第11卷第3期　　空 军 工 程 大 学 学 报(自然科学版)　　Vol. 11 No. 3
2010年6月　　JOURNAL OF AIR FORCE ENGINEERING UNIVERSITY(NATURAL SCIENCE EDITION)　　Jun. 2010

一种近正交试验设计方法

周晓光，李为民，陈　刚，黄仁全
(空军工程大学　导弹学院，陕西　三原　713800)

摘　要:为提高对多维输入变量模型有效分析研究的能力,找出试验设计中正交性与填充空间性质的结合点,减少试验设计算法本身的复杂度,结合正交试验设计和均匀试验设计,应用对正交性及均匀性的多重度量方法提出了一种近正交试验设计方法,利用该方法所设计的近正交试验具有近正交性和良好的填充空间性质。应用本方法设计了一个8-11个变量,每个变量33个水平的近正交试验,通过对比分析,证明了使用该方法设计的近正交试验具有近正交性和良好的填充空间性质,从而验证了该文提出方法的正确性和可行性。

关键词:正交试验;均匀试验;近正交试验
DOI:10.3969/j.issn.1009-3516.2010.03.019
中图分类号: O212.6　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1009-3516(2010)03-0084-05

在系统工程、高科技发展的推动下,计算机仿真试验的需求十分强烈,迫切要求高质量的试验设计。在北美洲,3位学者(McKay, M. D., Beckman, R. J. and Conover, W. J. (1979))在"Technometrics"提出了"拉丁超立方体抽样"(Latin Hypercube Sampling,LHS)的方法,并立即得到广泛的应用,一批学者对其理论和方法作了系统地研究和发展,形成了一个独立的分支。差不多在同一时间,在中国,方开泰和王元院士提出了"均匀设计"[1-2](Uniform Design,UD)。近年来,许多学者在试验设计方面作了大量工作,Flournoy提出了Bayes设计,Chatterjee提出了搜索线形模型的方法,Morrice把频域方法引入了试验设计等等。

本文结合正交试验设计和均匀试验设计,设计一种近正交试验设计,利用该方法实现的近正交试验,其相关系数小于0.03,满足近正交性,填充空间性质好,方法简单,所需的运行次数少,容易实现。

1　正交性和填充空间的度量

1.1　正交性的度量

正交设计保证了回归模型系数的相互独立性,增强了分析评估因素对试验指标的影响和各因素的交互作用的能力[3-4]。有2种方法可以用来衡量正交程度。一个是相关系数,用矩阵中所用列的相关系数的最大值作为矩阵相关性的度量。向量$\boldsymbol{v}=[v_1,v_2,\cdots v_n]^{\mathrm{T}}$、$\boldsymbol{w}=[w_1,w_2,\cdots,w_n]$的相关系数定义为[5-6]:

$$\rho=\frac{\sum_{i=1}^{n}[(v_i-\bar{v})(w_i-\bar{w})]}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(v_i-\bar{v})^2\sum_{i=1}^{n}(w_i-\bar{w})^2}} \tag{1}$$

如果向量$\boldsymbol{v}=[v_1,v_2,\cdots v_n]^{\mathrm{T}}$和$\boldsymbol{w}=[w_1,w_2,\cdots,w_n]$正交,那么相关系数$\rho=0$。

另一种度量相关数的方法是$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$的条件数,$\boldsymbol{X}$是试验设计矩阵。正交矩阵的条件数是1,非正交矩阵的条

收稿日期:2009-09-01
基金项目:国家"863"计划资助项目(2008AAXXX105)
作者简介:周晓光(1982-),男,吉林蛟河人,博士生,主要从事防空反导作战运筹分析研究;
E-mail:zhanglili2117@163.com
李为民(1964-),男,甘肃民勤人,教授,博士生导师,主要从事防空反导作战运筹分析、空天一体对抗研究.

件数大于1。一般条件数取 $\mathrm{cond}_\infty(\boldsymbol{\phi})$ 或 $\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{X}^2\boldsymbol{X})$。$\mathrm{cond}_\infty(\boldsymbol{\phi})$ 的定义如下:

$$\mathrm{cond}_\infty(\boldsymbol{\phi}) = \|\boldsymbol{\phi}\|_\infty \|\boldsymbol{\phi}^{-1}\|_\infty \tag{2}$$

式中:$\boldsymbol{\phi}$ 是所设计试验矩阵的相关系数矩阵。$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{X}^2\boldsymbol{X})$ 定义如下[7]:

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{X}^2\boldsymbol{X}) = \frac{\Psi_1}{\Psi_n} \tag{3}$$

式中:Ψ_1 是 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的最大特征值;Ψ_n 是 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的最小特征值。

1.2　填充空间的度量

采用定义偏差对填充空间的均匀性进行度量。假设 $P = \{x_j, j = 1,2,\cdots,n\}$ 是集合 C^k 上的点集,$v([0,\gamma]) = \gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_k$ 代表矩形 $[0,\gamma]$ 的体积。对于任何 $\gamma \in C^k$,$N(\gamma,P)$ 代表满足条件 $x_j \leqslant \gamma$ 的点的数目。那么偏差为[8]:

$$L_\infty = \sup_{\gamma \in C^k} \left| \frac{N(\gamma,P)}{n} - v(0,\gamma) \right| \tag{4}$$

由上式可知,L_∞ 方差比较了位于矩形子空间点的比例与矩形体积的大小,是所有以原点为初始段的嵌套矩形绝对方差的上确界。L_∞ 方差值过大表明在某个亚区域有过多或者过少的试验设计点。方差值越小意味着均匀性越好。对于多变量多水平的试验,L_∞ 的计算量大,不宜计算。L_2 方差是对 L_∞ 的改进,L_2 的定义如下:

$$ML_2 = \left(\frac{4}{3}\right)^k - \frac{2^{1-k}}{n}\sum_{d=1}^{n}\prod_{i=1}^{k}(3 - x_{di}^2) + \frac{1}{n^2}\sum_{d=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\prod_{i=1}^{k}[2 - \max(x_{di},x_{ji})] \tag{5}$$

同样 L_2 方差小表示具有良好的均匀性。第2种度量充满空间性质的方法是欧几里得最大最小距离,对于一个给定的设计,定义距离序列为 $d = \left(d_1, d_2, \cdots, d_{\frac{n(n-1)}{2}}\right)$,$d$ 中的元素是按 n 个设计点中最小值到最大值的排序。欧几里得最小距离定义为 d_1,d_1 值越大越好,表明设计点均匀性好。

2　近正交试验算法

2.1　正交化算法

正交化算法首先构建了3个矩阵:$\boldsymbol{M},\boldsymbol{S},\boldsymbol{T}$。$\boldsymbol{M}$ 用以描述个变量的水平置换信息,$\boldsymbol{S}$ 矩阵用以描述变量水平的交互信息,应用矩阵 $\boldsymbol{M}$、$\boldsymbol{S}$ 构建正交矩阵 $\boldsymbol{T}$[9]。

对于 k 个输入变量的模型,模型需要运行的次数及(试验设计的每个变量水平数)n 满足如下关系式:

$$n = 2^m + 1 \quad , \quad k = m + \binom{m-1}{2} \tag{6}$$

由式(6)可知 k 必须是偶数,且模型运行次数是2的幂加1。正交化算法如下:

步骤1　构建矩阵 $\boldsymbol{M}$。首先创建一个初始向量 $\boldsymbol{e}$ 作为矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的第一列,$\boldsymbol{e}$ 是自然数 $(1,2,\cdots,q)$ 的随机排列,为简单设计一般取 $\boldsymbol{e} = (1,2,\cdots,q)^{\mathrm{T}}$。矩阵 $\boldsymbol{M}$ 是 $q \times k$ 维矩阵,其中 $q = \frac{n-1}{2}$。

步骤2　构建 $\boldsymbol{A}_L$ 矩阵:

$$\boldsymbol{A}_L = \underbrace{\boldsymbol{I}\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{I}}_{m-1-L} \otimes \underbrace{\boldsymbol{R}\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{R}}_{L} \tag{7}$$

式中 $\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵,个数为 $m-1-L$,R 为单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 所有满足条件 $i+j = q+1$ 的行变化 $P(i,j)$,个数为 L,例如当 $q = 2$ 时 $\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$。

步骤3　是构建 $\boldsymbol{M}$ 矩阵的其它列。对于列数小于 $m-1$ 的列应用 $\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{e}$ 构建,其中 $i = 1,2,\cdots,m-1$,对于列数大于 m 的列应用 $\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{e}$ 构建,其中 $i,j \in \{1,2,\cdots,m-1\}$,$i \neq j$。

矩阵 $\boldsymbol{S}$ 是一个 $q \times k$ 维矩阵。$\boldsymbol{S}$ 的第一列由 q 个 $+1$ 组成,第2列到 m 是 $+1$ 和 -1 构成的正交矩阵,第 $m+1$ 到 k 列由对应列相乘得到。

矩阵 $\boldsymbol{T}$ 是由矩阵 $\boldsymbol{M}$、$\boldsymbol{S}$ 构造的以零元素行为对称的 $n \times k$ 维矩阵。

2.2　降低相关性算法

Florian 提出了降低试验矩阵相关性的方法,矩阵的列元素由元素的行位置$(1,2,\cdots,n)$ 所代替,构建的矩阵为 $\boldsymbol{W}$,$k \times k$ 维矩阵 $\boldsymbol{C}$ 描述矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的相关性,如果矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的列两两不相关,那么矩阵 $\boldsymbol{C}$ 为 $k \times k$ 的单位矩阵[10]。对矩阵 $\boldsymbol{C}$ 进行 Cholesky 分解:$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{Q} \times \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{Q}^{-1}$,那么有:

$$\boldsymbol{D} \times \boldsymbol{C} \times \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} \tag{8}$$

原始的矩阵 $\boldsymbol{W}$ 转化为新的矩阵 $\boldsymbol{W}_B$:

$$\boldsymbol{W}_B = \boldsymbol{W} \times \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

对矩阵 $\boldsymbol{W}_B$ 的非整数的元素,使用元素的行位置替代。

Iman 和 Conover 已经证明了矩阵 $\boldsymbol{W}_B$ 的相关性小于矩阵 $\boldsymbol{W}$[3],重复此过程,可以直到 $\boldsymbol{W}_B$ 的相关性小于预定值,便可以获得近正交试验设计矩阵。

2.3 近正交试验设计方法

设计 8 - 22 变量的近正交试验的方法:

步骤 1 确定试验所需的输入变量个数($k>7$),如果变量值不是 11、16、22,那么变量个数依向上最近原则设定为 11,16,22。

步骤 2 设定相关系数 ρ 和条件数的预定值。

步骤 3 使用随机生成的列向量 $\boldsymbol{e}$,使用算法正交化构建试验设计矩阵的 $\boldsymbol{M}$、$\boldsymbol{S}$ 及 $\boldsymbol{T}$。

步骤 4 计算设计矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的相关系数和条件数。

步骤 5 如果**步骤** 4 中所求 $\boldsymbol{T}$ 的相关系数和条件数大于所设定的预定值,返回**步骤** 3,重新生成随机向量 $\boldsymbol{e}$,构造设计矩阵 $\boldsymbol{T}$,并计算相关系数和条件数,重复**步骤** 3、4、5 直到相关系数和条件数小于预定值;如果**步骤** 4 中所求的相关系数和条件数小于所设定的预定值,继续进行**步骤** 6。

步骤 6 使用降低相关性算法对设计矩阵 $\boldsymbol{T}$ 进行处理,减小设计矩阵的相关性和条件数直到满足条件。

步骤 7 计算应用降低相关性算法每一步生成的设计矩阵的最小距离和 ML_2 方差,并按最小距离和 ML_2 方差对设计结果进行排序,选择最小距离与 ML_2 方差和最小的设计。

步骤 8 如果变量个数 k 不是 7、11、16、22,在**步骤** 7 的设计矩阵中任意选择所有的数目为 k 的组合列进行计算最小距离与 ML_2 方差,共进行 C_K^k(K 为 7,11,16,22)次计算,选择最小距离与 ML_2 方差最小的设计方案。

3 近正交试验设计的应用

为验证近正交试验的近正交性和良好填充空间性质,应用本方法建立了 8 - 11 个变量的近正交试验设计,并对结果进行对比分析。

随机选取 15 个满足相关性小于 0.05,条件数小于 1.15 的向量 $\boldsymbol{e}$,应用正交化算法构造设计矩阵,应用降低相关性算法减小各设计矩阵的相关系数和条件数,直到各设计矩阵的相关系数小于 0.03,条件数小于 1.13,满足近正交性要求。最终 15 个设计方案的对比见表 1。

表 1 试验对比结果

Tab. 1 The result of experiments

试验编号	最小距离	ML_2	最小距离排序号	ML_2 排序号	总排序号
1	1.626 2	0.74	7	3	10
2	1.317	0.77	14	7	21
3	1.672 4	0.77	3	10	13
4	1.379 3	0.78	13	11	24
5	1.713 9	0.75	2	4	6
6	1.757 8	0.73	1	2	3
7	1.661 8	0.75	5	5	10
8	1.611 7	0.73	9	1	10
9	1.288 5	0.77	15	8	23
10	1.513	0.76	12	6	18
11	1.644 1	0.92	6	14	20
12	1.615 4	0.77	8	9	17
13	1.548 7	0.8	11	13	24
14	1.573 7	0.79	10	12	22
15	1.671 3	0.95	4	15	19

由表 1 可知,试验 6 是最好的设计,具有最小距离值相对于其它设计方案最小,次最小的 ML_2 方差值,总排序号最小。试验 6 的试验设计矩阵见表 2。

表 2　11 个变量，33 个水平的近正交试验设计

Tab. 2　The design of experiment of 11variabes with 33 levels

变量 1	变量 2	变量 3	变量 4	变量 5	变量 6	变量 7	变量 8	变量 9	变量 10	变量 11
33	4	15	16	7	29	23	21	33	20	23
30	33	5	11	13	16	15	7	30	28	25
29	15	30	2	6	2	32	20	11	13	24
19	29	33	3	14	31	4	6	15	8	27
31	2	16	19	8	23	5	24	2	23	14
32	31	11	29	10	15	18	8	2	25	6
23	16	32	30	9	1	1	22	29	10	13
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
8	10	12	20	3	9	28	2	26	15	18
14	28	27	8	15	14	24	29	22	33	2
6	14	21	10	5	28	8	15	25	29	3
13	27	6	9	4	21	22	33	10	4	12
7	13	14	12	1	7	9	4	7	16	15

8 - 10 个变量的设计如下，考虑上面所设计的 11 个变量的近正交试验，选取所有可能的 8 - 10 的组合，计算其平均最小距离和 ML_2 方差，选取最小值的方案，见表 3。

表 3　8 - 10 个变量的设计

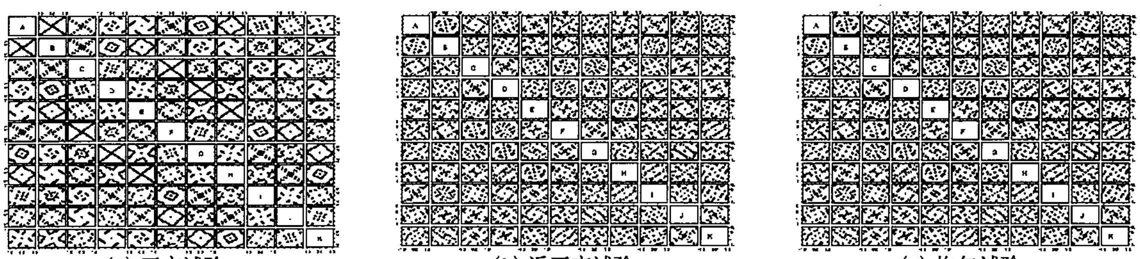
Tab. 3　Design of 8 - 10 variables

变量数目	删除的列	最大相关系数	条件数	最小距离	ML_2 方差
10	1	0.023 4	1.112	1.704 78	0.412 687
9	8,10	0.023 4	1.1	1.051 167	0.229 329
8	1,2,10	0.023 4	1.089	1.425 22	0.124 826

4　试验结果对比分析

4.1　填充空间特性对比

如上所示，设计 1 000 个 11 个变量的拉丁超立方体试验，每个变量 33 个水平，1 000 个拉丁超立方体的平均相关系数为 0.401 5，平均条件数为 8.315，平均最小距离为 1.105，平局 ML_2 方差为 0.811 7，由此可见近正交试验优于拉丁超立方体试验。图 1(a) 显示了正交试验的充满空间性质，图 1(b) 显示了试验的近正交试验设计充满空间性质，图 1(c) 显示了试验的均匀试验设计充满空间性质。



(a) 正交试验　　(b) 近正交试验　　(c) 均匀试验

图 1　试验设计填充空间特性对比

Fig. 1　Space - filling of experimental design

由填充空间性质的二维投影图可知，近正交试验设计的填充空间性质优于拉丁超立方体试验设计，逊色于均匀试验设计。

4.2　正交性对比

对设计变量个数为 11，变量水平数为 33 的均匀试验、正交试验、近正交试验的条件数、最小距离、和 ML_2 方差进行计算，见表 4。

表 4　正交性对比

Tab. 4　Comparision of orthogonality

试验方法	变量个数	变量水平数	最大相关系数	条件数	最小距离	ML_2 方差
均匀试验设计	11	33	0.033	1.11	0.144 309	1.610 51
正交试验设计	11	33	0	1	0.151 854	1.479 02
近正交试验设计	11	33	0.023 4	1.123	1.757 8	0.73

对比分析可知,近正交试验具备近正交性且具有良好的填充空间性质。更适合计算机试验仿真设计。

5 结束语

本文应用正交性和填充空间的多重度量方法,结合正交试验设计和均匀试验设计提出了一个近正交试验方法,应用该方法设计的近正交试验具有良好的近正交性和填充空间性质。应用近正交试验设计方法设计了 11 个变量 33 个水平的近正交试验,与正交试验和均匀试验进行了对比分析,验证了近正交试验设计的填充空间性质比正交试验设计好,正交性比均匀试验好。该方法可以用于多变量的试验设计。

参考文献:

[1] Fan J, Li R. Variable Selection via Nonconcave Penalized Likelihood and Its Oracle Properties[J]. Amer Statist Assoc, 2001, 96:1348 - 1360.

[2] Fang K. The Uniform Design: Application of Number - theoretic Methods in Experimental Design[J]. Acta Math Appl Sinica, 1980,3:363 - 372.

[3] Iman R L, Conover W J. Small Sample Sensitivity Analysis Techniques for Computer Models, with An Application to Risk Assessment[J]. The American Statistician Communications in Statistics:Theory and Methods, 1980,9(17):1749 - 1845.

[4] Conover W J. Practical Nonparametric Statistics[M]. New York: John Wiley and Sons Inc,1999.

[5] Owen A B. Controlling Correlations in Latin Hypercube Samples[J]. The American Statistician Journal of the American Statistical Association:Theory and Methods, 1994,23(10):1517 - 1522.

[6] Owen A B. Latin Supercube Sampling for Very High - dimensional Simulations[J]. ACM:Transactions on Modeling and Computer Simulation, 1998,8:71 - 102.

[7] Golub G H,Van Loan C F. Matrix Computations, Maryland[M]. New York:The John Hopkins University Press, 1983.

[8] Fang K T,Wang Y. Number - theoretic Methods in Statistics[M]. London:Chapman and Hall,1994.

[9] Ye K Q. Orthogonal Column Latin Hypercubes and Their Application in Computer Experiments[J]. The American Statistician Journal of the American Statistical Association: Theory and Methods, 1998,27(11):1430 - 1439.

[10] Cioppa Thomas M. Efficient Nearly Orthogonal and Space - filling Experimental Designs for High - dimensional Complex Models[D]. Monterey:Naval Postgraduate School Operations Research Department,2002.

(编辑:田新华)

A Method of Nearly Orthogonal Experimental Design

ZHOU Xiao - guang, LI Wei - min, CHEN Gang, HUANG Ren - quan

(Missile Institute, Air force Engineering University , San Yuan 713800, Shaanxi, China)

Abstract:To improve on the ability to efficiently explore and approximate large subspaces of the multidimensional input variable models, find out the orthogonal and uniform combining point in experimental design, reduce the complexity of the experimental design algorithm, this research develops a new set of experimental designs for metamodeling. The traditional experimental designs are of orthogonal experimental design and uniform design, but the orthogonal experimental design has poor space - filling and the uniform design has a big correlation. The paper combines orthogonal Latin hypercube and uniform designs to create the designs with near orthogonality and excellent space - filling properties based on multiple measures. By using the method the nearly orthogonal experiment with eight to eleven variables is designed, each of which has thirty - three levels, to testify the nearly orthogonal experimental design. Through comparison and analysis, the results show that the nearly orthogonal experiment designed by this method has near orthogonality and excellent space - filling properties. So this method is feasible and of significance in improving the effect of computer experiments

Key words:orthogonal experimental design; uniform design; nearly orthogonal experimental design