問題。所以，必須限制均勻設計有一定的結構。理論

和經驗證明，令備選均勻設計滿足如下的要求是合理的(參見Fang, Ma and Winker (1999))：

a) 因素的諸水平重覆出現的次數一樣；

b) 若因素取q個水平，這q個水平取爲$\frac{1}{2q}, \frac{3}{2q}, \ldots, \frac{2q-1}{2q}$。

考慮有s個因素，它們分別有$q_1, \ldots, q_s$個水平，符合上述兩個條件的試驗設計集記爲$\mathcal{U}(n; q_1, \ldots, q_s)$，若其中有些因素的水平數相等，相應的集合記爲$\mathcal{U}(n; q_1^{r_1}, \ldots, q_m^{r_m})$, $r_1 + \cdots + r_m = s$。若所有的因素都有q個水平，相應集合記爲$\mathcal{U}(n; q^s)$。在C^s上的任一點$\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$對應一個$n \times s$的矩陣$\boldsymbol{U}$，它的行間量由$\boldsymbol{x}_1', \ldots, \boldsymbol{x}_n'$組成。故集合$\mathcal{U}(n; q_1, \ldots, q_s)$中的元素可視爲一個$n \times s$矩陣。

定義1：給定$(n; q_1, \ldots, q_s)$，相應的均勻設計$\boldsymbol{U}^* \in \mathcal{U}(n; q_1, \ldots, q_s)$，並滿足

$$DL_2(\boldsymbol{U}^*) = \min_{\mathcal{U}} DL_2(\boldsymbol{U})。$$

式中極小是在集合$\mathcal{U}(n; q_1, \ldots, q_s)$上計算的。

在實際中，人們習慣於用$1, 2, \ldots, q$表示q個水平，將定義1中的均勻設計$\boldsymbol{U}^*$中第j $(j = 1, \ldots, s)$的q_j個水平用$1, 2, \ldots, q_j$代替$\frac{1}{2q_j}, \frac{3}{2q_j}, \ldots, \frac{2q_j-1}{2q_j}$後所得的矩陣列成表，稱爲**均勻設計表**，並記爲$U_n(q_1 \times \cdots \times q_s)$。若有些$q_j$相等時記爲$U_n(q_1^{r_1} \times \cdots \times q_m^{r_m})$, $r_1 + \cdots + r_m = s$，特別$U_n(q^s)$表示所有因素的水平數均爲q。

給定$(n; q_1, \ldots, q_s)$，相應的均勻設計表有很多。例如將一個均勻設計表的n行作置換(permutation)或將它的s列作置換，所獲的表仍爲均勻設計表。兩個均勻設計表稱爲等價的。若將其中一個的行和列作適當的置換可獲得另外一個。今後，我們將不區分等價的均勻設計。

在均勻設計發展的早期，由於當時電腦的速度不夠快，隨機優化的方法不夠成熟，均勻設計的備選範圍需要進一步縮小。最初王元、方開泰(1981)用好格子點法產生U-矩陣(即U-矩陣的一個子集)作爲備選設計(candidate design)，後來，方開泰、邵尉慈、潘建新(1999)用循環拉丁方格來生成備選設計，方燕(1995)利用正交設計的框架擴展爲備選設計集。當n不太大時(如$n \le 31$)，上述三種方法能獲得滿意的結果。

求均勻設計是一個優化問題，由於求解是在一個離散的空間，目標函數的

連續性和可微性已失去意義，從而傳統的各種優化方法(如梯度法)失去了效力。近20年來發展了許多全新的優化方法，如淬火算法(simulated annealing)、遺傳算法(genetic algorithm)、門限接收等(threshold accepting)。這些方法都屬於隨機優化方法，可用於目標函數沒有連續性的情形，特別是當目標函數多峯時(multiextremal)，如果方法運用恰當，可以求得相當滿意的解。目前所用的表均是通過門限接受法(threshold accepting)獲得的。其求解的詳細過程，可參見Fang, Ma and Winker (1999)。爲數衆多的均勻設計表可從網頁http://www.math.hkbu.edu.hk/UniformDesign/ 中獲得。例如表2.1列舉了 $U_7(7^3)$，表示該設計要做7次試驗，可安排三個水平的因素。

2.3 均勻設計的實施

我們通過一個實際試驗介紹如何運用均勻設計在工業試驗中以及相關的建模和數據分析。

例 1：在某化工的合成工藝中，爲了提高產量，試驗者選了三個因素：原料配比 (x_1)，化學有機物吡啶之含量 (x_2) 和反應時間 (x_3)，爲了揭示產量 (y) 和三個因素之間的關係，每個因素均取了7個水平：

原料配比：1.0, 1.4, 1.8, 2.2, 2.6, 3.0, 3.4
吡啶量： 10, 13, 16, 19, 22, 25, 28
反應時間：0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5

該試驗的設計和數據分析步驟如下：

A. 選擇適當的均勻設計表

顯然，任一均勻設計表 $U_n(7^3)$, $n = 7, 14, 21, \ldots$ 均適於安排這項試驗。該試驗者選擇了 $U_7(7^3)$，該表列於表2.1的左邊。

B. 試驗的設計和實施

將三個因素分別放在表 $U_7(7^3)$ 的三列，然後將因素的實際7個水平代替表中的7個水平，獲得表2.1右邊的試驗方案。七次試驗的先後次序，應當隨機地決定，以減少試驗環境緩慢變化帶來的干擾。試驗的輸出 (y) 是回收率，

回收率越高表示產量越高。

表2.1 $U_7(7^3)$及相應的試驗方案與收率

No	1	2	3	原料配比 x_1	呲啶量 x_2	反應時間 x_3	回收率 y
1	1	5	4	1.0	22	2.0	0.6146
2	2	2	2	1.4	13	1.0	0.3506
3	3	7	6	1.8	28	3.0	0.7537
4	4	3	7	2.2	16	3.5	0.8195
5	5	6	1	2.6	25	0.5	0.0970
6	6	1	5	3.0	10	2.5	0.7114
7	7	4	3	3.4	19	1.5	0.4186

C. 數據分析、建模

(1) 易見七次試驗結果中以第四號試驗的收率81.95%爲最高，相應的工藝條件爲：原料配比$x_1 = 2.2$，呲啶量$x_2 = 16$，反應時間$x_3 = 3.5$。

(2) 線性迴歸模型

若用線性迴歸模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \epsilon$$

來配適表1的數據，並用迴歸分析中的變量篩選技術，求得迴歸方程爲

$$\hat{y} = 0.0713 + 0.2333 x_3。$$

相應的$R^2 = 93.96\%,\ s^2 = 0.381,\ C_p = 1.91$。這個模型不理想，因爲另兩個因素$x_1$和$x_2$未能出現在模型中，與過去的試驗不符。

(3) 二次迴歸模型

用二次迴歸模型來擬合，數據的中心化是重要的，該例

$$\overline{x_1} = 2.2, \qquad \overline{x_2} = 19, \qquad \overline{x_3} = 2.0。$$

中心化的二次模型為

$$\begin{aligned} y \;=\; & \beta_0 + \beta_1(x_1 - 2.2) + \beta_2(x_2 - 19) + \beta_3(x_3 - 2.0) \\ & + \beta_{11}(x_1 - 2.2)^2 + \beta_{22}(x_2 - 19)^2 + \beta_{33}(x_3 - 2.0)^2 + \beta_{12}(x_1 - 2.2)(x_2 - 19) \\ & + \beta_{13}(x_1 - 2.2)(x_3 - 2.0) + \beta_{23}(x_2 - 19)(x_3 - 2.0) + \epsilon。 \end{aligned} \tag{2. 4}$$

運用篩選變量的迴歸技術，得

$$\hat{y} = 0.595 + 0.232(x_3 - 2) - 0.054(x_3 - 2)^2 + 0.0547(x_1 - 2.2)(x_3 - 2)， \tag{2.5}$$

其相應的方差分析表列於表2.2，$R^2 = 99.83\%, s^2 = 0.00023$，三項$(x_3 - 2)$, $(x_3 - 2)^2$,$(x_1 - 2.2)(x_3 - 2)$的F統計量分別為1653.66, 64.85, 20.88，相應的p值分別為0.0001，0.0040和0.0197均非常顯著。通過殘差分析和有關的點圖(如殘差-預測值圖，殘差正態點圖，偏迴歸點圖等)，未發現異常，模型(2.5)被接受。雖然在模型中，因素x_2沒有出現，可能是試驗次數太少的原因，或者試驗者對x_2所取的水平不適當，導致這個變量在該試驗區域內對回收率的影響不顯著。

(4) 尋找最佳工藝條件

為了尋找最佳的工藝條件，需要對(2.5)的右端的函數求極大和相應的極大值點，優化範圍應為原試驗範圍：

$$1.0 \leq x_1 \leq 3.4, \quad 0.5 \leq x_3 \leq 3.5。$$

由y與(x_1, x_3)的等高值圖(圖3)可知，$\hat{y}$的極大值在邊界上。由優化算法，不難求得當$x_1 = 3.4$，$x_3 = 3.5$時，$\hat{y} = 91.87\%$達到極大值。由於用均勻設計安排的7次試驗中，並沒有出現水平組合$x_1 = 3.4$，$x_3 = 3.5$。故應做追加試驗。

表2.2　化工試驗的方差分析表(SAS輸出)

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
Model	3	0.40488	0.13496	595.722	0.0001
Error	3	0.00068	0.00023		
C Total	6	0.40556			
Root MSE	0.01505	R-square	0.9983	C.V.	2.79813
Dep Mean	0.53791	Adj R-sq	0.9966		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	T for H0: Parameter=0	Prob > $\|T\|$
INTERCEP	1	0.595071	0.00871685	68.267	0.0001
x_3-2	1	0.231759	0.00569920	40.665	0.0001
$(x_3-2)^2$	1	-0.054033	0.00670981	-8.053	0.0040
$(x_1-2.2)(x_3-2)$	1	0.054669	0.01196354	4.570	0.0197

(5) 追加試驗

最簡單的辦法就是取$x_1=3.4$，$x_3=3.5$，並取x_2爲中間的水平19，做幾次試驗，如果相應的收率與預報值91.81%相距不遠，則表明，模型(2.5)能較好地表達收率和原料配比及反應時間的關係。若追加試驗的結果與91.87%相差甚遠，則表明模型(2.5)並不適合，需要考慮其它模型。該項目試驗者在$x_1=3.4, x_2=19, x_3=3.5$追加了3次試驗，相應的收率分別爲91.05%, 92.11%, 91.53%, 其均值91.56%與預報值相距很近，故模型(2.5)比較符合實際情形。由於最佳水平組合是兩個最高的水平，在追加試驗時，似應擴大因素x_1和x_2的試驗範圍。如果試驗經費允許，一個二因素(x_1和x_2)的試驗是更佳的選擇

，例如，取水平

$$x_1 \ : \ 3.0, 3.4, 3.8, 4.2$$

$$x_2 \ : \ 3.0, 3.5, 4.0, 4.5$$

用$U_4(4^2)$來安排這個試驗。

3. 均勻設計的靈活運用

由於不同的試驗有不同的環境和不同的要求，需要試驗設計方法有相當的靈活性，此外，有些問題表面上不是一個試驗設計的問題，但試驗設計方法仍能發揮巨大作用。本節將討論均勻設計的各種應用。

3.1 水平數不等的試驗

若試驗中諸因素的水平數不等，如何用均勻設計來安排試驗呢？最簡便的方法是尋找適合的均勻設計表。例如，若一個試驗中選擇了三個因素，它們各選了$3, 3, 2$個水平。表3.1列出的$U_6(3^2 \times 2)$適合於該試驗的要求。

表3.1 $U_6(3^2 \times 2)$

No.	1	2	3
1	1	1	1
2	2	1	2
3	3	2	1
4	1	2	2
5	2	3	1
6	3	3	2

若沒有現成的均勻設計表符合試驗的要求時，可用擬水平法來得要求的設計表。例如，在一個試驗中有二個4水平及二個2水平因素。在現有的均勻設計表中只找到表$U_8(4^4)$。擬水平法建議將表中的二行4水平變爲二行2水平，其方法是將原水平$\{1,2\} \Rightarrow 1$，$\{3,4\} \Rightarrow 2$。表3.2的左邊是$U_8(4^4)$，右邊爲

用擬水平方法獲得的$U_8(4^2\times2^2)$。我們把原來$U_8(4^4)$的行3與行4，變成2水平而得到右邊的$U_8(4^2\times2^2)$。

表3.2 $U_8(4^4)$和$U_8(4^2\times2^2)$

No.	1	2	3	4	1	2	3	4
1	1	2	1	2	1	2	1	1
2	1	4	2	3	1	4	1	2
3	2	1	3	4	2	1	2	2
4	2	3	4	1	2	3	2	1
5	3	1	2	1	3	1	1	1
6	3	3	1	4	3	3	1	2
7	4	2	4	3	4	2	2	2
8	4	4	3	2	4	4	2	1

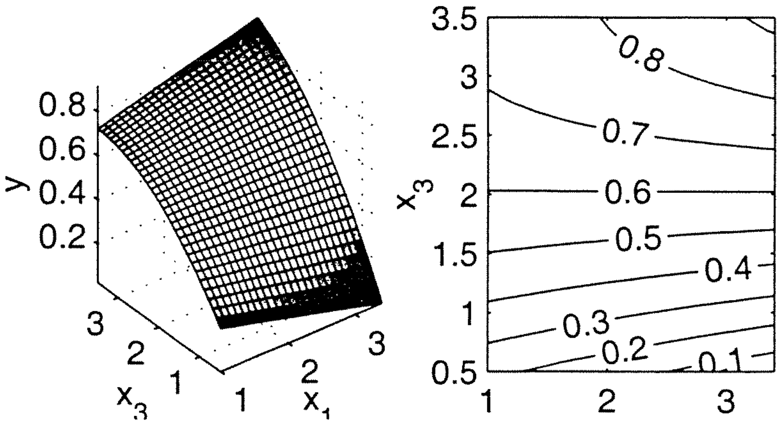


圖3 化工試驗的迴歸曲面圖和等高值圖

3.2 含有定性因素的均勻設計

試驗的因素有連續變化的，稱爲定量因素，如溫度、時間、濃度等；有的因素只能取一些有限狀態，如性別、催化劑種類、幾台儀器等，後者稱爲

定性因素(categorical factors)。例如，在一個試驗中有一個定性因素A，它有四個狀態A_1, A_2, A_3, A_4，同時有二個定量因素x_1和x_2。如果這兩個定量因素各取12個水平，用均勻設計表$U_{12}(12^2 \times 4)$可以來安排這個試驗。在建模過程中，可試用如下的二次混合模型

$$\begin{aligned} E(Y) &= \beta_0 + \beta_1(x_1 - \overline{x_1}) + \beta_2(x_2 - \overline{x_2}) + \beta_{11}(x_1 - \overline{x_1})^2 + \beta_{22}(x_2 - \overline{x_2})^2 \\ &\quad + \beta_{12}(x_1 - \overline{x_1})(x_2 - \overline{x_2}) + \gamma_1 V_1 + \gamma_2 V_2 + \gamma_3 V_3 \text{。} \end{aligned} \tag{3. 1}$$

式中V_1, V_2, V_3爲虛變量，定義爲

$$(V_1, V_2, V_3) = \begin{cases} (1,0,0), & \text{若 } A = A_1; \\ (0,1,0), & \text{若 } A = A_2; \\ (0,0,1), & \text{若 } A = A_3; \\ (0,0,0), & \text{若 } A = A_4. \end{cases}$$

$\overline{x_1}$和$\overline{x_2}$分別爲x_1和x_2的12水平的平均值。利用迴歸分析中篩選變量的技術，可從(3.1)的一切子模型中求得一個最佳的選擇。有關這方面的討論可參見王柱、方開泰(1999)。

3.3 仿眞試驗(computer experiment)和因子試驗的建模方法

在大多數因子試驗中，試驗者對因素$(x_1, \ldots, x_s)$和反應(y)之間的關係並不十分清楚，在數據分析時將面對一個非參數模型

$$y = h(x_1, \ldots, x_s) + \epsilon \text{。} \tag{3.2}$$

式中h爲$(x_1, \ldots, x_s)$的函數，但函數形式未知；ϵ爲隨機誤差，常設$E(\epsilon) = 0$，$Var(\epsilon) = \sigma^2$。例如在例1中，試驗者不知道函數h的形式，故用中心化二次多項式(1.2)作爲h的一個近似。有時，當函數$h(x_1, \ldots, x_s)$的波動較大時，需要用中心化高次多項或含有少數非線項的中心化二次多項式來近似函數h。

當h是周期函數時，用傅利葉迴歸(Fourier regression)模型來近似，Riccomagno等(1997)詳細討論了在傅利葉迴歸模型下的最優設計，這些設計實際上是用好格點法生成的均勻設計。

小波函數(Wavelets)具有優良的性質，小波迴歸模型可用來近似函數h。小波在試驗設計中的應用開始引人注目。Herzberg and Traves (1994)研究了Haar小波在單因素試驗中的應用，謝民育(1998)推廣了他們的結果至多因素試驗設計，並考慮Haar小波以外的其他小波函數。

多維樣條函數(spline)的技術發展迅速，Stone (1994)和Stone et al (1997)對多元樣條函數的發展作了詳細的回顧，並有多位專家參加討論。利用多維樣條函數來近似h在均勻設計的建模中大有潛力。王仁宏(1994)的書對多維樣條函數的技術作了系統的研究。

神經網絡(Neural Network)可用來配適任何數據集，特別是可用來近似非線性函數。有關基礎和應用可參見Caudill and Butler (1992)。本期何偉文等(2000)討論了如何利用中心化二次迴歸多項式、多維樣條函數和神經網絡來建模。

在仿眞試驗中，若模型爲

$$y = g(x_1, \ldots, x_s), \tag{3.3}$$

式中函數g已知，但不易計算，希望通過試驗數據求得函數g的一個近似表達。上述幾種建模方法均可用來獲得g的近似模型。除此之外，若函數g在定義的區域內連續可微。利用設計點上的函數值和微商(derivative)，可以找到更爲精確的近似表達，例如Morris, Mitchell and Ylvisaker (1993)將y看成一個高斯過程(Gaussian Process)，利用Bayes統計的觀點和方法來預測沒有觀察的$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_s)$相應的函數值$y$。不少實例表明，他們的方法可有效地提高預測的精度。但是，這種方法需要知道函數的微商，在因子試驗中是無能爲力的。特別是在因子試驗中，試驗的數目因受到財力、人力各物力的限制，不可能很大，多因素試驗的建模，是一項十分艱巨而細緻的工作。

4. 均勻設計的理論

一種好的試驗方法是在一種特定的數學模型下達到最優的方法。例如，D-最優設計(Atkinson and Donev (1992))是在特定的迴歸模型下達到廣義方差最小。正交設計是在特定的廣義線性模型下達到最優的(Cheng (1980))設

計。均勻設計是否是在一定模型下達到最優的設計呢？由於均分設計可作爲電腦仿眞試驗，部份因子試驗和穩健設計(Robust Design)中的一個方法，如何論證均勻設計的優良性，可以多個方面去研究。下面對已有結果作一個簡單的回顧。

4.1 均值模型

在電腦仿眞試驗設計中，若欲估計函數g在試驗區域C^s內的均值$m(g)$(參(1.1))，統計的理論建議用樣本均值

$$\bar{g}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}g(\boldsymbol{x}_k)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}g(x_{k_1},\ldots,x_{k_s}) \tag{4.1}$$

作爲$m(g)$的估計，式中$\mathcal{P}=\{(x_{k_1},\ldots,x_{k_s}),k=1,\ldots,n\}$爲$C^s$上的點集。當$\mathcal{P}$爲隨機抽樣時，$\bar{g}$爲$m(g)$的一個無偏估計(unbiased estimator)，但$\bar{g}$收斂至$m(g)$的速度較慢。McKay, Conover and Beckman (1979)提出超立方體拉丁方格抽樣(Latin hypercube sampling)，該方法也能提出供$m(g)$的一個無偏估計，且使$\bar{g}$收斂至$m(g)$的速度大大加快。均勻設計是從另一角度來考核$\bar{g}$的表現。由著名的Koksma-Hlawka不等式給出估計誤差的上界

$$|m(g)-\bar{g}|\le V(g)D(\mathcal{P})。 \tag{4.2}$$

式中$V(g)$爲函數g的全變差，$D(\mathcal{P})$爲點集$\mathcal{P}$的星偏差(參(2.2))。Hickernell (1998a,b)指出，Koksma-Hlawka不等式對其它偏差(如中心化偏差，對稱偏差，可卷偏差等)也是成立的，只需將$V(g)$的定義作適當地修改。當函數g和點數n給定時，欲使誤差$|m(g)-\bar{g}|$達到最少，就是取點集$\mathcal{P}$使其$D(\mathcal{P})$達到最小，也就是$\mathcal{P}$是一個均勻設計。數論方法的理論指出，可選點集$\mathcal{P}_n$使當$n\to\infty$時，$D(\mathcal{P}_n)=\mathcal{O}(\frac{1}{n}log^s n)$。如果模型(3.3)換成另一個模型$y=g^*(x_1,\ldots,x_s)$，且$V(g)=V(g^*)$，則用樣本均值$\overline{g^*}$來估計均值$m(g^*)$的誤差爲

$$|m(g^*)-\overline{g^*}|\le V(g^*)D(\mathcal{P})=V(g)D(\mathcal{P})，$$

與(4.2)有相同的上界，這表明均勻設計對於模型的變化有穩健性(Robustness)，它不僅對某個特定的$m(g)$能給出好的估計，而且能對無窮多個$m(g)$(只要

$V(g)$ 有界）也能給出好的估計。均勻設計的這種穩健性是它得以廣泛應用的重要原因。

4.2 均勻設計的優良性

在試驗區域 C^s 上的任一試驗設計對應於在 C^s 上的一個概率分布函數(Probability distribution function)，反之，在 C^s 上的一個概率分布函數，可視爲一個試驗設計，這種研究觀點在最優設計理論中發揮了巨大的作用。Wiens (1991) 和 Xie and Fang (2000) 從不同的模型推斷出在 C^s 的均勻分布是在特定意義下最優的試驗設計。

Wiens (1991) 考慮近似線性模型

$$y_{ij} = \boldsymbol{\theta}'\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x}_i) + \epsilon_{ij},\ i = 1, \ldots, c;\ j = 1, \ldots, n_i;\ n = \sum_{i=1}^{c} n_i \text{。}$$

式中 $\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}(\boldsymbol{x}) \in R^k, \boldsymbol{x} \in C^s, E(\epsilon_{ij}) = \sigma^2$，以及該模型的擬合好壞檢驗(lack of fit test)。當實際模型爲

$$y_{ij} = \boldsymbol{\theta}'\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x}_i) + \psi(\boldsymbol{x}_i) + \epsilon_{ij}$$

時，其中函數 ψ 屬於某個特定的函數類，Wiens 研究了該檢驗的勢(power)，並證明在 C^s 上的均勻分布既是 maximin 又是 minimax 解。

謝民育和方開泰(Xie and Fang (2000)) 從判決函數的理論(decision theory) 研究了非參數迴歸模型(3.2)。他們證明，在 C^s 的均勻分布是允許的極小極大設計(admissible minimax design)。若限制函數 $h(x_1, \ldots, x_s)$ 在特定的函數類中，他們進一步證明 C^s 上的均勻分布是最好的設計。

給定試驗數 n，如何找一個試驗設計使之它的分布與均分分布最接近，若用 Smirnov-Kolmogorov 統計量，就是找一個 C^s 上的 n 個點的點集，使之該點集的偏差達到最小。Hickernell (1999) 從幾個不同的角度論證了均勻設計的優良性，同時也論證了均勻設計的穩健性。

4.3 均勻性是部份因子試驗設計的重要準則

在因子試驗設計中有很多有用的準則，如隨機性(randomness)，均衡性(balance)，正交性(orthogonality)，有效性(efficiency) 和穩健性(robustness)

。在比較不同的因子設計時，常用的準則有分辨率(resolution)，最小混雜(minimum aberration)，估計能力(estimation capacity)等。在本刊中，方開泰、馬長興(2000)綜述了均勻性與正交性的聯繫，均勻性與字長分布之間的解析表達關係，以及均勻性用來識別不同構正交設計的快速有效算法。除此以外，均勻性可以揭示出用其它準則所不能發現的現象。從變異數分析(Analysis of variance)的觀點，兩個同構的正交設計有相同的統計性質。用均勻性作爲準則，發現同構的正交設計可以有不同的統計性質。表明用均勻性來比較不同的正交設計更爲簡便和細膩(參考Ma, Fang and Lin, 2000)。

4.4 使用方便

廿年來的實踐表明，試驗者對均勻設計的方便，靈活有很高的評價。首先，均勻設計提供了大量的均勻設計表，很容易找到符合試驗所要求的均勻設計表。由於正交表$L_n(q^s)$要求n必須是q^2的倍數，在使用時用戶沒有太多選擇。而均勻設計表$U_n(q^s)$只需n是q的倍數，大大增加了使用者的選擇空間。

二水平和三水平試驗長期以來在因子試驗中占統治地位。但是二水平和三水平的因子試驗不足以揭示反應(y)和因素($x_1,\ldots,x_s$)之間的非線性關係。當非線性關係不太複雜時，張秀紅(1999)發現，四水平和五水平是需要的，當非線性關係比較複雜時(例如多峯，有多個拐點等)，每個因素需要更多的水平，才能擬合出接近於實際的模型。均勻設計提供了大量多因素多水平的設計，爲非線性模型的試驗設計開闢了一條新路。

由於上述的優點，使得均勻設計可用於田口玄一倡導的參數設計中，本期盧賢巨等人的文章指出，在參數設計中若用均勻設計替代正交設計可大幅度地減少試驗的次數。此外，均勻設計用於問卷調查可大大減少問卷的數量。

中國數學會均勻設計分會已編制了均勻設計的專用軟體，該軟體中有幾百個設計表可供選擇，在統計分析和建模的部份接近SAS的功能，爲使用者帶來方便。

致謝詞：感謝香港政府基金RC/98-99/Gen-370的資助，羅夢娜教授的寶貴意見和曾巧齡小姐的協助。

參考文獻

方開泰(1980)。均勻設計－數論方法在試驗設計中的應用。應用數學學報，**3**，363-370。

方開泰、馬長興(2000)。均勻性在因子設計中的應用。中國統計學報。

何偉文、許志強(2000)。均勻設計在電腦仿眞試驗中的應用。中國統計學報。

王柱、方開泰(1999)。含有定性因素的均勻設計。數理統計與管理，**18(5)**，11-19。

王仁宏(1994)。多元樣條函數及其應用。科學出版社，北京。

盧賢巨、章渭基、韓茂祥(2000)。均勻設計在質量工程中的應用。中國統計學報。

張秀紅(1999)。正交設計與均勻設計的比較。《均勻設計理論及其應用研討會》，香港浸會大學，251-263。

Xie, M. Y. (謝民育) (1998). Some optimalities of uniform designs and projection uniform designs under multi-factor models, Ph.D. Thesis, Hong Kong Baptist University.

Atkinson, A. C. and Donev, A. N. (1992). *Optimal Experimental Designs.* Oxford Science Publications, Oxford.

Bates, R. A., Buck, R.J., Riccomagno, E. and Wynn, H. P. (1996). Experimental design and observation for large systems (With discussion). *J. R. Statist. Soc.* Ser. B **58**, 77-94.

Caudill, M. and Butler, C. (1992). *Understanding Neural Networks: Computer Explorations.* Vols 1 and 2, Cambridge, MA: the MIT Press.

Cheng, C. S. (1980). Orthogonal arrays with variables numbers of symbols. *Ann. Statist.* **8**, 447-453.

Fang, K. T., Lin, D. K. J., Winker, P. and Zhang, Y. (2000). Uniform design: theory and application. *Technometrics* to appear.

Fang, K. T., Ma, C. X. and Winker, P. (1999). Centered L_2 discrepancy of random sampling and Latin hypercube design, and construction of uniform design. *Math. Comp.* to appear.

Herzberg, A. and Traves, W. H. (1994). An optimal experimental design for the Haar regression model. *Canadian J. Statist.* **22**, 357-364.

Hickernell, F. J. (1998a). A generalized discrepancy and quadrature error bound. *Math. Comp.* **67**, 299-322.

Hickernell, F. J. (1998b). Lattice rules: how well do they measure up? in *Random and Quasi-Random Point Sets, Springer Lecture Notes in Statistics.* Vol. 138, Springer-Verlag, New York, 109-166.

Hickernell, F. J. (1999). Goodness-of-fit statistics, discrepancies and robust designs. *Statist. & Prob. Letters* **44**, 73-78.

Koehler, J. R. and Owen, A. B. (1996). Computer experiments, in *Handbook of Statistics* **13**, Eds. by S. Ghost and C. R. Rao, Elsevier Science B. V., Amsterdam, 261-308.

Ma, C. X., Fang, K. T. and Lin, D. K. J. (2000). On isomorphism of fractional factorial designs. *J. Complexity* in press.

McKay, M. D., Conover, W. J. and Beckman, R. 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., Mitchell, T. J. and Ylvisaker, D. (1993). Bayesian design and analysis of computer experiments: use of derivatives in surface prediction. *Technometrics* **35**, 243-255.

Stone, C. J., Hansen, M. H., Kooperberg, C. and Truong, Y. K. (1997). Polynomial Splines and their tensor products in extended linear modeling. *Ann. Statist.* **25**, 1371-1470.

Stone, C. J. (1994). The use of polynomial splines and their tensor products in multivariate function estimation. *Ann. Statist.* **22**, 118-184.

Wang, Y. and Fang, K. T. (1981). A not on uniform distribution and experimental design. *Chinese Science Bulletin* **26**, 485-489.

Wiens, D. P. (1991). Designs for approximately linear regression: two optimality properties of uniform designs. *Statist. & Prob. Letters* **12**, 217-221.

Xie, M. Y. and Fang, K. T. (2000). Admissibility and minimaxity of the uniform design measure in nonparametric regression model. *J. Statist. Plan & Infer.* **83**, 101-111.

[民國 89 年 6 月 19 日收稿，民國 89 年 9 月 18 日接受。]

Theory and applications of the uniform design

Kai-Tai Fang
Department of Mathematics
Hong Kong Baptist University

Dennis, K. J. Lin
Department of Management Science
and Information System
Penn State University

ABSTRACT

This paper provides an introduction to the uniform design. The uniform design can be considered as one type of fractional factorial design. It contains many advantages, such as, user friendly, flexibility in the numbers of experiment runs and number of levels, and robustness against model assumption. The uniform design is suitable for computer experiments whose modeling issues are discussed as well.

Key words and phrases: Design of computer experiments, fractional factorial design, uniformity.

AMS 1991 subject classifications: Primary 62K99; secondary 62K15.