

均匀设计——一种试验设计方法

Uniform Design—A Method for Experimental Design

王 元

(中国科学院数学研究所, 研究员, 中国科学院院士 北京 100080)

编者按 本文是王元院士应本刊之约所写的专稿。考虑到广大非数学专家学者阅读的方便, 作者采用了非严格专业式的表述方法, 希望能引起各界读者的兴趣。

王元院士是中外著名的数学家。他与方开泰教授合作研究的“均匀设计”这一创新性、突破性成果是 1981 年正式发表的。十几年来, “均匀设计”法已逐步在我国许多生产、实验领域获得了有效的应用, 产生了很大的经济、技术效益, 并获得了国际数学界的高度评价和重视。

这次发表这篇专稿, 是希望“均匀设计”这一我国独创的有巨大应用潜力的科学方法, 能在科技界、实业界引起更广泛的关注和了解, 进而能突破目前应用上的自发状态, 使之成为在各行各业中广为知晓、广为应用的方法, 在我国科研和生产的更多领域中日益发挥其重要作用。

在科学实验与工农业生产中, 经常要做实验。如何安排实验, 使实验次数尽量少, 而又能达到好的试验效果呢? 这是经常会碰到的问题。解决这个问题有一门专门的学问, 叫做“试验设计”。试验设计得好, 会事半功倍, 反之就要事倍功半了。

例如假定某化学产品的质量依赖于三个因素, 即温度(A)、反应时间(B)与苏打浓度(C)。这三个因素各取值如下:

温度(A): 80°C, 85°C, 90°C

时间(B): 90 分, 120 分, 150 分

苏打浓度(C): 5%, 6%, 7%

我们将各因素的不同值分别记为 $A_1, A_2, A_3, \dots, C_2, C_3$, 其中 A_1, A_2, A_3 称为因素 A 的水平, 其他依次类推。

试验设计的目的在于研究各因素间的影响及找出最佳的水平组合。一个好的试验设计既要能尽量减少试验次数, 又要能获得最多的信息量。我们先介绍一下传统的方法:

1. 考虑各因素水平间的所有组合

以上面的例子来说, 水平间的所有组合数为 $3 \times 3 \times 3 = 27$, 所有这 27 个试验都做之后, 当然可以找到最佳组合。但若试验太昂贵或试验周期太长, 则会由于所需试验次数太多而无法进行。若在这个

例子中每个因素的水平个数为 10, 则试验次数就是 $10^3 = 1000$, 太多了。

2. 单因素试验

即只对一个因素进行实验, 而将其他因素都固定。采用这个方法必须假定各因素间没有交互作用。60 年代开始, 华罗庚在我国倡导与普及的“优选法”, 即国外的斐波那契法或黄金分割法, 就是单因素的最佳调试法。在实际问题中, 各有关因素均相互独立的情况是极少的, 所以在使用优选法时需首先抓住“主要矛盾”, 即根据经验突出一个最主要的因素进行试验, 而将其他因素都固定住。因此“优选法”还不是一个很精确的近似方法。

3. 正交设计

这是统计学中历史悠久且普遍使用的多因素试验设计方法, 其理论基础是正交拉丁方理论与群论。如果有 s 个因素, 每个因素的水平数为 q , 则正交设计的试验次数的数量级为 q^2 , 记为 $O(q^2)$ 。这当然比因素的所有水平组合 q^s 低多了。正交设计的另一优点为可以按照表格来安排试验, 使用很方便。我们用 $L_n(q^t)$ 来表示一张正交表, 其中 L 表示正交设计, n 表示试验次数, q 表示每个因素的水平个数, t 表示独立因素的最大个数。以前面的例子来说, 我们可以用正交表 $L_9(3^3)$ 来安排实验, 共做 9 次

试验即可。

表 1 $L_9(3^4)$

因素 试验号	1	2	3	4
1	1	1	1	1
2	1	2	2	2
3	1	3	3	3
4	2	1	2	3
5	2	2	3	1
6	2	3	1	2
7	3	1	3	2
8	3	2	1	3
9	3	3	2	1

我们用表 1 的前 3 列,分别表示因素 A、B、C,各列中的 1、2、3 分别表示各因素的各水平,于是得表 2。

表 2 正交设计

水平 试验号	A	B	C
1	80℃	90 分	5%
2	80℃	120 分	6%
3	80℃	150 分	7%
4	85℃	90 分	6%
5	85℃	120 分	7%
6	85℃	150 分	5%
7	90℃	90 分	7%
8	90℃	120 分	5%
9	90℃	150 分	6%

于是我们就可以按照表 2 来做 9 次实验了。由表 1(或表 2)立即看出:每个因素的每个水平均重复 3 次,这称为**均衡性**;任何两个因素的所有水平组合出现的次数均相同,这称为**正规性**。

正交设计的优点为:

(1)有一套表格,便于多因素试验的设计与数据分析。

(2)由于有正交性,易于分析出每个因素的主效应,特别当每个因素均有两个水平时,还可以分析出因素间的交互效应。

(3)若将试验区域映为超单位立方体,将试验点对应于等距有理格子点,则正交设计的试验点在试验区域中散布均匀且整齐可比。

但对于某些工业试验与昂贵的科学实验来说,正交设计的试验次数仍嫌太多,而难于安排,这就需要我们寻求新的试验设计方法。

均匀设计就是这样一种方法,其试验次数比正交设计的试验次数明显地减少了。它属于近 30 年来发展起来的**伪蒙特卡罗方法**的范畴。将经典的确定的单变量问题的计算方法推广应用于多变量问

题的计算时,计算量往往跟变量个数有关。即使电脑再进步很多,这种方法仍无法实际应用。乌拉姆(S. Ulam)与冯·诺依曼(J. von Neumann)在 40 年代提出**蒙特卡罗方法**,即**统计模拟方法**。这个方法的大意是将一个分析问题化为一个有同样解答的概率问题,然后用统计模拟的方法来处理后面这个问题。这就使一些困难的分析问题反而得到了解决,例如多重定积分的近似计算。蒙特卡罗方法的关键是找一组随机数作为统计模拟之用,所以这一方法的精度在于随机数的均匀性与独立性。

50 年代末,有些数学家试图用确定性方法寻找空间中均匀散布的点集来代替蒙特卡罗方法中的随机数。已经找到的点集都是用数论方法找到的。按照韦尔(H. Weyl)定义的测度来度量,它们的均匀性很好,但独立性差些。用这些点集来代替蒙特卡罗方法中的随机数,往往会得到更精确的结果。这一方法称为**伪蒙特卡罗方法**或**数论方法**。数学家首先将这一方法成功地用于多重积分近似计算。

数论方法得到的点集称为**伪随机数**。从统计学的观点看,伪随机数就是一个均匀分布的样本。我们注意到虽然正交设计的试验点在试验区域内散布得相当均匀,但还不是非常均匀。我们可以用数论方法找到一些散布得更均匀的点集,利用这些点集来安排实验。试验结果应该既有代表性,又能减少试验次数。可以证明,在具有同样均匀性的前提下,正交设计与均匀设计所需的试验次数的量级分别是: $O(q^2)$ 与 $O(q \log q)$ 。显然后者比前者大为减小了。对于固定的 q ,我们也可以具体算出均匀设计比正交设计所需的试验次数减少了很多。

均匀设计也像正交设计一样,有一套表格,对于实际使用者来说,跟使用正交设计一样,只要查表就可以了。我们用 $U_n(q^t)$ 表示均匀设计表,其中 U 表示均匀设计, n 表示试验次数, q 表示每个因素的水平个数, t 表示最大的独立因素个数。

例如药学工业的阿魏酸的合成工艺,是一个 3 因素问题:

A(原料配比):1.0,1.4,1.8,2.2,2.6,3.0,3.4

B(吡啶量): 10,13,16,19,22,25,28

C(反应时间):0.5,1.0,1.5,2.0,2.5,3.0,3.5

3 因素各有 7 个水平的试验,我们采用均匀设计表 $U_7(7^3)$ 来做试验,见表 3。

表 3 $U_7(7^3)$

因素 试验号	A	B	C
1	1	2	3
2	2	4	6
3	3	6	2
4	4	1	5
5	5	3	1
6	6	5	4
7	7	7	7

表 3 中各列中的数字分别表示该因素的水平数。于是由表 3 即得试验方案,见表 4。

表 4 均匀设计

因素 试验号	A	B	C
1	1.0	13	1.5
2	1.4	19	3.0
3	1.8	25	1.0
4	2.2	10	2.5
5	2.6	16	0.5
6	3.0	22	2.0
7	3.4	28	3.5

若考虑因素的所有水平组合,则共需做 $7^3 = 343$ 次实验。若用正交设计,则需做 $7^2 = 49$ 次实验。均匀设计只需做 7 次实验即可。

关于数据处理问题。若用正交设计,除非每个因素只有两个水平,一般很难用方差分析方法分析出交互作用。若用回归分析来处理数据,则可以表格化进行。对于均匀设计,用回归分析处理数据的计算量比正交设计大些。但若有一台微机及相应的软件,则数据分析仍然是易于进行的。

均匀设计也可以处理各因素有不同的水平数的实验安排问题,我们也有均匀设计表,可以按照表格来安排实验。

均匀设计还可以处理某些带约束条件的试验设计问题,例如混料试验设计问题。即假定有 t 个因素 $A_i (1 \leq i \leq t)$, 每个因素有 q 个水平:

$$(A_i) \quad a_{ij} (1 \leq j \leq q)$$

要求每个实验:

$$(a_{i1}, \dots, a_{it})$$

满足:

$$a_{i1} + \dots + a_{it} = 1$$

这相当于在单纯形

$$T = \{(x_1, x_2, \dots, x_t); x_i \geq 0 (1 \leq i \leq t), x_1 + \dots + x_t = 1\}$$

上找一个均匀散布的集合。我们也有混料均匀设计表格可供使用。

均匀设计产生于 70 年代末。由于某军工实验要求有一个试验少的试验方案,而正交设计所需的试验次数太多,这就导致了方开泰与我的合作。我们用数论方法来研究这个问题,借鉴了“近似分析中的数论方法”这一领域中的成果。该领域在国际上是 50 年代末开始研究的。我国在华罗庚的领导下,也在 50 年代末就开始了这方面的研究,所以起步较早,对这一领域的情况熟悉。若无基础理论研究的积累与素养,作出均匀设计这样的工作是不可能的。另一方面,熟悉实际工作的数学家方开泰能提出问题,当然是产生均匀设计的前提。这就提供了一个例子,即问题来源于实际,同时又由于有基础理论的积累与研究,才导致问题的解决。我们认为,作为长远起作用的基础理论研究,即使从应用与开发的角度上讲,其作用也是不容忽视的。

均匀设计只是数论方法的一个应用。数论方法还有广泛应用的园地,例如多重插值公式的建立;某些积分方程与微分方程的近似求解;求函数的整体极值;求某些多元分布的近似代表点;用于统计推断的一些问题,如多元正态性检验及多元球性检验。

近 15 年来,均匀设计已在我国的军工科技、纺织工业、制药工业、化学工业等方面有了不少应用,取得了一些经济效益与社会效益,在国外亦受到重视。当然,任何一个应用数学方法也不是万能的,不会没有缺点的,均匀设计也是一样,还需要在实际应用中加以鉴定与完善。(责任编辑 王宏章)

(上接第 62 页)

有关专家共同研讨企业灾害风险评估和控制技术,制定危险源评估方法标准、分级标准和控制规程,为劳动部和行业主管部门指导企业危险源评估和防灾减灾提供技术决策咨询。

3. 国家和大型企业建立适当的防灾减灾基金,增加投入,从“软件”(如防灾减灾教育、规章制度)和“硬件”上(如防灾减灾设备、设施等)采取实际措

施。同时,进一步加强保险在防灾减灾中的作用。保险公司除了损失赔偿外,还应把业务扩展到企业风险评估和防灾防损上。

4. 积极参与有关国际交流与合作,学习和借鉴西方国家在重大危险源评估、控制和防灾减灾方面成功的做法和经验。(责任编辑 肖庆山)