均匀超饱和设计在计算机试验中的应用

刘民千	方开泰
南开大学统计学系	香港浸会大学数学系
天津　300071	香港　九龙塘

摘　要

超饱和设计是一种试验次数不足以同时估计其设计矩阵的列所代表的主效应的因子设计．本文通过一个夜视器案例的研究，探讨了均匀超饱和设计在计算机试验中的应用．案例模拟中我们采用了一个均匀的混合水平因子超饱和设计和中心化的二次回归模型．本案例的研究结果显示均匀超饱和设计和二次回归建模方法对因子筛选和建模是十分有效的．它们不仅可用于计算机试验，而且也可有效地应用于在工业和其它科学试验中．

关键词：　超饱和设计，计算机试验，均匀设计，逐步回归法．

§1　引言

所谓计算机试验 (computer experiment), 是指利用计算机模拟进行的试验．它对一个客观的模型利用统计的方法进行模拟，在计算机上实现．计算机试验在过去的 20 多年中得到了迅速发展，已经成为试验设计的一个重要分支．在科学和工程中遇到的复杂的系统或现象通常由一组方程决定．要同时求解这些方程常常是很困难的事情，但是我们可以用一计算机程序来模拟．假定在一个计算机试验中，当输入参数 $x_1, \ldots, x_m$ 时，系统的输出 (响应) y 由下述模型决定：

$$y = g(x_1, \cdots, x_m) + \epsilon, \tag{1}$$

其中函数 g 是未知的， ϵ 是随机误差 (对一个确定的模型， ϵ 可以设为 0)．这儿的目的是找一个合适的近似模型

$$y = h(x_1, \cdots, x_m), \tag{2}$$

来取代真正的模型 (1) (参见图 1)．

图 1: 计算机试验

为了找到一个满意的近似模型 (2), 需要预先取一组输入参数 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$, 其中 $\boldsymbol{x}_k = (x_{k1}, \ldots, x_{km}) \in D, k = 1, \ldots, n$, D 为输入参数空间. 通过 (1) 可以算出 $y_k = f(\boldsymbol{x}_k) = f(x_{k1}, \ldots, x_{km}), k = 1, \ldots, n$, 然后建立近似模型 (2). 为此，要求

(1) 给出能 填满空间的试验设计 (space filling design);

(2) 给出一套建立输入和输出的建模方法.

为了解决上述两个问题，涌现出不少新的试验设计方法，如拉丁超立方体抽样 (Latin hypercube sampling) (Mckay, Beckman and Conover (1979)), 均匀设计 (方开泰 (1980), Wang and Fang (1981)), 最小最大设计 (minimax design) 和最大最小设计 (maximin design) (Johnson, Moore and Ylvisakes (1990)) 等. 在建模方法上，Riccmagno, Schwabe and Wynn (1997) 提出了傅立叶回归模型 (Fourier regression model), 不少作者建议用随机过程来建模，称之为 "spatial modeling techniques" (Sacks, Welch, Mithchell and Wynn (1989)) 以及用 Bayes 方法来建模 (Morris, Mitchell and Ylvisakes (1993)), Fang and Wang (1994) 则建议用为多项式回归模型. 计算机试验的综合评述文章很多，如张润楚，王兆军 (1994), Bates, Buck, Riccomagno and Wynn (1996) 和 Koehles and Owen (1996) 等.

本文想通过一个模拟案例的研究介绍和讨论均匀超饱和设计在计算机试验中的应用, 包括一个计算机试验的设计和数据分析过程及建模方法. 在设计方面，我们将采用混合水平因子超饱和设计，在建模方面，我们将采用多项式回归模型.

§2 均匀超饱和设计

超饱和设计 (supersaturated design) 是一种试验次数不足以同时估计其设计矩阵的列所代表的主效应的因子设计. 使用超饱和设计的主要吸引力在于它的经济性，用很少的试验次数可用来研究比试验次数更多的因子. 尤其在工业试验的初始阶段需要进行因子筛选时用这种设计. 自 Booth and Cox (1962) 首次系统研究以来，由于各种原因，较长一段时间里这方面工作进展缓慢. 直到近些年，由于工业统计试验的推动和计算机技术的发展，这类研究又迅速发展. Lin (1993) 提出了一种用 Hadamard 阵折半来构造超饱和设计的方法，之后出现了一系列重要的成果. 有关这方面的设计准则和构造方法等，读者可参见 Liu and Zhang (2000), Fang, Ge and Liu (2002, 2003), Fang, Lin and Liu (2003) 及其所引文献，本文不作详述.

表 1: $S(15;3^1 5^5)$ **设计**

Run	1	2	3	4	5	6
1	1	1	2	2	2	2
2	1	2	3	5	1	4
3	1	3	5	1	4	3
4	1	4	1	4	3	5
5	1	5	4	3	5	1
6	2	1	3	3	3	3
7	2	2	5	4	2	1
8	2	3	4	2	1	5
9	2	4	2	1	5	4
10	2	5	1	5	4	2
11	3	1	4	4	4	4
12	3	2	1	2	5	3
13	3	3	2	5	3	1
14	3	4	5	3	1	2
15	3	5	3	1	2	5

现有的关于超饱和设计的文献，绝大多数是从衡量近似正交性的角度出发选取设计的最优性准则并构造相应的最优设计. Liu and Hickernell (2002) 首次探讨了二水平这类设计的近似正交性与均匀性之间的等价关系. Fang, Lin and Liu (2003) 则从近似正交性和均匀性的不同角度提出了混合水平因子设计的最优性准则并构造了一系列最优的混合水平因子设计，而 Fang, Ge and Liu (2002) 则直接在均匀性准则下构造了一系列最优的高水平因子超饱和设计. 尽管传统的超饱和设计主要是用来作筛选试验的，由 Fang, Ge and Liu (2002) 和 Fang, Lin and Liu (2003) 给出的方法构造的均匀超饱和设计也可以用来作为计算机试验的一种 *填满空间的设计*, 因为这样一个设计的设计点均匀地分散在试验区域内. 一个具有 n 次试验， k_i 个 q_i 水平因子 $(i=1,\ldots,r)$ 的超饱和设计常用 $S(n;q_1^{k_1}\cdots q_r^{k_r})$ 来表示，其中 $q_1,\ldots,q_r$ 是 n 的约数. 表 1 给出了一个混合水平因子超饱和设计 $S(15;3^1 5^5)$, 它表示一个有 15 次试验，可以安排 1 个 3 水平因子， 5 个 5 水平因子的设计. 它是由一个饱和正交表 $L_{25}(5^6)$ 用 Fang, Lin and Liu (2003) 的方法构造而来的. 由 Fang, Lin and Liu (2003) 可知，这是一个均匀的超饱和设计. 下面我们将利用该 $S(15;3^1 5^5)$ 来探讨均匀超饱和设计在计算机试验中的建模问题.

§3 夜视器 (Night Detector) 问题

在图 2 所示的 "稳流器 (Steady Current Circuit)" 中，输出电流 y 与 6 个输入变量有关：电阻值 R_1, R_2, R_3 和 R_4, 电压值 V_{be} 和 V_{cc}. 根据电工学原理，响应 y 由

$$y = \frac{R_1 V_{cc}}{(R_1 + R_2) R_3} - \frac{R_3 + 2R_4}{2R_3 R_4} V_{be}, \tag{3}$$

决定，其中 6 个输入变量的试验区域 $\mathcal{D}$ 为：

$$R_1 \in [500\Omega, 1500\Omega], \quad R_2 \in [2400\Omega, 4800\Omega], \quad R_3 \in [22\Omega, 34\Omega],$$
$$R_4 \in [270\Omega, 450\Omega], \quad V_{be} \in [0.6V, 0.8V], \quad V_{cc} \in [17V, 19V].$$

输入变量和相应的输出值分别记为 $\boldsymbol{x} = (R_1, R_2, R_3, R_4, V_{be}, V_{cc})$ 和 $y(\boldsymbol{x})$.

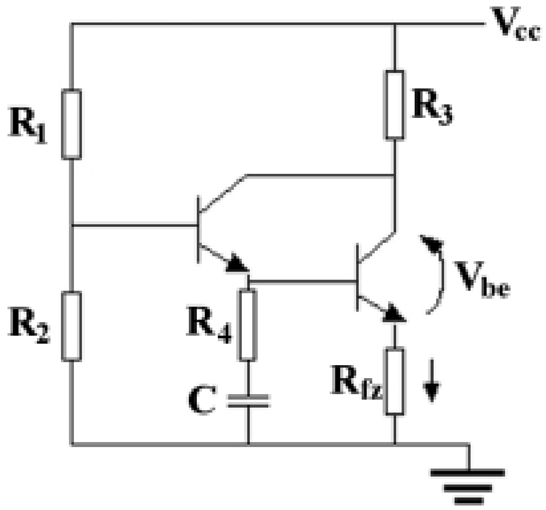

图 2: 夜视器

对该模拟案例，有 6 个输入变量，我们取表 1 给出的 $S(15; 3^1 5^5)$ 设计来安排试验，上节已经指出，这是一个均匀的超饱和设计. 对每一个输入变量，其 q 个水平 $(1, \ldots, q)$ 由其取值区间内 q 个等距的值 (包括两个端点) 代替，这样得到的试验方案和由公式 (3) 算出的相应的 y 值列在表 2 中.

我们设想用 $\boldsymbol{x} = (R_1, R_2, R_3, R_3, V_{be}, V_{cc})$ 的中心化二次模型的子模型来近似真正的模型 (3). 但该二次模型有 29 个未知参数, 需要用回归分析中筛选变量的方法去掉贡献不显著的项. 由于试验次数 $n < 29$, 只有前进法 (forward procedure) 和逐步回归法 (stepwise regression) 可用. 在该案例研究中, 逐步回归法的结果优于前进法, 以下仅介绍用逐步回归法得到的结果. 由逐步回归法，我们得到下面包括 9 项的子模型：

表 2: 试验方案和相应的输出值 y

Run	R_1	R_2	R_3	R_4	V_{be}	V_{cc}	y
1	500	2400	25	315	0.65	17.5	0.09366
2	500	3000	28	450	0.60	18.5	0.07229
3	500	3600	34	270	0.75	18.0	0.04111
4	500	4200	22	405	0.70	19.0	0.05919
5	500	4800	31	360	0.80	17.0	0.02482
6	1000	2400	28	360	0.70	18.0	0.16310
7	1000	3000	34	405	0.65	17.0	0.10508
8	1000	3600	31	315	0.60	19.0	0.11293
9	1000	4200	25	270	0.80	18.5	0.10883
10	1000	4800	22	450	0.75	17.5	0.10222
11	1500	2400	31	405	0.75	18.5	0.20441
12	1500	3000	22	315	0.80	18.0	0.23509
13	1500	3600	25	450	0.70	17.0	0.17122
14	1500	4200	34	360	0.60	17.5	0.11697
15	1500	4800	28	270	0.65	19.0	0.13715

$$\begin{aligned}
y &= 0.11862500 + 0.00010711(R_1 - 1000) - 0.00003546(R_2 - 3600) \\
&- 0.00313784(R_3 - 28) + 0.14061744(V_{be} - 0.7) - 0.00000002(R_1 - 1000)^2 \\
&- 0.00000010(R_1 - 1000)(R_4 - 360) - 0.00009838(R_2 - 3600)(V_{be} - 0.7) \\
&- 0.00819567(R_3 - 28)(V_{be} - 0.7) - 0.15849830(V_{be} - 0.7)(V_{cc} - 18),
\end{aligned} \tag{4}$$

其 $R^2 = 0.99961769$. 相应的方差分析 (ANOVA) 表由表 3 给出. 对残差图 (参见图 3) 的考察没有显示异常情况. 其它的建模方法也可以采用. 有关超饱和设计的数据分析方法的回顾与比较, 请参见 Li and Lin (2002, 2003).

表 3 只给出了拟合的结果, 建模的主要目的是为了预报响应 y 在没有直接观测到的点 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}$ 处的值 $y(\boldsymbol{x})$, 在文献中一般采用均方误 (mean squared error, MSE) 来度量预报的精度, 它定义为

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(y(\boldsymbol{x}_k) - \hat{y}(\boldsymbol{x}_k))^2, \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{x}_k, i = 1, \cdots, N$ 是从区域 $\mathcal{D}$ 中随机抽取的 N 个独立同分布样本, $\hat{y}(\boldsymbol{x}_k)$ 是 $y(\boldsymbol{x}_k)$ 在近似模型下的预测值. 为了度量我们的预测值与模型真值的接近程度, 我们从 $\mathcal{D}$ 上的均匀分

表 3: 模型 (4) 的方差分析表

来源	自由度	平方和	均方	F 比	p 值
回归	9	0.04762178	0.00529131	1452.59	0.0001
误差	5	0.00001821	0.00000364		
总和	14	0.04764000			
变量	参数估计值	标准误	II 型平方和	F 比	p 值
截距	0.11862500	0.00122245	0.03430157	9416.56	0.0001
R1	0.00010711	0.00000214	0.00913840	2508.70	0.0001
R2	-0.00003546	0.00000069	0.00968659	2659.19	0.0001
R3	-0.00313784	0.00013577	0.00194584	534.18	0.0001
Vbe	0.14061744	0.00848154	0.00100127	274.87	0.0001
R1R1	-0.00000002	0.00000001	0.00005073	13.93	0.0135
R1R4	-0.00000010	0.00000002	0.00006235	17.12	0.0090
R2Vbe	-0.00009838	0.00001660	0.00012797	35.13	0.0019
R3Vbe	-0.00819567	0.00283045	0.00003054	8.38	0.0340
VbeVcc	-0.15849830	0.01334703	0.00051369	141.02	0.0001

注： R1= $R_1 - 1000$, R2= $R_2 - 3600$, R3= $R_3 - 28$,
R4= $R_4 - 360$, Vbe= $V_{be} - 0.7$, Vcc= $V_{cc} - 18$.

布中随机选取了 1000 个样本点. 相应的 $y(\boldsymbol{x})$ 值从 0.0357 到 0.2499. 我们对每一个点进行了预测，计算了预测的误差 $y(\boldsymbol{x}_k) - \hat{y}(\boldsymbol{x}_k)$, 在图 4 中给出了这些误差的盒子图 (boxplot), 相应的 MSE 为 2.4135×10^{-4}. 盒子图和 MSE 值表明在整个区域 $\mathcal{D}$ 上预测得都比较好.

§4 总结

本文利用由 Fang, Lin and Liu (2003) 的方法构造的一个 15 次试验的混合水平因子超饱和设计，研究了夜视器的建模问题，探讨了均匀超饱和设计在计算机试验中的应用. 案例中的统计模型采用的是中心化的二次回归模型. 本模拟案例显示均匀超饱和设计和二次回归建模方法对因子筛选和建模是十分有效的. 它们不仅可用于计算机试验，而且也可有效地应用于在工业和其它科学试验中.

致谢

本研究得到国家自然科学基金 (10171051) 和南开大学青年教师基金的资助，作者谨致谢意.

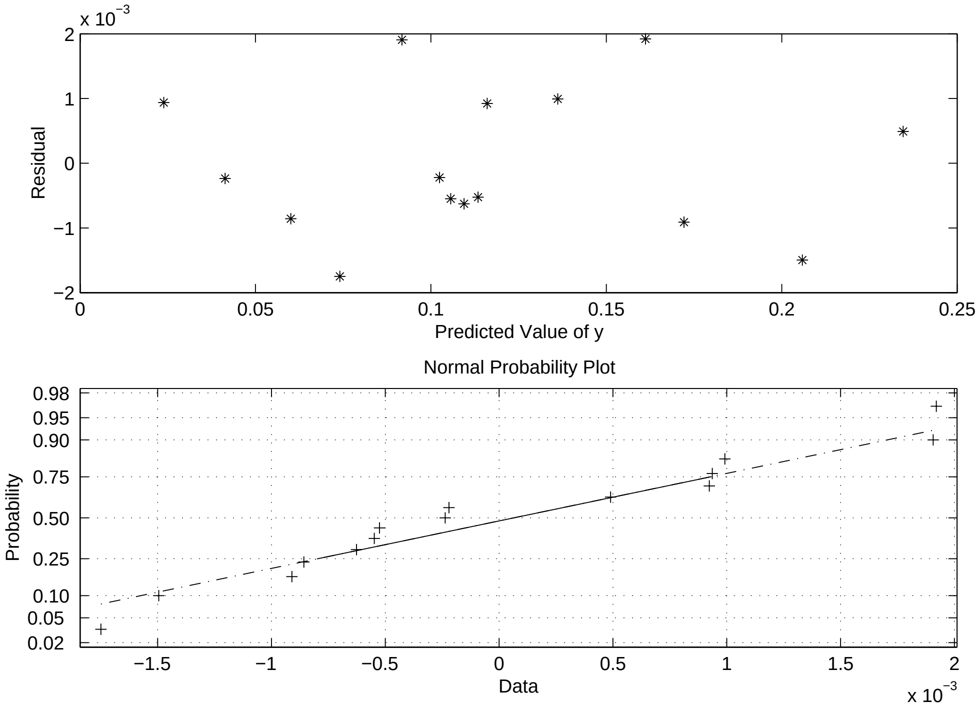

图 3: 模型 (4) 的残差图和正态概率图

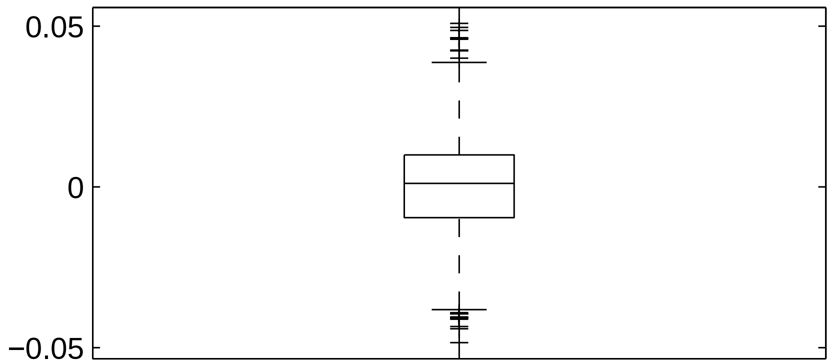

图 4: 模型 (4) 在 1000 个样本点的预测误差

参考文献

[1] Bates, R. A., Buck, R. J., Riccomagno, E. and Wynn, H. P. (1996). Experimental design and observation for large systems, *Journal of Royal Statistical Society, Ser. B*, **58**, 77–94.

[2] Booth, K. H. V. and Cox, D. R. (1962). Some systematic supersaturated designs, *Technometrics*, **4**, 489-495.

[3] 方开泰 (1980). 均匀设计 — 数论方法在试验设计中的应用, 应用数学学报, **3**, 363–372.

[4] Fang, K. T. (方开泰), Ge, G. N. (葛根年) and Liu, M. Q. (刘民千) (2002). Uniform supersaturated design and its construction, *Science in China, Ser. A*, **45**, 1080–1088.

[5] Fang, K. T. (方开泰), Ge, G. N. (葛根年) and Liu, M. Q. (刘民千) (2003). Construction of optimal supersaturated designs by the packing method, *Science in China, Ser. A*, in press.
(方开泰, 葛根年, 刘民千 (2003). 用填充方法构造最优超饱和设计, 中国科学(*A* 辑), **33**(5), 446–458.)

[6] Fang, K. T. (方开泰) and Wang, Y. (王元) (1994). *Number-theoretic Methods in Statistics*, Chapman and Hall, London.

[7] Fang, K. T. (方开泰), Lin, D. K. J. (林共进) and Liu, M. Q. (刘民千) (2003). Optimal mixed-level supersaturated design, *Metrika*, in press.

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

[9] Koehler, J. R. and Owen, A. B. (1996). *Computer Experiments*, in *Handbook of Statistics, Vol. 13*, eds. S. Ghosh, and C. R. Rao, Amsterdam: Elsevier Science B.V., pp.261–308.

[10] Li, R. (李润泽) and Lin, D. K. J. (林共进) (2002). Data analysis of supersaturated design, *Statistics & Probability Letter*, **59**, 135–144.

[11] Li, R. (李润泽) and Lin, D. K. J. (林共进) (2003). Analysis methods for supersaturated design: some comparisons, *Journal of Data Science*, **1**, 249–260.

[12] Lin, D. K. J. (林共进) (1993). A new class of supersaturated designs, *Technometrics*, **35**, 28–31.

[13] Liu, M. Q. (刘民千) and Hickernell, F. J. (2002). $E(s^2)$-optimality and minimum discrepancy in 2-level supersaturated designs, *Statistica Sinica*, **12**(3), 931–939.

[14] Liu, M. Q. (刘民千) and Zhang, R. C. (张润楚) (2000). Construction of $E(s^2)$ optimal supersaturated designs using cyclic BIBDs, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **91**, 139–150.

[15] 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.

[16] 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.

[17] Riccmagno, E., Schwabe, R. and Wynn, H. P. (1997). Lattice-based D-optimum design for Fourier regression, *The Annals of Statistics*, **25**, 2313–2327.

[18] Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J. and Wynn, H. P. (1989). Design and analysis of computer experiments, *Statistical Science*, **4**, 409–435.

[19] Wang, Y. (王元) and Fang, K. T. (方开泰) (1981). A note on uniform distribution and experimental design, *KeXue TongBao*, **26**, 485-489.

[20] 张润楚, 王兆军 (1994). 关于计算机试验的设计理论和数据分析, 应用概率统计, **10**, 420–436.