

均匀设计理论与应用

贺平¹, 林共进², 刘民千³, 许青松⁴, 周永道^{3*}

1. 北京师范大学-香港浸会大学联合国际学院, 珠海, 519087

2. 美国宾州州立大学统计系, 宾州 16802

3. 南开大学统计与数据科学学院, 天津 300071

4. 中南大学数学与统计学院, 长沙, 410083

E-mail: heping@uic.edu.hk, dkl5@psu.edu, mqliu@nankai.edu.cn, qsxu@csu.edu.cn, ydzhou@nankai.edu.cn

收稿日期: 2020-XX-XX; 接受日期: ; 网络出版日期: ; * 通信作者

国家自然科学基金项目(11771220, 11871288)、国家“万人计划”科技创新领军人才项目、天津市人才发展特殊支持计划“高层次创新创业团队”项目、天津市“131”创新型人才团队项目、天津市自然科学基金项目(19JCZDJC31100)

摘要 随着科学和技术的发展, 试验涉及的因素越来越多, 它们之间的关系更加复杂, 特别是在高科技的发展中, 面临多因素、非线性、模型未知等复杂性, 因此如何科学地组织试验就显得非常重要. 常见的试验设计类型有正交设计、均匀设计、最优设计等. 均匀设计的主要思想是把设计点均匀地散布在试验区域中, 它具有试验点数可灵活选取、对模型稳健、适用于多类试验区域等诸多优点. 本文给出均匀设计理论发展过程、最近进展及应用现状.

关键词 计算机试验 偏差 正交设计 均匀设计

MSC (2010) 主题分类 62K15

1 引言

试验设计在工业创新中发挥着重要作用. 试验设计在中国的广泛应用肇始于日本统计学家田口玄一于20世纪60年代到北京大学讲学, 他系统地介绍了有关正交设计的方法. 之后, 北大老师把相关内容整理为一本试验设计讲义, 是一本优秀的普及正交设计的教材. 应用田口玄一的方法, 中国科学院数学所的统计工作者在指导工厂试验的过程中, 遇到了许多多因素试验, 其试验区域很大且因素和响应之间存在非线性关系的情形. 那时, 工程师不知道统计学中的科学试验设计和分析, 走了许多弯路, 有些试验甚至做几年都还没有达到目的. 对于这些复杂的问题, 统计学家意识到, 田口玄一的方法需要改进. 他们建议: 1) 因素的水平可以不止2个, 通常可取3-5个水平; 2) 在初始阶段考虑所有可能的因素进行筛选; 3) 给因素的主效应和交互效应的重要性排序以确定推荐的水平组合; 4) 用极

英文引用格式: He P, Lin D K J, Liu M Q, Xu Q S, Zhou Y D. Theory and application of uniform designs (in Chinese). *Sci Sin Math*, 2020, 50: 1-11, doi:

差分析替换方差分析. 在这些思路指导下, 他们帮助工程师们解决了多个复杂试验的安排问题, 并整理了一本操作手册, 参见[1]. 这些实践活动也为提出均匀设计提供了基础.

实际部门的需求驱动着试验设计理论的发展. 1978年的三个导弹指挥仪的项目中, 因素和响应之间的真实模型可以通过微分方程组刻画. 然而, 给定微分方程组的初始值, 在当时的计算机条件下需要很长的运算时间才能得到相应的解. 通常地, 解一个微分方程组需要花一天时间, 因此不具有实效性. 为此, 研究人员提出了计算机试验的想法, 即通过计算机试验寻找因素与响应之间的易于计算的近似模型, 在实战中用近似模型代替真模型. 当时国内并没有关于计算机试验的有关文献, 而且正交设计不能达到计算机试验的需要. 例如, 其中一个项目要求考虑6个因素, 每个因素至少需要18个水平. 由于每次试验都花费巨大, 因此项目方要求全部的试验次数不能超过50次. 这是一个巨大的挑战, 需要一个全新的试验方法和相应的建模技术.

为了解决该问题, 均匀设计这一全新的设计方法应运而生[2, 3], 其应用多维积分的数论方法(number theoretic methods), 把试验点均匀地安排在试验区域中. 在该项目中, 采用了31个试验点的均匀设计, 使得6个因素都有31个水平, 且得到的近似模型可以在0.00001秒即可得到合适精度的近似解. 此后, 三个项目都获得巨大成功并荣获多个国家级奖项. 均匀设计可以大大节约试验时间和试验成本, 并为计算机试验和实体试验提供了新的选择[4-7]. 由于均匀设计理论和正交设计有本质的不同, 部分行内专家一开始并不理解均匀设计方法, 但是该方法受到工程师们的大力欢迎, 在国内得到大量的应用, 不仅应用于许多军方项目, 而且也应用于许多民用项目. 尤其是从上世纪90年代末以来, 均匀设计的理论得到了极大的发展, 已经成为国际公认的试验设计方法.

均匀设计的思想来源于总均值模型和数论方法. 均匀性是一个几何概念, 而不是一个统计准则. 因此为均匀设计建立一套坚实的理论是一件很困难的事情. 直到上世纪90年代末期才寻找到了突破口, 尔后均匀设计理论得以迅速发展. 本文将介绍均匀设计理论的发展及其应用. 本文第2节将介绍均匀性测度, 第3节介绍均匀设计的各种构造方法, 第4节给出均匀设计与其它设计类型之间的关系, 第5节介绍均匀设计的应用. 更详细的技术细节和有关进展可参见2018年出版的关于均匀设计理论与应用的专著[8].

2 均匀性测度

在一个试验中, 若各因素的取值没有相互限制, 则其试验区域为超矩形, 不失一般性可记为 $\mathcal{X} = C^s = [0, 1]^s = [0, 1] \times \cdots \times [0, 1]$. 若各因素之间存在相互限制, 比如每个因素为试验中的某成分, 则各成分非负并且之和等于1, 相应的试验区域为单纯型, 对应的设计为混料设计. 下面分别讨论在超矩形和单纯型上的均匀性测度.

2.1 超矩形的均匀性度量

设 $y = f(\mathbf{x})$ 是试验区域 $\mathcal{X} = C^s$ 上的真实模型, 其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_s)$ 为变量(因素), y 为响应. 设 $\mathcal{P} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 是 C^s 中的 n 个试验点构成的点集. 一件最重要最基本的事情是估计 $f(\mathbf{x})$ 的总均值, 即 $E(y) = \int_{C^s} f(\mathbf{x}) dx$. 一个自然的想法是应用 \mathcal{P} 的样本均值 $\bar{y}(\mathcal{P}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$ 来估计 $E(y)$, 其中 $y_i = f(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, n$. 最简单的随机方法是数论方法, 即蒙特卡洛方法, 即 \mathcal{P} 是 C^s 上的

均匀分布 $U(C^s)$ 的 n 个独立样本, 其相应的样本均值 $\bar{y}(\mathcal{P})$ 是 $E(y)$ 的无偏估计, 且其估计方差为 $\text{Var}(f(\mathbf{x}))/n$, 其中随机变量 \mathbf{x} 服从 C^s 上的均匀分布. 由中心极限定理可知, 样本均值和总均值之间的差异 95% 的置信区间为 $|\bar{y}(\mathcal{P}) - E(y)| \leq 1.96\sqrt{\text{Var}(f(\mathbf{x}))/n}$. 然而, 在很多情形下, 估计方差 $\text{Var}(f(\mathbf{x}))/n$ 太大了, 故需要减少. 为此, McKay, Beckman 和 Conover [9] 提出了拉丁超立方体抽样, 其使得样本之间为负相关, 从而减少估计方差.

另一方面, 著名的Koksma-Hlawka不等式说明 $E(y)$ 和样本均值 $\bar{y}(\mathcal{P})$ 之间的误差有以下的上界

$$|\bar{y}(\mathcal{P}) - E(y)| \leq V(f)D^*(\mathcal{P}), \quad (2.1)$$

其中 $V(f)$ 是函数 f 在Hardy 和 Krause 意义下的全变差(参见[10]和[11]), $D^*(\mathcal{P})$ 是 \mathcal{P} 的星偏差, 它由[12]提出且不依赖于 f , $D^*(\mathcal{P}) = \sup_{\mathbf{x} \in C^s} |F_{\mathcal{P}}(\mathbf{x}) - F(\mathbf{x})|$, 其中 $F(\mathbf{x})$ 为 C^s 上均匀分布的分布函数, $F_{\mathcal{P}}(\mathbf{x})$ 为设计 $\mathcal{P} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, $\mathbf{x}_i \in C^s$ 的经验分布函数. 星偏差恰好是拟合优度检验中的Kolmogorov-Smirnov统计量. 星偏差不仅在伪蒙特卡洛方法中也在统计学中有重要应用, 不过星偏差的数值并不能在多项式时间内计算出来[45]. 上界(2.1)在很多情形下是紧的. 若 $V(f)$ 在试验区域上有界, 则可以选择 C^s 中的有 n 个试验点的点集 \mathcal{P} 使得其星偏差 $D^*(\mathcal{P})$ 尽可能地小, 从而可以最小化(2.1)式中的误差上界. 方开泰[2] 和 Wang 和 Fang [3] 称使得星偏差最小的设计为均匀设计.

然而, 星偏差存在一些缺点. 星偏差不易计算且不具有坐标旋转不变性, 即对设计点绕着试验中心做任何旋转, 星偏差值都会变化(参Winker 和 Fang [45]). 这在几何上来看不合理. Hickernell [13, 14] 应用再生核Hilbert 空间的工具, 推广了偏差的定义, 并提出了几种新的偏差. 这些偏差具有诸多优点, 例如偏差有显式表达式、同时考虑 S 维空间上点集的均匀性和低维投影的均匀性、具有几何直观含义等. 其中, 中心化偏差(centered L_2 -discrepancy, CD)和可卷偏差(wrap-around L_2 -discrepancy, WD)得到了广泛应用. 给定设计 $\mathcal{P} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, $\mathbf{x}_i = (x_{ij}) \in C^s$, CD和WD的平方值的表达式分别如下所示:

$$\begin{aligned} \text{CD}^2(\mathcal{P}) &= \left(\frac{13}{12}\right)^s - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s \left(1 + \frac{1}{2} |x_{ij} - 0.5| - \frac{1}{2} |x_{ij} - 0.5|^2\right) \\ &\quad + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n \prod_{j=1}^s \left(1 + \frac{1}{2} |x_{ij} - 0.5| + \frac{1}{2} |x_{kj} - 0.5| - \frac{1}{2} |x_{ij} - x_{kj}|\right), \\ \text{WD}^2(\mathcal{P}) &= -\left(\frac{4}{3}\right)^s + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n \prod_{j=1}^s \left[\frac{3}{2} - |x_{ij} - x_{kj}| + |x_{ij} - x_{kj}|^2\right]. \end{aligned}$$

对于不同均匀性测度, Fang, Li 和 Sudjianto [7] 说明一个合理的均匀性测度需满足以下7个要求:

- C_1 具有因素或试验顺序的置换不变性;
- C_2 具有坐标旋转不变性;
- C_3 不仅能衡量点集 \mathcal{P} 在 C^s 中的均匀性, 也能衡量 \mathcal{P} 投影到 C^u 的均匀性, 其中 u 为 $\{1, \dots, s\}$ 的非空子集;
- C_4 有合理的几何意义;
- C_5 易于计算;
- C_6 满足类似的Koksma-Hlawka 不等式;
- C_7 与试验设计的其它准则保持一致性.

星偏差满足 C_1, C_3, C_4 和 C_6 , 而CD和WD满足 $C_1 - C_7$ 全部的要求. 后来, Zhou, Fang 和 Ning [15] 提出了两个关于均匀性测度合理性的新要求:

C_8 对设计点的整体平移具有敏感性;

C_9 较小的维数祸根问题.

Zhou, Fang 和 Ning [15] 证明了CD并不满足 C_9 , 而WD不满足 C_8 . 同时, 他们提出了一种称为混合偏差(mixture discrepancy, MD)的新偏差准则. 混合偏差的平方值的表达式如下

$$\begin{aligned} \text{MD}^2(\mathcal{P}) = & \left(\frac{19}{12}\right)^s - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s \left(\frac{5}{3} - \frac{1}{4}|x_{ij} - \frac{1}{2}| - \frac{1}{4}|x_{ij} - \frac{1}{2}|^2\right) \\ & + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^s \left(\frac{15}{8} - \frac{1}{4}|x_{ij} - \frac{1}{2}| - \frac{1}{4}|x_{kj} - \frac{1}{2}| - \frac{3}{4}|x_{ij} - x_{kj}| + \frac{1}{2}|x_{ij} - x_{kj}|^2\right). \end{aligned}$$

混合偏差可以同时满足 $C_1 - C_9$, 因此其可以克服CD和WD的缺点, 是一个更合理的均匀性测度.

在许多实体试验中, 试验区域为一些离散点. 因此, 需要可以直接衡量有限点的点集的均匀性测度. Hickernell 和 Liu [16], Fang, Lin 和 Liu [17] 提出了一种称为离散偏差的均匀性测度, 是基于一个特殊的核函数定义的. Qin 和 Fang [18] 进一步地讨论离散偏差的性质, 并提出了相应的均匀设计的构造方法. 此后, Zhou, Ning 和 Song [19] 指出离散偏差存在一些不足, 并提出Lee偏差用于刻画多水平离散点集的均匀性.

均匀性测度在均匀设计理论中具有核心作用. 以上提到的不同类型的偏差, 极大地发展了均匀设计理论. 基于这些偏差, 可以展示均匀设计与其它类型的设计之间的关系.

给定一种偏差后, 其偏差下界有利于构造均匀设计, 因为其可以做为搜索算法中的基准, 即达到偏差下界的设计为均匀设计. 方开泰与他的合作者给出了不同偏差准则在不同情形下的下界. 对于中心化偏差, Fang 和 Mukerjee [20] 针对两水平正规正交设计首次给出了CD的下界; Fang, Ma 和 Mukerjee [21] 得到两水平正规和非正规设计的CD下界; Fang, Lu 和 Winker [22] 给出两水平设计的CD的改进下界; Chatterjee, Li 和 Qin [23] 给出了两水平设计的CD更紧的下界; Fang, Maringer, Tang 和 Winker [24] 给出三水平和四水平设计的CD的一个下界; Elsawah 和 Qin [25] 给出更紧的CD下界. 对于可卷偏差, Fang, Ma 和 Mukerjee [21] 给出两水平和三水平的正规和非正规设计的WD的一个下界; Fang, Lu 和 Winker [22] 给出三水平设计的WD更紧的下界; Fang, Tang 和 Yin [26] 对于任意 q 水平U-型设计提出了WD的一个下界; Fang, Tang 和 Yin [27] 从不同的角度出发, 得到任意 q 水平设计的更好的WD下界; Chatterjee, Fang 和 Qin [28] 研究了二、三混水平设计的WD的下界; 后来, Zhou 和 Ning [29] 研究了任意不同混合水平设计的WD的下界. 对于混合偏差, Zhou, Fang 和 Ning [15] 给出了两水平设计的MD下界; Ke, Zhang 和 Ye [30] 给出三水平设计的MD下界; Elsawah 和 Qin [31] 给出两水平、三水平和四水平设计的MD下界; Elsawah 和 Qin [32] 还给出二、三混合水平的MD下界.

2.2 单纯型上的均匀性度量

对于混料试验, 其试验区域为单纯型或其中部分区域. 若因素和响应之间的关系在试验之前是未知的, 可把设计点均匀地散布在单纯型中, 相应设计即为混料均匀设计[4, 33]. 后来, Fang 和 Yang [34] 考虑了有限制的混料均匀设计. 为了构造混料均匀设计, 需要给出相应的均匀性准则. 这里有间

接的和直接的这两类均匀性准则. 构造 s 维空间上的混料设计的一种方法是对 C^{s-1} 上的设计经过一种特殊的变换而成, 因此一种间接衡量混料设计的均匀性准则直接定义为变换前 C^{s-1} 中的设计的均匀性. F -偏差即为这类间接测度, 参见[4]. 为了给出直接定义在单纯型上的均匀性测度, Ning, Zhou 和 Fang [35] 提出了 DM_2 偏差, 该偏差有显式表达式, 易于计算.

3 均匀设计构造方法

为了便于均匀设计的实际应用, 需要构造一批均匀设计表. 文献中提出各种构造均匀设计的方法, 其包括下面三类:

- (i) 拟蒙特卡罗法, 参见[2, 36, 37];
- (ii) 组合方法, 参见[38–44];
- (iii) 数值搜索法, 参见[26, 45–48].

拟蒙特卡罗法是常用的构造均匀设计的方法, 第一批均匀设计即是由这类算法构造的. 其中, 好格子点法以及方幂好格子点法最先被使用, 参见方开泰[2]. 好格子点法的思想如下: 若构造一个 n 个点、 s 个因素的设计, 首先寻找一个生成向量 (h_1, \dots, h_s) , 其中 h_i 与 n 互素且互不相同; 则好格子点法生成的点集的第 i 行为 $d_{ij} = ih_j \pmod{n}$; 给定偏差准则后, 寻找一个最佳的生成向量使得相应的好格子点集的偏差值最小. 因此, 好格子点集完全取决于生成向量. 然而, 给定试验次数 n 和因素个数 s 等参数后, 好格子点集的均匀性还有提高的空间. 例如, 基于好格子点集, Zhou 和 Xu [37] 证明了线性水平置换技术可以提高均匀性准则和极大极小准则意义下的空间填充性.

在离散偏差意义下, 组合方法是构造均匀设计的一种非常有利的工具. 该方法往往能构造离散偏差值达到偏差下界的均匀设计. 一个具有相同行相遇数的非对称均匀设计与一个均匀可分解设计(uniformly resolvable design, URD) 是等价的, 而组合方法中主要的工具即是利用这种等价性. 因此, 给出一个URD, 我们不需要任何计算和搜索而立得一个均匀设计. 对于URD的存在性, 文献中已有许多结果, 参见Fang, Ge, Liu 和 Qin [41, 43], 以及这两篇论文中的参考文献. 组合方法可以构造对称和非对称均匀设计, 也可以构造超饱和均匀设计. 通过下列的工具可构造一系列均匀设计:

- (A) 可分解平衡不完全区组设计, 参见[39, 42, 43];
- (B) Room方, 参见[38];
- (C) 可分解填充设计, 参见[40, 49];
- (D) Kirkman三元系大集, 参见[40];
- (E) 超单可分解的 t -设计, 参见[44];
- (F) 可分解的可分组设计, 参见[41];
- (G) 拉丁方, 参见[41, 50];
- (H) 可分解的部分成对平衡设计, 参见[51].

这里, 方法(A)–(E)可构造对称均匀设计, 而方法(F)–(H)可构造非对称均匀设计. 大部分方法都可以构造离散偏差意义下的均匀设计.

组合方法往往只能构造参数 n, s 和 q_1, \dots, q_s 在某些特定情形下的均匀设计. 因此, 需要给出适用于任何参数的构造算法. 近几十年来研究人员发明了各类智能算法, 例如, 模拟退火算法及其各种

改进算法、遗传算法、蚁群算法和粒子群算法等, 这些方法可以处理离散优化问题. 在给定某个偏差准则后, 构造均匀设计本质上也可以变为一个离散优化问题. 因此, 可以考虑应用智能算法来构造均匀设计. Winker 和 Fang [45] 和 Winker 和 Fang [46] 首先应用门限接受法来构造星偏差意义下的均匀设计. 该方法是模拟退火算法的一种改进算法, 其用硬门限来接受当前解的邻域中的新解, 而模拟退火算法是用一定的概率来接受新解. Fang 和 Ma [52] 和 Fang, Ma 和 Winker [53] 分别用门限接受法构造在WD和CD意义下的均匀设计. 其后, Fang, Lu 和 Winker [22] 把WD和CD的表达式变换成列平衡的函数和Hamming距离的函数, 且基于这些结果对于局部搜索启发式的门限接受法提出了一种有效的更新方法, 其可以快速有效地构造均匀设计. Fang, Tang 和 Yin [26] 还提出一种有效的平衡追赶的启发式算法来构造许多新的均匀设计表, 并可以构造高水平的均匀设计; 该方法比传统的门限接受法效果更好. Fang, Maringer, Tang 和 Winker [24] 也采用该方法获得许多均匀设计. 实际上, 该方法应用了均匀设计所要求具备的内在结构的组合性质. 此外, Fang, Ke 和 Elsayah [54] 采用了一种修正的门限接受法来构造在混合偏差意义下的均匀设计.

另外, Zhou, Fang 和 Ning [48] 把搜索均匀设计的优化问题转换为一个0-1二次整数规划问题, 并应用局部搜索方法获得该问题的解, 从而构造出相应的均匀设计. Fang, Lin, Winker 和 Zhang [6] 发现可以通过门限接受法来优化CD而得到许多正交设计, 并称得到的设计为“均匀正交设计”.

4 均匀设计与其它设计类型之间的关系

均匀设计理论是从拟蒙特卡罗法出发的, 其为确定性方法. 似乎均匀设计理论与试验设计中常用的正交设计完全不同, 而正交设计是具有诸多统计意义的. 注意到正交设计是一类组合均衡设计, 而均匀设计也是满足某种均衡性的设计, 因此研究人员猜想正交设计也可能是在某种意义下的均匀设计. 如果该猜想成立, 我们就可以建立正交设计和均匀设计之间的联系, 并可以大大促进均匀设计理论的发展. Fang, Lin, Winker 和 Zhang [6] 发现基于均匀性测度CD 和WD, 在很多情形下该猜想成立, 即在某些特殊情形下正交设计也是均匀设计.

均匀性在试验设计中的统计性质仍需要进一步地论证. Fang 和 Mukerjee [20] 证明了一个非常精彩的结论, 即均匀性和正交性之间存在解析的联系. 通常地, 一个正规设计的正交性可用字长型及相应的“最小低阶混杂”准则来衡量, 而中心化偏差CD可衡量设计的均匀性. 该文证明了两水平正规正交设计的CD和字长型之间存在解析表达式. 该结果打开了均匀设计理论发展的新视野, 均匀设计和因子设计之间的联系被更多地挖掘. 例如, Ma, Fang 和 Lin [55] 证明了均匀性和正交性之间的等价性只在一些特殊情形下才成立.

此外, Tang, Xu 和 Lin [56] 给出三水平部分因子设计的CD和衡量非正规设计正交性的广义字长型之间的关系, 并证明了在平均意义下广义最小低阶混杂设计具有低偏差. 后来, Zhou 和 Xu [57] 建立了由再生核Hilbert空间工具得到的任一偏差准则与广义字长型之间的紧密联系, 其适用于任意水平设计, 从而说明均匀性与正交性具有相通性. Zhang, Fang, Li 和 Sudjianto [58] 应用优势框架理论把衡量平衡格子点设计的各种准则统一起来, 这里包括部分因子设计、超饱和设计和均匀设计. Fang 和 Ma [59] 还给出了正规 3^{s-1} 设计中均匀性、混杂和相关性之间的关系. Ma, Fang 和 Lin [60] 应用CD来区分部分因子设计之间的同构性.

另外, 区组设计是一类重要的试验设计. 在区组试验中定义的各种概念, 是一种区组间或处理间或组群间的均衡性(balance), 这种均衡性在直观上很易接受, 在数据分析中有简单的公式, 但并未从理论上论证它的优良性. Liu 和 Chan [61] 利用离散偏差作为均匀性度量, 从理论上证明了平衡不完全区组设计在所有的二元不完全区组设计中是最均匀的. Liu 和 Fang [62] 则考虑了某类可分解不完全区组设计, 在离散偏差下, 得到了这类区组设计是最均匀的一个充要条件, 提出了用某类U-型设计构造这类区组设计的方法, 从而建立起了这类可分解不完全区组设计与U-型设计之间的一重要桥梁.

5 均匀设计的应用

均匀设计理论的突破得到了全世界的认可. 例如, 由著名统计学家C.R. Rao主编的《统计手册(第22卷)》中有一章专门讨论均匀设计理论, 参见 Fang 和 Lin [63]. 《统计科学百科全书(第二版)》中也收录了均匀设计的内容, 参见 Fang [64]. 由Springer出版的《工业统计手册》和《国际统计科学百科全书》都收录了均匀设计的内容, 分别参见[65] 和 [66]. 此外, 《质量和可靠性中的统计百科全书》也介绍了均匀设计理论, 参见Fang 和 Hickernell [67]. 在国内, 均匀设计也得到了工业界的大量支持 and 应用. 在钱学森院士和中国数学学会的支持下, 在1994年成立了中国数学会均匀设计分会, 其为中国数学会下的二级学会. 均匀设计分会负责组织全国性会议、培训班、研讨会和其它活动以推动均匀设计在国内的发展. 均匀设计在国内外已得到大量的应用. 下面分别考虑均匀设计在工业界和优化中的应用.

5.1 均匀设计在工业界的应用

在中国知网以“均匀设计”为关键字搜索可知, 从2000–2018年之间有5660 条的文献, 其中大部分是工业界应用均匀设计解决其实际问题的论文. 此外, 在ISI Web of Science 网页查询可知, 有2000多条引用均匀设计的SCI论文. 均匀设计理论在国外也得到较好的应用. 例如, 美国福特公司研发部门采用均匀设计做为其标准流程的一部分. 该公司应用六西格玛设计技术来研发其新型发动机, 而应用均匀设计的计算机试验是研发发动机早期阶段的标准流程. 研发中的许多案例可参Fang, Li 和 Sudjianto [7].

特别地, 均匀设计在化学实验尤其是化学计量学中有许多贡献. 例如, Xu, Liang 和 Fang [68] 比较正交设计、 D -最优设计和均匀设计在可逆化学反应中的表现. 该文表明, 对非线性的可逆反应动力学模型, 如果初始值设定离真实参数不远且随机误差也不大, D -最优设计通常具有最佳表现, 但其对初始值的设定非常敏感, 如果初始值远离真实参数的值, 参数估计很有可能失败. 与 D -最优设计相比, 正交对初始参数的位置不那么敏感, 但随着随机误差增加到一定水平, 如果初始值远离真实参数的值, 参数估计也很有可能失败. 在所有的实验中, 均匀设计的表现最稳健. 均匀设计在化学和化学工程中的应用的更多结果可参见Liang, Fang 和 Xu [69], 该文在化学和化学工程界产生了重要影响. 这些结果吸引更多的化学家们应用均匀设计方法解决问题. 进一步地, Xu, Xu, Li 和 Fang [70] 在 *Journal of Chemometrics* 发表文章回顾了均匀设计在化学领域, 如分离条件优化、中草药质量控制、指纹图谱分析、药物化学、环境和食品化学等的发展和各种应用.

5.2 均匀设计在优化中的应用

考虑下面的约束优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m, \\ & h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, \dots, p, \end{aligned} \quad (5.1)$$

其中函数 $f, f_1, \dots, f_m, h_1, \dots, h_p: R^s \rightarrow R$, 即约束条件包括不等式约束和等式约束. 当 $m = p = 0$ 时, 问题(5.1) 即为无约束优化问题. 当 $f, f_1, \dots, f_m, h_1, \dots, h_p$ 都是凸函数时, 称(5.1) 为凸优化问题. 显然, 线性规划是一种特殊的凸优化问题.

常用的最速下降法、牛顿法和拟牛顿法都要求目标函数最少一阶可微, 然而有些目标函数并不满足这一条件, 或者其可行域是一个离散区域. 此时, 优化问题(5.1) 变成一个离散优化问题, 其求解过程比目标函数可微情形下往往更困难. 记由问题(5.1) 的约束条件所构成的搜索区域的可行域为 \mathcal{X} . 求解优化问题的一种最简单的方法是在可行域 \mathcal{X} 中采用蒙特卡洛法产生 n 个样本, 分别计算相应的目标函数值, 其中使目标函数最小的点可作为最优解的近似. 由于蒙特卡洛法收敛速度慢, 为此我们可以用均匀设计作为工具来求解, 其主要思想是把试验区域中的随机样本替换为均匀散布的点集.

对于高维优化问题而言, 一个有 n 个点的均匀设计, 在可行域中仍较稀疏. 一种考虑是增大 n , 然而其充满整个可行域的速度仍显过慢. 为此, Fang 和 Wang [4] 提出了从数论角度得到的序贯均匀设计法 (sequential number-theoretic optimization), 并记为 SNT0. 该方法的思想如下所示: 对于可行域为 \mathcal{X} 的目标函数 $f(\mathbf{x})$, 首先在 \mathcal{X} 上均匀地安排 n 个点 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$, 得到 $f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n)$; 比较这些值并在取值最小点附近再安排一个均匀点集, 比较这些值并得到新的取值最小点; 然后根据一些准则再缩小试验区域, 直到达到要求的精度为止. SNT0可以处理非线性优化问题, 对目标函数的可微性没有要求.

图1 给出SNT0法求解优化问题的示意图. 图1(a) 和 图1(b) 分别为无约束和有约束优化问题的

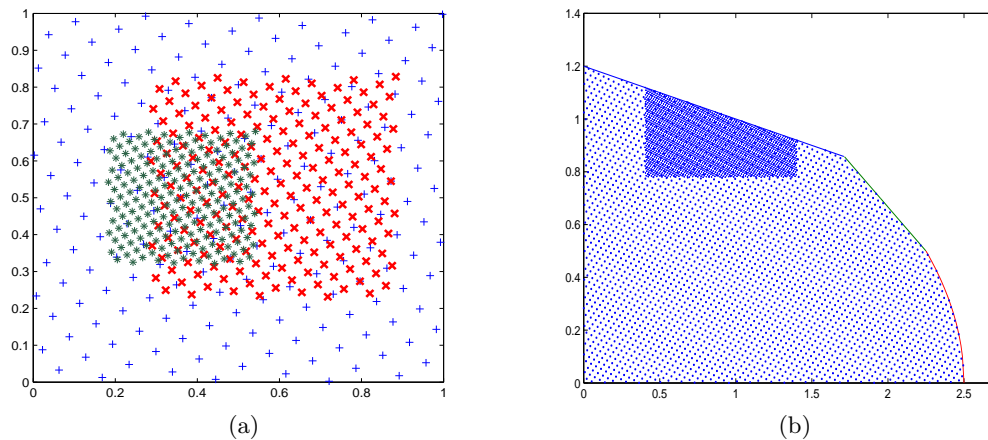


图1 二维的SNT0法示意图: (a) 变量之间没约束, (b) 变量之间有非线性约束.

求解过程示意图, 其中图1(b) 的约束条件为 $2x_1+3x_2 \leq 6, x_1+5x_2 \leq 6, 2x_1+2x_2^2 \leq 5, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$. 从图中可知, 经过几次缩小搜索区域之后, 散布的均匀点集已越来越密, 可以快速得到近似最优解. 此外, 该方法可得到多峰优化问题的全局最优解, 因为其初始的点集均匀地散布在搜索区域, 总有一个点的函数值接近全局最优解. 在SNTO法中, 也有可能出现全局最优解附近的点所对应的函数值没有局部最优解附近的函数值小, 这会导致搜索方向有误. 为此, Chan 和 Fang [71] 提出SNTO的改进方法, 可以尽量避免陷入局部最优解, 同时保证收敛速度. 文献中很多例子显示, 均匀设计及SNTO法可以快速有效地求解有约束和无约束的优化问题. 例如可应用于极大似然估计的求解等.

6 结论

均匀设计具有重要的理论意义和实用价值. 均匀试验设计是一种模型未知的部分因子设计、计算机试验中的空间填充设计、模型稳健的设计和超饱和设计, 该方法还可以应用于混料试验. 特别地, 在大数据时代, 试验设计在大数据分析中仍将扮演重要角色, 均匀设计也有这样的重要机会, 例如, 均匀设计在大数据的抽样问题中的应用等. 这些方面仍有待进一步的研究.

致谢 本文作者衷心感谢方开泰教授一直以来的指导、关心和帮助, 与方教授高效且愉悦的合作使我们受益匪浅, 并共同祝愿方开泰教授作为终身的统计学家在迈向统计金字塔顶峰的道路上永不停步. 谨以此文献给方开泰教授80华诞. 本文作者按照姓氏拼音排序.

参考文献

- 1 方开泰、刘卓雄(以集体名义). 正交试验设计. 有色金属, 1974, 8: 39-56
- 2 方开泰. 均匀设计—数论方法在试验设计的应用. 应用数学学报, 1980, 3: 363-372
- 3 Wang Y, Fang K T. A note on uniform distribution and experimental design. Chinese Sci Bull, 1981, 26: 485-489
- 4 Fang K T, Wang Y. Number-theoretic methods in statistics. Chapman and Hall, London, 1994
- 5 方开泰、林共进. 均匀试验设计的理论及其应用. 中国统计学报, 2000, 38(4): 331-351
- 6 Fang K T, Lin D K J, Winker P, Zhang Y. Uniform design: theory and applications. Technometrics, 2000, 42: 237-248
- 7 Fang K T, Li R, Sudjianto A. Design and modeling for computer experiments. Chapman and Hall/CRC, New York, 2006
- 8 Fang K T, Liu M Q, Qin H, Zhou Y D. Theory and application of uniform experimental designs. Springer, Singapore, 2018
- 9 McKay M, Beckman R, Conover W. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. Technometrics, 1979, 21: 239-245
- 10 Hua L K, Wang Y. Applications of number theory to numerical analysis. Springer and Science Press, Berlin and Beijing, 1981
- 11 Niederreiter, H. Random number generation and Quasi-Monte Carlo methods, in SIAM CBMS-NSF Regional Conference, Applied Mathematics, Philadelphia, 1992
- 12 Weyl H. über die gleichverteilung der zahlen mod eins. Math Ann, 1916, 77: 313-352
- 13 Hickernell F J. A generalized discrepancy and quadrature error bound. Math Comp, 1998, 67: 299-322
- 14 Hickernell F J. Lattice rules: How well do they measure up?, in P. Hellekalek G. Larcher, eds, Random and Quasi-Random Point Sets, Springer-Verlag, 1998, 106-166
- 15 Zhou Y D, Fang K T, Ning J H. Mixture discrepancy for quasi-random point sets. J Complexity, 2013, 29: 283-301
- 16 Hickernell F J, Liu M Q. Uniform designs limit aliasing. Biometrika, 2002, 89: 893-904
- 17 Fang K T, Lin D K J, Liu M Q. Optimal mixed-level supersaturated design. Metrika, 2003, 58: 279-291
- 18 Qin H, Fang K T. Discrete discrepancy in factorial designs. Metrika, 2004, 60: 59-72
- 19 Zhou Y D, Ning J H, Song X B. Lee discrepancy and its applications in experimental designs. Statist Probab Lett, 2008, 78: 1933-1942
- 20 Fang K T, Mukerjee R. A connection between uniformity and aberration in regular fractions of two-level factorials. Biometrika, 2000, 87: 1993-198

- 21 Fang K T, Ma C X, Mukerjee R. Uniformity in fractional factorials, in Fang K T, Hickernell F J, Niederreiter H. Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 2000. Springer, 2002: 232–241
- 22 Fang K T, Lu X, Winker P. Lower bounds for centered and wrap-around L_2 -discrepancies and construction of uniform. J Complexity, 2003, 20: 268–272
- 23 Chatterjee K, Li Z, Qin H. A new lower bound to centered and wrap-round L_2 -discrepancies. Statist Probab Lett, 2012, 82:1367–1373
- 24 Fang K T, Maringer D, Tang Y, Winker P. Lower bounds and stochastic optimization algorithms for uniform designs with three or four levels. Math Comp, 2006, 75: 859–878
- 25 Elsworth A M, Qin H. New Lower Bound for Centered L_2 -discrepancy of Four-level U-type Designs. Statist Probab Lett, 2014, 93:65–71
- 26 Fang K T, Tang Y, Yin J X. Lower bounds for wrap-around L_2 -discrepancy and constructions of symmetrical uniform designs. J Complexity, 2005, 21: 757–771
- 27 Fang K T, Tang Y, Yin J X. Lower bounds of various criteria in experimental designs. J Stat Plan Infer, 2008, 138: 184–195
- 28 Chatterjee K, Fang K T, Qin H. Uniformity in factorial designs with mixed levels. J Stat Plan Infer, 2005, 128:593 - 607.
- 29 Zhou Y D, Ning J H. Lower bounds of the wrap-around L_2 -discrepancy and relationships between MLHD and uniform design with a large size. J Stat Plan Infer, 2008, 138: 2330 - 2339.
- 30 Ke X, Zhang R, Ye H J. Two- and three-level lower bounds for mixture L_2 -discrepancy and construction of uniform designs by threshold accepting. J Complexity, 2015, 31:741 - 753
- 31 Elsworth A M, Qin H. Mixture discrepancy on symmetric balanced designs. Statist Probab Lett, 2015, 104:123 - 132.
- 32 Elsworth A M, Qin H. Asymmetric uniform designs based on mixture discrepancy. J App Statist, 2016, 43(12): 2280 - 2294.
- 33 Wang Y, Fang K T. Uniform design of experiments with mixtures, Sci China Ser A, 1996, 39: 264–275
- 34 Fang K T, Yang Z H. On uniform design of experiments with restricted mixtures and generation of uniform distribution on some domains, Statist Probab Lett 2000, 46: 113–120
- 35 Ning J H, Zhou Y D, Fang K T. Discrepancy for uniform design of experiments with mixtures. J Stat Plan Infer, 2011, 141: 1487–1496
- 36 Fang K T, Li J K. Some new results on uniform design. Chinese Science Bulletin 1994, 21: 1921–24, English version in 1995, 40: 268–272
- 37 Zhou Y D, Xu H. Space-filling properties of good lattice point sets. Biometrika, 2015, 102: 959–966.
- 38 Fang K T, Ge G N, Liu M Q. Construction of $E(f_{NOD})$ -optimal supersaturated designs via Room squares, in A. Chaudhuri M. Ghosh, eds, Calcutta Statistical Association Bulletin, 2002, 52: 71–84
- 39 Fang K T, Ge G N, Liu M Q. Uniform supersaturated design and its construction. Sci China Ser A, 2002, 45: 1080–1088
- 40 Fang K T, Ge G N, Liu M Q. Construction of optimal supersaturated designs by the packing method. Sci China Ser A, 2004, 47: 128–143
- 41 Fang K T, Ge G N, Liu M Q, Qin H. Optimal supersaturated designs and their constructions. Technical Report MATH-309, Hong Kong Baptist University, 2001
- 42 Fang K T, Ge G N, Liu M Q, Qin H. Construction on minimum generalized aberration designs. Metrika, 2003, 57: 37–50
- 43 Fang K T, Ge G N, Liu M Q, Qin H. Combinatorial constructions for optimal supersaturated designs. Discrete Math, 2004, 279: 191–202
- 44 Fang K T, Ge G N, Liu M Q, Qin H. Construction of uniform designs via super-simple resolvable t -designs. Utilitas Mathematica 2004, 66: 15–32
- 45 Winker P, Fang K T. Application of threshold accepting to the evaluation of the discrepancy of a set of points. SIAM Numer Anal , 1997, 34: 2038–2042
- 46 Winker P, Fang K T. Optimal U-type design, in H. Niederreiter, P. Zinterhof P. Hellekalek, eds, Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 1996, Springer, 1998, 436–448
- 47 Zhou Y D, Fang K T. An efficient method for constructing uniform designs with large size. Computation Stat, 2013, 28(3): 1319–1331
- 48 Zhou Y D, Fang K T, Ning J H. Constructing uniform designs: a heuristic integer programming method. J Complexity, 2012, 28: 224–237
- 49 Fang K T, Lu X, Tang Y, Yin J. Constructions of uniform designs by using resolvable packings and coverings. Discrete Math, 2004, 274: 25–40
- 50 Fang K T, Shiu W C, Pan J X. Uniform designs based on Latin squares. Stat Sinica, 1999, 9: 905–912
- 51 Fang K T, Tang Y, Yin J X. Resolvable partially pairwise balanced designs and their applications in computer experiments. Utilitas Mathematica 2006, 70: 141–157

- 52 Fang K T, Ma C X. Wrap-around L_2 -discrepancy of random sampling, Latin hypercube and uniform designs. *J Complexity*, 2001, 17: 608–624
- 53 Fang K T, Ma C X, Winker P. Centered L_2 -discrepancy of random sampling and Latin hypercube design, and construction of uniform designs. *Math Comp*, 2002, 71: 275–296
- 54 Fang K T, Ke X, Elsworth A M. Construction of uniform designs via an adjusted threshold accepting algorithm. *J Complexity*, 2017, 43: 28–37
- 55 Ma C X, Fang K T, Lin D K J. A note on uniformity and orthogonality. *J Stat Plan Infer*, 2003, 113: 323–334
- 56 Tang Y, Xu H, Lin D K L. Uniform fractional factorial designs. *Ann Statist*, 2012, 40: 891–907
- 57 Zhou Y D, Xu H. Space-filling fractional factorial designs. *J Amer Stat Assoc*, 2014, 109: 1134–1144.
- 58 Zhang A, Fang K T, Li R, Sudjianto A. Majorization framework for balanced lattice designs. *Ann Statist*, 2005, 33: 2837–2853
- 59 Fang K T, Ma C X. Relationship between uniformity, aberration and correlation in regular fractions 3^{s-1} , in K. T. Fang F. J Hickernell H. Niederreiter, eds, *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2000*, Springer, 2002, 213–231
- 60 Ma C X, Fang K T, Lin D K J. On isomorphism of fractional factorial designs. *J Complexity*, 2001, 17: 86–97
- 61 Liu M Q, Chan L Y. Uniformity of incomplete block designs. *Int J Mater Prod Tec*, 2004, 20: 143–149
- 62 Liu M Q, Fang K T. Some results on resolvable incomplete block designs. *Sci China Ser A*, 2005, 48: 503–512
- 63 Fang K T, Lin D K J. Uniform designs and their application in industry, in C. Rao R. Khattree, eds, *Handbook on Statistics 22: Statistics in Industry*, 2003, 131–170
- 64 Fang K T. Uniform designs, in *Encyclopedia of Statistics*, Wiley, New York, 2006, 8841–8850
- 65 Fang K T, Chan L Y. Uniform design and its industrial applications, in H. Pham, ed., *Springer Handbook of Engineering Statistics*, 2006, 229–247
- 66 Fang K T. Uniform experimental design, in *International Encyclopedia of Statistical Science*, Springer, Ed by Lovric, Miodrag, 2011
- 67 Fang K T, Hickernell F J. Uniform experimental design, in *Encyclopedia on Statistics in Quality and Reliability*, Volume 4, 2008, 2037–2040
- 68 Xu Q S, Liang Y Z, Fang K T. The effects of different experimental designs on parameter estimation in the kinetics of a reversible chemical reaction. *Chemometr Intell lab*, 2000, 52: 155–166
- 69 Liang Y Z, Fang K T, Xu Q S. Uniform design and its applications in chemistry and chemical engineering. *Chemometr Intell lab*, 2001, 58: 43–57
- 70 Xu Q S, Xu Y D, Li L, Fang K T, Uniform experimental design in Chemometrics. *J Chemometr*, 2018, e3020. doi:10.1002/cem.3020.
- 71 Chan L Y, Fang K T. A sequential procedure for experiments, in the *Souvenir Booklet of the 2005 International Symposium on Uniform Design*, Beijing, 2005, 25 – 36.

Theory and application of uniform designs

Ping He, Dennis K.J. Lin, Min-Qian Liu, Qingsong Xu & Yongdao Zhou

Abstract With the development of science and technology, the numbers of factors in experiments become larger and larger, and the relationships among factors become more and more complex, then it is very important to scientifically organize the experiments. Orthogonal designs, uniform designs and optimal designs are the popular types of experimental designs. The main idea of uniform designs is to scatter the design points on the experimental domain uniformly. Uniform designs have many advantages such as choosing the numbers of runs flexibly, robustness for models, suitability for different types of experimental domains. This paper reviews the theoretical development, current progress and applications of uniform designs.

Keywords Computer experiment, Discrepancy, Orthogonal design, Uniform design

MSC(2010) 62K15

doi: