

文章编号: 1001-2486(2011)05-0073-05

优化拉丁方试验设计方法及其应用*

刘晓路, 陈英武, 荆显荣, 陈盈果

(国防科技大学 信息系统与管理学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 计算机仿真是复杂系统优化的一种有效手段, 但需要耗费大量机时, 必须严格限制仿真次数。针对此提出了优化拉丁方试验设计方法, 该方法需要较少的仿真次数, 且兼顾方案的正交性和均匀性, 采用 Cholesky 分解生成初始解, 通过模拟退火算法对拉丁方矩阵进行优化, 定义动态权重因子实现正交性与均匀性的权衡。最后构建了一个实例, 通过试验结果证明采用优化拉丁方试验设计方法可以生成具有较好性质的仿真方案, 且仿真次数少。

关键词: 计算机仿真; 优化拉丁方试验设计; 正交性; 均匀性

中图分类号: O212.6 **文献标识码:** A

Optimized Latin Hypercube Sampling Method and Its Application

LIU Xiao-lu, CHEN Ying-wu, JING Xian-rong, CHEN Ying-guo

(College of Information System and Management, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Computer simulation is effective for the optimization of complex system. However, it is time-consuming. Therefore, the number of simulations must be strictly confined. To generate a good simulation plan, an optimized Latin hypercube sampling method is put forward. The method can not only reduce the number of simulations, but also ensure the generated plan of good orthogonality and proportional spacing. Cholesky decomposition was borrowed to generate initial solution, and simulated annealing algorithm was used to get optimized array. Also a dynamic weight parameter was defined to balance different optimization objectives. Finally, an example was constructed. The result shows that the optimized Latin hypercube sampling method can generate a sound simulation plan with less simulation.

Key words: computer simulation; optimized latin hypercube sampling; orthogonality; uniform spacing

通过人为控制的试验来研究事物探索其发展规律, 这是广泛应用于科学研究的一个重要手段。由于安全、成本、时间以及资源的限制, 很多时候物理试验并不可行, 于是就用计算机试验代替物理试验, 计算机仿真正越来越多地用到生产制造和产品优化中。随着设计参数和约束的增加, 系统的仿真模型变得非常复杂, 单次仿真需要耗费大量时间, 尤其那些高维非线性的“黑箱”系统, 时间成为制约仿真优化的瓶颈因素, 在制定仿真方案时必须严格限制仿真次数; 但从仿真精度上讲, 则要求仿真次数尽可能多, 因此存在仿真时间和仿真精度间的冲突。为了解决这种冲突, 需要合理安排仿真试验。试验设计正是这样的一种方法, 优秀的试验设计能有效降低试验次数, 缓解仿真计算的压力。

试验设计是数理统计学的应用方法之一, 它

的主要内容是讨论如何合理地安排试验、取得数据, 然后进行综合的科学分析, 从而达到尽快获得最优方案的目的。本文在对比和分析国内外研究的基础上, 针对仿真优化中存在的仿真时间和仿真精度之间的冲突, 提出了优化拉丁方试验设计方法, 该方法保证仿真点均匀地散布在整个设计空间, 同时考虑了仿真点间的正交性, 使仿真方案具有较好的典型性和代表性。本文首先构建了拉丁方试验设计的评价体系, 然后详细阐述了优化拉丁方试验设计方法, 最后通过实例证明了该方法的有效性以及其在正交性和稳定性上的优势。

1 拉丁方试验设计的评价体系

拉丁方试验设计(Latin Hypercube Sampling, LHS)^[1]自1979年被提出以来, 一直是“充满空间”设计领域的重要方法, 也是当前应用比较广

* 收稿日期: 2011-03-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(71071156, 70801062)

作者简介: 刘晓路(1985—), 女, 博士生。

泛的方法。本文首先建立了拉丁方矩阵的评价体系,涵盖了拉丁方试验设计的均匀性和正交性两个方面。

1.1 拉丁方矩阵均匀性的描述

均匀性用以保证试验点在因子空间中的均匀分散性,确保试验因子的每个水平在试验空间中都出现,且仅出现相等次数。本文定义了两个均匀性准则:极大极小距离 φ_p , 中心化偏差 CL_2 。

(1) 极大极小距离准则 φ_p

所谓极大极小准则就是最大化试验点间的最小距离, $d(x_i, x_j)$ 为两个样本点之间的距离, 定义为: $d(x_i, x_j) = d_{ij} = [\sum_{k=1}^m |x_{ik} - x_{jk}|^t]^{1/t}$, 其中 $t = 1$ 或 2 。对给定的试验设计方案, 计算任意两个试验点之间的距离 $d_{ij} (1 \leq i, j \leq n, i \neq j)$, 将这些距离进行排序, 得到距离函数取值列表 (d_1, d_2, \dots, d_t) 和对应的索引表 (J_1, J_2, \dots, J_t) , d_i 表示不同的距离值, 而 J_i 是距离满足 d_i 的点对的个数, s 为不同值的个数, φ_p 准则变为^[2]: $\varphi_p = \min[\sum_{i=1}^s J_i d_i^{-p}]^{1/p}$, 其中 p 是一个正整数。

(2) 中心化偏差准则 CL_2

为度量试验点分布的均匀性, 引入偏差。令 $x = (x_1, \dots, x_s)' \in C^s, [0, x] = [0, x_1] \times \dots \times [0, x_s]$ 为 C^s 中由原点 0 和 x 决定的矩形, 令 $N(P_n, [0, x])$ 为 P_n 中的点落入到 $[0, x]$ 中的个数, 当 P_n 中的点在 C^s 中散布均匀时, $N(P_n, [0, x])/n$ 应与 $[0, x]$ 的体积 x_1, \dots, x_s 接近, 将两者的差定义为 $D(x) = |N(P_n, ([0, x])/n - Vol([0, x])|$, 称之为点集 P_n 在点 x 的偏差。为提高偏差计算的时效性, 采用中心化偏差 CL_2 ^[3], 具体如式(1)所示, 其中 x_{ij} 为归一化后试验设计矩阵中试验点的取值。

$$CL_2(X)^2 = \left(\frac{13}{12}\right)^k - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{k=1}^m \left(1 + \frac{1}{2} |x_{ik} - 0.5| - \frac{1}{2} |x_{ik} - 0.5|^2\right) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{k=1}^m \left(1 + \frac{1}{2} |x_{ik} - 0.5| + \frac{1}{2} |x_{jk} - 0.5| - \frac{1}{2} |x_{ik} - x_{jk}|\right) \quad (1)$$

1.2 拉丁方矩阵正交性的描述

正交性用以保证从全面试验中选出的点的整齐性, 即要求任一因素的诸水平作相同数目的试验, 任意两个因素的水平组合作相同数目的试验。为描述拉丁方矩阵的正交性, 本文定义了最大列相关系数和矩阵奇异值分解的条件数两个准则。

(1) 最大列相关系数 ρ_{\max}

根据 Tang^[4] 的研究发现, 基于矩阵列相关性的设计是一个获取非正交性的重要方式, Cippa^[5] 采用最大化拉丁方矩阵列的绝对两两相关性得到正交拉丁方和近正交拉丁方, 我们用列相关性来区别不同设计方式。矩阵列相关性的计算比较简单, 对矩阵 X 的列 X^i, X^j 而言, 其列相关性可记为

$$\rho_{ij} = \frac{\sum_{b=1}^n [(x_b^i - \bar{x}^i)(x_b^j - \bar{x}^j)]}{\sqrt{\sum_{b=1}^n (x_b^i - \bar{x}^i)^2 \sum_{b=1}^n (x_b^j - \bar{x}^j)^2}} \quad (2)$$

最大绝对列相关系数 ρ_{\max} 给出了最极端的两两相关性, 可以用来描述拉丁方矩阵的非正交性, 通过最小化 ρ_{\max} 就可以控制其它的两两相关性, 其中 $\rho_{\max} = \max_{i \neq j} \{|\rho_{ij}|\}$, 简称为最大列相关系数。

(2) 矩阵奇异值分解的条件数

Jin 和 Alejandro 用矩阵的条件数^[6-7] 来描述拉丁方矩阵的正交性, 且取得了很好的效果。矩阵奇异值分解的条件数是线性代数中用以描述线性方程 $Ax = b$ 的解对 b 中的误差或不确定性的敏感程度, 简称条件数, 定义为: $Cond(A) = k = \|A^{-1}\| \cdot \|A\|$, 其中 $\|A\|$ 为矩阵范数, 且 $Cond(A) \geq 1$ 。正交矩阵的条件数为 1 , 奇异矩阵的条件数为 ∞ , 因此矩阵的条件数越大矩阵的正交性越差。

上述 4 个准则共同构成了本文 LHS 矩阵的评价体系, 它们可以从均匀性和正交性两个方面共同保证仿真方案取点的合理性和科学性。

2 优化拉丁方试验设计方法

拉丁方试验设计将因素按水平竖排成一个随机矩阵, 即拉丁方矩阵, 在同一列中任何因素的水平均无重复。针对随机抽样的不稳定性, 出现了: 中心化 LHS、对称 LHS、列正交 LHS 以及最优 LHS 等改进, 它们都是就其中某一测度进行的改进。优化拉丁方试验设计方法采用正交性较好的初始解, 优化时综合考虑拉丁方矩阵的正交性和均匀性, 包括初始解构造和拉丁方矩阵的优化两个步骤。

2.1 初始解的构造

假设一个 k 因素 n 水平的拉丁方试验设计, 如果采用 $n \times k$ 的随机拉丁方 R_k^n , 则矩阵的每一列都是 $1 \cdots n$ 的排列, 共 k 列, 因此 R_k^n 可能的形式共有 $C_{n,1}^k$ 随机拉丁方矩阵正交性很差, 作者随机生成了 100 个 20×6 的矩阵, 超过 70% 矩阵的最大

列相关系数 $\rho_{\max} > 0.5$, 这不但加重了优化算法的负担, 也使优化结果的随机性变大。因此, 应该采用较好的初始解, 关键就是要降低矩阵的列相关性。

对随机拉丁方矩阵 R , 计算其任意两列 R_i, R_j 的相关系数 T_{ij} , 构建列相关系数矩阵 T (采用

Spearman 系数), 其中: $T_{ij} = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n (R_i^i - R_j^i)^2}{n(n^2 - 1)}$ 。对

矩阵 T 而言, 所有元素 $0 \leq T_{ij} \leq 1$, 且 $T_{ij} = T_{ji}$, T 是正定对称矩阵, 因此可以对其进行 Cholesky 分解^[8]。即需要寻找变换矩阵 S' , 使得 $STS' = I$, 其中 $S = Q^{-1}$ 且 $T = QQ'$ 。

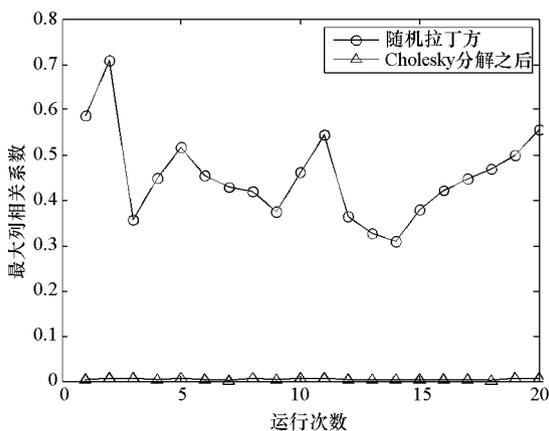


图 1 Cholesky 分解对 RLH 矩阵正交性的改进
Fig. 1 Improvement of orthogonality of RLH

根据 Cholesky 方法: T 是正定的, 因此存在下三角矩阵 L , 使 $T = LDL'$, 其中 D 是一个元素均为正数的对角矩阵, 存在 $L_1 = LD^{1/2}$, 且 $L_1L_1' = T$, 因此 $Q = L_1, S = Q^{-1} = L_1^{-1} = (LD^{1/2})^{-1}$, 所以过渡矩阵可记为: $S' = ((LD^{1/2})^{-1})'$ 。得到变换矩阵 S' , $R_{new} = RS'$, 将矩阵 R_{new} 每列的元素用元素对应的水平序列数代替, 得到新拉丁方矩阵 R' , 计算 R' 最大列相关系数, 若不满足需求, 对 R' 重复进行 Cholesky 分解, 直至满足需求或不能得到新的矩阵 R_{tran} 为止, 最终得到正交性较好的 R_{LHD} , 以此作为优化拉丁方试验设计方法的初始解。

本文以 20×6 的拉丁方矩阵为例, 随机生成 20 个 RLH, 然后用上述方法对其进行优化, 分析结果发现: 一般矩阵经过 4 ~ 5 次分解即可实现, 且运算效率很高, 平均耗时为 0.0504s。如图 1 所示, R_k^n 经过 Cholesky 分解后正交性得到明显改善, 最大列相关系数显著降低, 且稳定性较好 (方差较小)。

2.2 拉丁方矩阵的优化

经过 Cholesky 分解后的随机拉丁方矩阵具有

较好的正交性, ESE^[6] 算法生成的 E_k^n 具有较好的均匀性。Liu^[9] 在 ESE 算法基础上, 以固定权重因子考虑了正交性和均匀性, 实现了多目标优化。本文的优化拉丁方试验设计方法在 Liu 的算法基础上做了进一步的改进: 采用 Cholesky 分解生成的 F_k^n 代替随机拉丁方作为算法的初始解, 改变了算法的权重设置方式, 原文中 $w = 0.5$, 本文将采用动态权重因子 w , 可以根据需要对其进行调整而使拉丁方矩阵在正交性或均匀性上有所偏重。

优化拉丁方试验设计方法是在模拟退火算法 (Simulated Annealing, SA) 基础上实现的, 而 SA 对初始解非常敏感, 通过 Cholesky 分解后的 F_k^n 具有很好的正交性, 以其作为初始解可以保证解的正交性 ρ , 但均匀性 φ 却无从保证。因此, 在初始迭代过程中应该给予 φ 更高的权重, 使矩阵的均匀性迅速得以改善, 随着算法不断迭代, φ 的权重逐渐降低, 而 ρ 的权重逐渐增加, 保证矩阵的正交性不退化。定义权重因子: $w = 1 - n/2N + \Delta$, 其中 N 为算法的总迭代次数, n 为算法运行时的当前迭代次数, Δ 为一个 $[-0.5, 0.5]$ 间的可调整常量, 用以控制优化过程中对正交性或均匀性的偏好, 一般取 $\Delta = 0$, 即认为二者同样重要。但对于某些非线性系统, 正交性更重要些, 则 Δ 可以取一个适当的负值, 反之取正值。相比 $w = 0.5$ 的固定权重因子, 这种动态权重因子可以加速算法的收敛, 算法的具体步骤如下述伪码所示。

随机选择一个初始拉丁方 LHD_{ini} , 对 LHD_{ini} 进行 Cholesky 分解, 得到正交性较好的拉丁方矩阵 LHD_{ort} , 并以 LHD_{ort} 作为算法的初始解; 初始化权重因子 $w = 1 - n/2N + \Delta$, 定义优化准则 $\min(\Psi), \Psi = (1 - w)\rho + w\varphi$, 并定义邻域拉丁方 LHD_{nei} 和优化拉丁方 LHD_{best} , 及其优化准则 Ψ_{nei}, Ψ_{best} ; 计算初始解的优化准则 Ψ_{ini} , 且 $LHD_{best} = LHD_{ort}, LHD_{cur} = LHD_{ort}, n = 0, N = 200$ 。

REPEAT

通过列变换生成当前拉丁方 LHD_{cur} 的邻域拉丁方 LHD_{nei} , 计算 LHD_{nei} 对应的优化准则值 Ψ_{nei}

IF $\Psi_{nei} \geq \Psi_{cur}$

$LHD_{cur} = LHD_{nei}$

IF $\Psi_{cur} \geq \Psi_{best}$

$LHD_{best} = LHD_{cur}$

ELSE 根据当前退火温度和优化准则的差异以一定概率接受邻域拉丁方

$LHD_{cur} = LHD_{nei}$

END

改变当前退火温度, $n++$

UNTIL 终止条件满足

3 仿真实例与结果分析

三维机械零部件的形状优化是集成制造中经常遇到的问题,本文以 CD6140A 型卧式车床的床身三角形导轨(以下简称导轨)为例,采用优化拉

丁方试验设计方法为其生成仿真方案。导轨结构的实体模型共 158 个尺寸约束,其中有 6 个尺寸为制约模型的全局变量并用作形状优化的设计变量^[10],具体参数及其初始值和上下限定义如表 1 所示。

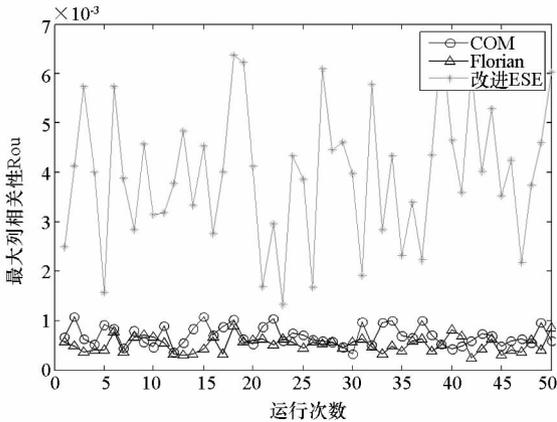
表 1 仿真参数及其取值范围

Tab. 1 Simulation parameters and their ranges

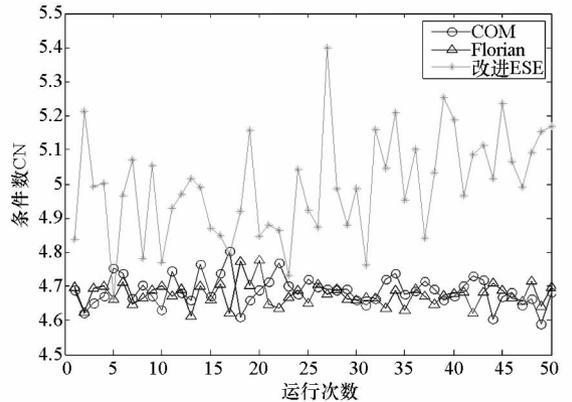
参数名称	厚度 01	厚度 02	深度 01	高度 01	高度 02	厚度 03
初始值(mm)	19.0	20.0	20.0	80.0	198.0	13.0
上限(mm)	19.0	20.0	30.0	80.0	198.0	13.0
下限(mm)	11.0	11.0	15.0	40.0	170.0	11.0

为使拉丁方矩阵具有较好的正交性,要求其最大列相关系数 $\rho_{max} < 0.05$,优化拉丁方试验设计需要至少 13 次试验($n \geq 13$,通过多次试验证明),而 Ye 的正交拉丁方试验设计需要至少 17 次试验^[11],如果采用正交试验设计,其试验次数将随因素取值水平的变化而变化,设每个因素的取值水平为 n ,则需要的试验次数的最小值为

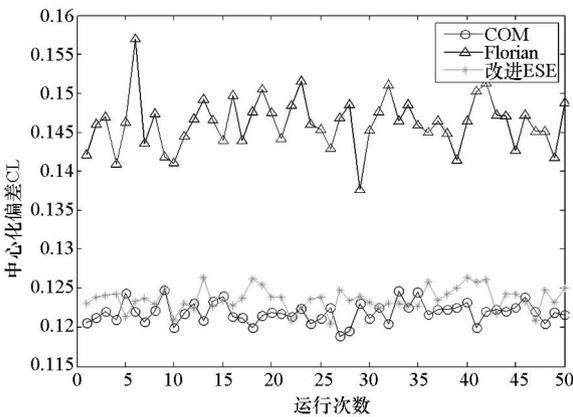
$6(n-1)+1$,当 $n=6$ 时,至少需要 31 次试验, $n=13$ 时则至少需要 73 次试验^[3]。若采用均匀设计,所需要的试验次数会较少,一般等于因素的水平数,但试验方案的正交性无法保证,因此优化拉丁方试验设计在试验次数控制上具有明显的优势。



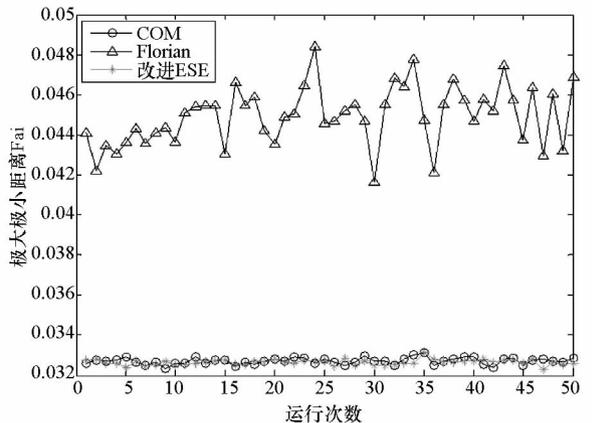
(a) 三种方法的最大列相关性对比



(b) 三种方法的条件数对比



(c) 三种方法的中心化偏差对比



(d) 三种方法的 Fai 准则对比

图 2 三种方法的对比分析

Fig. 2 Compare of three different methods

在算法的执行过程中根据参数的取值情况和

优化精度要求,将每个参数划分为 20 个取值水

平,即需要构建6因素20水平的试验方案。采用优化拉丁方试验设计生成一个 20×6 的拉丁方矩阵,表示该部件的计算机仿真方案,并且分别利用上述4个准则对生成的方案进行了评价。为便于分析,本文还采用Florian方法^[8]、改进ESE算法生成仿真方案,并对方案进行了评价,3种方法各运行50次,计算结果如图2所示,其中COM为本文算法。

通过(a)图和(b)图可以发现COM方法得到的矩阵 C_k^n 具有较好的正交性。 C_k^n 的列相关性和条件数都明显优于改进ESE方法,但基本与Florian方法所得到的结果一致,而且条件数还略优于Florian方法,说明在优化过程中正交性并没有损失。这是因为根据优化准则 $\Psi = (1 - w)\rho + w\varphi$,SA算法在优化过程中向着 $\min(\Psi)$ 的方向迭代, ρ 的初始值及初始权重 $1 - w$ 都比较小,因此在迭代过程中为减小 Ψ 算法将着力减小 φ ,保持 ρ 。

而通过(c)图和(d)图可以发现, C_k^n 取点的均匀性较之Florian方法和改进ESE方法都好,尤其相比改进ESE算法,COM方法在LHS矩阵的中心化偏差 CL_2 上有明显改善,说明在均匀性方面也继承了改进ESE算法的优势。另外需要说明的是,Florian方法的计算效率很高,相对于拉丁方矩阵的优化时间,这个时间可以忽略。因此,优化拉丁方试验设计方法的时效性与改进ESE算法基本一致,且解的质量优于ESE方法。

4 结论

本文针对仿真优化中仿真时间与仿真精度的冲突,提出优化拉丁方试验设计方法,该方法生成的仿真方案,在尽可能减少仿真次数的同时还保证仿真点的质量。本文首先构建了拉丁方矩阵的评价体系,包括正交性和均匀性两个方面共4个评价准则,然后详细论述了优化拉丁方试验设计方法。该方法首先通过Cholesky分解获取正交性较好的拉丁方矩阵作为初始解,采用SA算法作为优化主体控制搜索过程,构造了与算法迭代过程相关的动态权重因子,并且通过调整 Δ 因子可

以体现不同设计偏好,保证生成的仿真方案具有较好的正交性和均匀性。最后,通过仿真算例对优化拉丁方试验设计方法进行了检验,试验结果证明本方法可以有效控制试验次数,且仿真方案的综合属性较优。当问题规模变大时,算法的求解效率将降低,这将是本文需要进一步改进的方向。

参考文献:

- [1] McKay M D, Beckman R J, Conover W J. A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code[J]. *Technometrics*, 1979, 21: 239 - 245.
- [2] Morris M D, Mitchell T J. Exploratory Designs for Computational Experiments[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1995, 43 (3): 381 - 402.
- [3] 方开泰, 马长兴. 正交与均匀试验设计[M]. 北京: 科学出版社, 2001.
- [4] Tang B. Orthogonal Array Based Latin Hypercubes [J]. *Journal of the American Statistical Association*, 1993, 88: 1392 - 1397.
- [5] Thomas M C. Efficient Nearly Orthogonal and Space-filling Experimental Designs for High-dimensional Complex Models [D]. *Naval Postgraduate School*, 2002.
- [6] Jin R C, Chen W, Sudjlanto A. An Efficient Algorithm for Constructing Optimal Design of Computer Experiments [J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2005, 134 (1): 268 - 287.
- [7] Alejandro S H. Breaking Barriers to Design Dimensions in Nearly Orthogonal Latin Hypercubes [D]. *Monterey, California: Naval Postgraduate School*, 2008.
- [8] Aleš F. An Efficient Sampling Scheme: Updated Latin Hypercube Sampling[J]. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 1992, 7: 123 - 130.
- [9] 刘新亮, 郭波. 适用于复杂系统仿真试验的试验设计方法[J]. *国防科技大学学报*, 2009, 31 (6): 95 - 99.
- [10] Dai L. An Open Platform of Parameterized Shape Optimization Based on CAD/CAE Integration Technique [D]. *Dalian: Dalian Institute of Technology*, 2008.
- [11] Kenny Q Y. Orthogonal Column Latin Hypercubes and Their Application in Computer Experiments [J]. *Journal of the American Statistical Association —Theory and Method*, 1998, 93: 1430 - 1439.