投影加权对称偏差

献给方开泰教授 80 华诞

赫兰兰, 谢民育, 宁建辉*

华中师范大学数学与统计学学院, 武汉 430079

E-mail: 2272762856@qq.com, myxie@mail.ccnu.edu.cn, jhning@mail.ccnu.edu.cn

收稿日期: 2019-01-09; 接受日期: 2019-03-07; 网络出版日期: 2019-11-28; * 通信作者
国家自然科学基金 (批准号: 11571133 和 11871237) 资助项目

摘要 均匀设计自 20 世纪 80 年代被提出以来依靠其稳健和使用方便、灵活的特性而广受欢迎. 为获得实验目标区域内散布均匀的设计点集, 不同的均匀度量标准被相继提出, 其中以从数值积分理论中发展而来的 L_2 -星偏差及相应的改进形式接受度最为广泛. 尽管相对于最初的星偏差标准, 当前广泛使用的改进偏差有更好的性质和实用性, 但这些偏差仍存在一些缺点, 例如, 中心化偏差 (centered discrepancy, CD) 对于实验目标区域中心点的特殊依赖性. 从各种偏差定义的本源上可以看出, 对称偏差 (symmetric discrepancy, SD) 相较于 CD 有更好的几何性质, SD 给实验目标区域内任何点的权重都是相同的, 这在直观上更符合均匀性的要求. 但受限于投影均匀性差的缺陷, SD 的使用范围十分有限. 本文重新研究对称偏差, 分析出 SD 缺陷的本质, 并采取加权的办法改进其投影均匀性, 提出投影加权对称偏差. 本文同时也研究了新偏差的相关优良性质.

关键词 均匀设计 偏差 投影均匀性

MSC (2010) 主题分类 62K15, 62K99

1 引言

作为一种稳健的空间填充设计, 均匀设计寻求将实验点集

$$\mathcal{P}_n = \{\mathbf{x}_k = (x_{k1}, x_{k2}, \dots, x_{ks}), k = 1, 2, \dots, n\}$$

均匀地散布在目标实验区域 (为方便, 这里假设实验区域为 s 维超立方体 C^s) 中, 以得到最稳定和最大化的实验信息^[1-3]. 为度量点集的均匀性, 不同类型的测度被提出.

考虑 C^s 上非参数模型 $f(\mathbf{x})$ 的期望 $E(f(\mathbf{x}))$ 的估计, 显然, 基于样本点集 $\mathcal{P}_n$ 的样本均值

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(\mathbf{x}_k)$$

英文引用格式: He L L, Xie M Y, Ning J H. Projection weighted symmetric discrepancy (in Chinese). Sci Sin Math, 2020, 50: 629–644, doi: 10.1360/N012019-00014

是一个合理的估计. 著名的 Koksma-Hlawka 不等式

$$\left| E(f(\mathbf{x})) - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(\mathbf{x}_k) \right| \leq V(f) D(\mathcal{P}_n) \quad (1.1)$$

给出了样本均值和总体期望的误差上界. 不等式中 $V(f)$ 为真实模型的全变差^[4], 与采样 (实验点集) 无关. 不等式右边另一项

$$D(\mathcal{P}_n) = \|F_{\mathcal{P}_n}(\mathbf{x}) - F(\mathbf{x})\|_p = \left\{ \int_{C^s} \left| \frac{N(\mathcal{P}_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}])}{n} - \text{Vol}([\mathbf{0}, \mathbf{x}]) \right|^p \right\}^{1/p} \quad (1.2)$$

被称为点集 $\mathcal{P}_n$ 的 L_p -星偏差, 广泛地应用于拟 Monte Carlo 积分领域, 具体介绍可参见文献 [4, 5]. 文献 [6] 给出了 $p = 2$ 时的 L_2 -星偏差的解析计算公式, 解析计算公式大大降低了偏差的计算复杂度, 这也使得偏差的实际应用成为可能. 考虑到计算的复杂度问题和实际应用, 本文只考虑 $p = 2$ 的情形. 直接使用 L_2 -星偏差作为均匀设计均匀性度量准则, 存在几个明显的缺点. 首先, 星偏差只考虑了 $|\frac{N(\mathcal{P}_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}])}{n} - \text{Vol}([\mathbf{0}, \mathbf{x}])|$ 在 s 维空间中的差别, 即星偏差只考虑全空间中的均匀性, 至于点集在低维投影空间的均匀性则被忽视. 而实验设计中著名的效应排序原则^[7] “主效应比交互效应重要; 低阶交互效应比高阶交互效应重要; 同阶交互效应同等重要” 告诉我们, 主效应 (一维空间的均匀性) 和低阶交互效应 (低维投影空间的均匀性) 更为重要. 其次, 星偏差中 $|\frac{N(\mathcal{P}_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}])}{n} - \text{Vol}([\mathbf{0}, \mathbf{x}])|$ 的计算始终围绕原点展开. 这造成了原点在偏差计算中的特殊地位, 这也与均匀设计的本质思想相抵触. 针对这些问题, 几种改进的偏差准则被提出. 文献 [8, 9] 提出了更一般的偏差公式

$$D(\mathcal{P}_n)^2 = \sum_{u \neq \emptyset} \int_{C^u} \left| \frac{N(\mathcal{P}_n, J_{\mathbf{x}_u})}{n} - \text{Vol}(J_{\mathbf{x}_u}) \right|^2 d\mathbf{x}_u, \quad (1.3)$$

或

$$D(\mathcal{P}_n)^2 = \sum_{u \neq \emptyset} \int_{C^u \times C^u} \left| \frac{N(\mathcal{P}_n, J_{\mathbf{x}_u, \mathbf{y}_u})}{n} - \text{Vol}(J_{\mathbf{x}_u, \mathbf{y}_u}) \right|^2 d\mathbf{x}_u d\mathbf{y}_u, \quad (1.4)$$

其中 $u \subseteq S = \{1, 2, \dots, s\}$ 表示 s 维空间的某个投影子空间所对应的坐标轴, C^u 为 u 中坐标轴所对应的 $|u|$ 维超立方体. $\mathcal{P}_n$ 、 $J_{\mathbf{x}_u}$ 和 $J_{\mathbf{x}_u, \mathbf{y}_u}$ 分别为点集 $\mathcal{P}_n$ 、 $J_{\mathbf{x}}$ 和 $J_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}$ 在 C^u 中的投影. $J_{\mathbf{x}}$ 和 $J_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}$ 为事先定义, $J_{\mathbf{x}}$ 由单点 $\mathbf{x}$ 确定, 而 $J_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}$ 为由两点 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 确定的有界区域, 不同的偏差定义由不同的 $J_{\mathbf{x}}$ 或 $J_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}$ 定义方式所决定. 如果选择 $J_{\mathbf{x}} = [\mathbf{0}, \mathbf{x}]$ 和 (1.3), 则新偏差和原星偏差一样都是利用经验分布和均匀分布函数间的差别度量均匀性, 此时新偏差被称为全偏差 (full star discrepancy, FD). 相较原始的星偏差定义, 新的偏差定义 (1.3) 和 (1.4) 多了 $\sum_{u \neq \emptyset}$, 即考虑了设计阵在所有低维投影空间的均匀性. 从这个新的定义出发 (参见文献 [8, 9]) 选择不同的 $J_{\mathbf{x}}$ 或 $J_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}$ 给出了几种新的偏差, 其中中心化偏差 (CD) 和可卷偏差 (wrap-around discrepancy, WD) 的使用最为广泛.

在 CD 的定义中, 不再选择以原点和 $\mathbf{x}$ 构成超矩形 $J_{\mathbf{x}}$, 而是采用距离 $\mathbf{x}$ 最近的 C^s 顶点, 即 $J_{\mathbf{x}} = \bigotimes_{i=1}^s J_{x_i}^{(i)}$, 其中

$$J_{x_i}^{(i)} = \begin{cases} [0, x_i], & x_i \leq \frac{1}{2}, \\ [x_i, 1], & x_i > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (1.5)$$

图 1 展示了 2 维空间中心化偏差 CD 的 $J_{\mathbf{x}}$ 矩形.

图 1 2 维空间 CD 中的矩形 J_x

由于 J_x 的定义不再依赖原点, 因此, 原点在 CD 中的中心化地位被去除. 但同时也引入了另一个特殊点 $(\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})$. WD 在定义时则完全避开了任何顶点, 从立方体 C^s 中取两点 x 和 y 确定一个超矩形 $J_{x,y}$, 再结合 (1.4) 定义. 2 维空间中 $J_{x,y}$ 的定义如图 2 所示. 从图 2 可以看出, WD 类似于将立方体区域卷曲, 并将边界缝合在一起, 形成了一个卷形区域, 此时任何维度上水平值 1 和 0 重合, 水平与水平之间只考虑距离而没有大小顺序之分, 这也是 WD 名称的来源. 这种定义方式给 WD 带来许多好的性质 [9], 但同时也如文献 [10] 所描述, WD 将不能区分设计阵的平移变换, 即对任何设计阵沿着任何一个坐标轴进行平移变换, 其 WD 值都不会发生改变.

针对 WD 和 CD 存在的这两个缺点, 文献 [11] 提出对 WD 和 CD 简单修正后, 加权相加得到一个新的称为混合偏差 (mixture discrepancy, MD) 的均匀测度. 这种直接的加权的办法综合了两种偏差的优点, 同时在一定程度上消弱上述缺点. 但由原始定义带来的本质缺陷并未彻底消失.

事实上, 文献 [8] 还定义了另一种称为对称偏差的均匀度量. 记任意投影子空间 C^u 的顶点为 $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_{|u|}) \in \{0, 1\}^{|u|}$. SD 依据 $\sum_{i=1}^{|u|} a_i$ 的奇偶性将所有定点均分为两大类. 将两类中的顶点分别与点 $\mathbf{x} \in C^u$ 构造

$$J_{\mathbf{x}}^e = \bigcup_{\substack{\mathbf{a} \in \{0,1\}^{|u|} \\ \sum_{i=1}^{|u|} a_i \bmod 2 = 0}} J(\mathbf{a}, \mathbf{x}), \quad J_{\mathbf{x}}^o = \bigcup_{\substack{\mathbf{a} \in \{0,1\}^{|u|} \\ \sum_{i=1}^{|u|} a_i \bmod 2 = 1}} J(\mathbf{a}, \mathbf{x}), \quad (1.6)$$

其中 $J(\mathbf{a}, \mathbf{x})$ 为顶点 $\mathbf{a}$ 与 $\mathbf{x}$ 构成的矩形. 2 维空间中的 $J_{\mathbf{x}}^e$ 和 $J_{\mathbf{x}}^o$ 分别为图 3 中的灰色和白色区域.

图 2 2 维空间 WD 中的矩形 J_x 图 3 2 维空间 SD 中的矩形 J_x

易证

$$\left| \frac{N(\mathcal{P}_n, \mathbf{J}_x^e)}{n} - \text{Vol}(\mathbf{J}_x^e) \right| = \left| \frac{N(\mathcal{P}_n, \mathbf{J}_x^o)}{n} - \text{Vol}(\mathbf{J}_x^o) \right|,$$

因此,

$$\text{SD}^2(\mathcal{P}_n) = 2 \sum_{u \neq \emptyset} \int_{C^u} \left| \frac{N(\mathcal{P}_n, \mathbf{J}_x^e)}{n} - \text{Vol}(\mathbf{J}_x^e) \right|^2 d\mathbf{x}_u.$$

由对称偏差的定义可以看出, 相对于 CD 和 WD, SD 有更强的直观统计意义. 目标区域中所有点在偏差的计算中所占权重相同. 但由于 SD 受限于其投影均匀性弱的缺陷, 因此并未被广泛接受. 本文对 SD 的性质进行了重新研究, 发现 SD 虽然考虑了低维投影偏差, 但各维度偏差在总偏差中所占权重相同. 这与其他偏差 (如 CD 和 WD) 低维投影偏差占更大的权重的情形不同, 也不符合效应排序原则中主效应比交互效应更重要、低阶交互效应比高阶交互效应重要的原则. 因此, 依据加权偏差^[12]思想,

我们对 SD 进行了指数加权, 加权后的 SD 能保留原偏差的各种优良性质, 同时有效克服原来的缺陷, 有更优异的表现.

2 SD 的再生核定义及相关性质

为叙述方便, 我们引入再生核 Hilbert 空间. 文献 [8,9] 使用再生核工具给出了 L_2 偏差等价定义

$$D(\mathcal{P}_n)^2 = \int_{C^{2s}} \mathbf{K}(\mathbf{t}, \mathbf{z}) dF_u(\mathbf{t}) dF_u(\mathbf{z}) - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \int_{C^s} \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{z}) dF_u(\mathbf{z}) + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k), \quad (2.1)$$

其中 $\mathbf{K}(\mathbf{t}, \mathbf{z})$ 为指定核函数, 通常选可分核. 相应的对称偏差的一维核函数为 $\widetilde{\mathbf{K}}_1(t_j, z_j) = 1 - 2|t_j - z_j|$, 由二项式定理可知,

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(\mathbf{t}, \mathbf{z}) &= \prod_{j=1}^s (1 + \widetilde{\mathbf{K}}_1(t_j, z_j)) \\ &= \prod_{j=1}^s [2 - 2|t_j - z_j|]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

对称偏差具有许多优良性质 [3], 本文给出对称偏差与 B- 准则和广义字长型等部分因子设计准则间的关联性质.

2.1 SD 和 B- 准则

文献 [13] 将可卷偏差及中心化偏差表示为 $\mathbf{y}_{\mathcal{P}}$ 的二次型的形式, 其中 $\mathbf{y}_{\mathcal{P}}$ 表示按字典顺序排列的所有水平组合出现次数构成的 q^s - 向量. 对于目标区域中的点集 $\mathcal{P}(n, q^s)$, 类似可得 SD 关于 $\mathbf{y}_{\mathcal{P}}$ 的二次型的形式

$$\text{SD}_2(\mathcal{P})^2 = \left(\frac{4}{3}\right)^s - \frac{2}{n} \mathbf{m}_s^T \mathbf{y}_{\mathcal{P}} + \frac{2^s}{n^2} \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T \mathbf{M}_s \mathbf{y}_{\mathcal{P}}, \quad (2.3)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^s &= (m_1, m_2, \dots, m_s)^T \otimes \cdots \otimes (m_1, m_2, \dots, m_s)^T = \otimes^s (m_1, m_2, \dots, m_s)^T, \\ \mathbf{M}^s &= (m_{ij})_{q \times q} \otimes \cdots \otimes (m_{ij})_{q \times q} = \otimes^s (m_{ij})_{q \times q}, \\ m_i &= 1 + \frac{2i-1}{q} - \frac{(2i-1)^2}{2q^2}, \quad m_{ij} = 2 - 2\frac{|i-j|}{q}, \quad i, j = 1, 2, \dots, q. \end{aligned}$$

文献 [14] 介绍了正交性度量. 令 $\mathbf{e}$ 和 $\mathbf{I}$ 分别表示 $q \times 1$ 的全 1 列向量和 $q \times q$ 的单位矩阵, 令 $\mathbf{J} = \mathbf{e}\mathbf{e}^T$. 定义

$$L(0) = \frac{1}{q} \mathbf{J}, \quad L(1) = \mathbf{I} - \frac{1}{q} \mathbf{J}. \quad (2.4)$$

令 $\mathbf{e}^m$ 、 $\mathbf{I}^m$ 和 $\mathbf{J}^m$ 分别表示 $\mathbf{e}$ 、 $\mathbf{I}$ 和 $\mathbf{J}$ 的 m 重 Kronecker 乘积. 令 Ω 表示元素为 0 或 1 的二进制 s 元组集合, Ω_i 表示 Ω 中含有 i ($0 \leq i \leq s$) 个元素为 1 的二进制 s 元组构成的集合, 其为 Ω 的子集. 对于 Ω 中的任一向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_s) \in \Omega$, 定义

$$W(\mathbf{x}) = L(x_1) \otimes L(x_2) \otimes \cdots \otimes L(x_s),$$

$$B_i(\mathcal{P}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega_i} \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T W(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{\mathcal{P}}, \quad 1 \leq i \leq s. \quad (2.5)$$

$W(\mathbf{x})$ 是幂等的, 且满足 $W(\mathbf{x})W(\mathbf{y}) = 0, \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{y}$. $B_i(\mathcal{P})$ 度量了设计 $\mathcal{P}$ 与强度为 i 的正交表的偏离程度, 因此, 为了确保与更高强度的正交表接近, 应尽可能地选择依次极小化 $B_1(\mathcal{P}), B_2(\mathcal{P}), \dots$ 的设计.

下面给出 2 水平设计的对称偏差与 B- 准则的关系.

定理 2.1 对于设计 $\mathcal{P}(n, 2^s)$, 对称偏差与正交性的关系为

$$SD(\mathcal{P})^2 = \left(\frac{4}{3}\right)^s - 2\left(\frac{11}{8}\right)^s + \left(\frac{3}{2}\right)^s + \frac{3^s}{n^2} \sum_{j=1}^s \left(\frac{1}{3}\right)^j B_j(\mathcal{P}), \quad (2.6)$$

其中 $B_j(\mathcal{P})$ 为设计 $\mathcal{P}$ 与强度为 j 的正交表的偏离程度的度量.

当 $q = 2$ 时, (2.3) 中 $\mathbf{m}^s = \otimes^s (\frac{11}{8}, \frac{11}{8})^T = (\frac{11}{8})^s \mathbf{e}^s$, 且易知 $\mathbf{e}^s \mathbf{y}_{\mathcal{P}} = n$, 从而, 第二项可以写为

$$-\frac{2}{n} \mathbf{m}^{sT} \mathbf{y}_{\mathcal{P}} = -\frac{2}{n} \left(\frac{11}{8}\right)^s \cdot n = -2 \left(\frac{11}{8}\right)^s.$$

令

$$\mathbf{M}_0 = (m_{ij})_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

由 (2.4) 中 $L(0)$ 和 $L(1)$ 的定义可知, $\mathbf{M}_0$ 可以写为

$$\mathbf{M}_0 = 3L(0) + L(1),$$

结合 (2.5), 可得

$$\mathbf{M}^s = \otimes^s \mathbf{M}_0 = 3^s \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{3}\right)^{\sum_{i=1}^s x_i} W(\mathbf{x}),$$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_s)$, $x_i = 0$ 或 $x_i = 1$.

因此, (2.3) 中的第三项可以写为

$$\begin{aligned} \frac{1}{n^2} \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T \mathbf{M}^s \mathbf{y}_{\mathcal{P}} &= \frac{1}{n^2} \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T \left[3^s \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{3}\right)^{\sum_{i=1}^s x_i} W(\mathbf{x}) \right] \mathbf{y}_{\mathcal{P}} \\ &= \frac{3^s}{n^2} \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{3}\right)^{\sum_{i=1}^s x_i} \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T W(\mathbf{x}) \mathbf{y}_{\mathcal{P}} \\ &= \frac{3^s}{n^2} \left[\sum_{j=1}^s \left(\frac{1}{3}\right)^j B_j(\mathcal{P}) + \left(\frac{1}{3}\right)^0 \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T W(0) \mathbf{y}_{\mathcal{P}} \right] \\ &= \frac{3^s}{n^2} \left[\sum_{j=1}^s \left(\frac{1}{3}\right)^j B_j(\mathcal{P}) + 2^{-s} n^2 \right] \\ &= \left(\frac{3}{2}\right)^s + \frac{3^s}{n^2} \sum_{j=1}^s \left(\frac{1}{3}\right)^j B_j(\mathcal{P}). \end{aligned}$$

依据 (2.3) 整理即可得 (2.6), 定理得证.

2.2 SD 和广义字长型

对于实验定义域中的任一设计, 考虑其所有的水平置换, 置换得到的所有设计是组合同构的. 任一设计的所有水平置换设计的偏差值的平均值与广义字长型 (generalized wordlength patter, GWP) 有密切的联系^[15]. 文献 [16] 提出了由再生核定义的任一偏差与 GWP 的关系.

引理 2.1 设再生核

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{k=1}^s f(x_k, y_k),$$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_s)$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_s) \in C^s$, 且 $f(\cdot, \cdot)$ 满足: $\forall x, y \in [0, 1]$, $f(x, y) \geq 0$ 且 $f(x, x) + f(y, y) > f(x, y) + f(y, x)$, 则对定义在 C^s 的任意的设计 $\mathcal{P}(n, q^s)$, 考虑其所有的水平置换, 给定偏差度量, 水平置换设计的偏差值的平均满足

$$\overline{\text{Disc}}(\mathcal{P}, K) = k_0 + \left(\frac{c_1(c_2 + q - 1)}{q^2(q - 1)} \right) \sum_{i=0}^s \left(\frac{c_2 - 1}{c_2 + q - 1} \right)^i A_i(\mathcal{P}), \quad (2.7)$$

其中

$$k_0 = k_2 - 2 \left(\frac{1}{q} \sum_{k=0}^{q-1} f_1 \left(\frac{k + 0.5}{q} \right) \right) \quad \text{为常数},$$

$$k_2 = \int_{C^{2s}} \prod_{k=1}^s f(x_k, y_k) dF_u(x_k) dF_u(y_k),$$

$$f_1(x) = \int_0^1 f(x, y) dy,$$

$$c_1 = \sum_{k=0}^{q-1} \sum_{l \neq k} f \left(\frac{k + 0.5}{q}, \frac{l + 0.5}{q} \right),$$

$$c_2 = \frac{q-1}{c_1} \sum_{k=0}^{q-1} f \left(\frac{k + 0.5}{q}, \frac{k + 0.5}{q} \right),$$

k_2 中的 F_u 是定义在实验区域 C^s 上的均匀分布, $A_0(\mathcal{P}) = 1$, $(A_1(\mathcal{P}), A_2(\mathcal{P}), \dots, A_s(\mathcal{P}))$ 是设计 $\mathcal{P}$ 的 GWP.

引理中对函数 $f(\cdot, \cdot)$ 的要求是为了使得 c_2 满足 $c_2 > 1$, 从而, (2.7) 中 $A_i(\mathcal{P})$ 的系数随着的 i 增大而降低. 显然, (2.2) 给出的核函数满足引理 2.1 中的要求, 由此可得对称偏差 SD 与 GWP 的关系.

定理 2.2 对称偏差的核函数 $K = \prod_{j=1}^s [2 - 2|t_j - z_j|]$ 为再生核, 对于给定的 q 水平的设计 $\mathcal{P}$, 由引理 2.1 中 (2.7) 可得 SD 与 GWP 的关系

$$\overline{\text{SD}}(\mathcal{P}, K) = \left(\frac{4}{3} \right)^s - 2 \left(\frac{8q^2 + 1}{6q^2} \right)^s + \left(\frac{4q^2 + 2}{3q^2} \right)^s \sum_{i=0}^s \left(\frac{1+q}{2q^2+1} \right)^i A_i(\mathcal{P}). \quad (2.8)$$

由 (2.8) 易知, 广义字长型的系数 $\left(\frac{1+q}{2q^2+1} \right)^i$ 随着 i 的增大而降低, 也就是说高阶效应对偏差的影响力更低. 值得注意的是, 文献 [14] 给出了 2 水平设计在均匀性度量 SD 下与广义混杂的等价关系,

推论 2.1^[14] 对于给定的 2 水平设计 $\mathcal{P}$, 对称偏差的平方表示为广义字长型的形式如下:

$$\text{SD}_2(\mathcal{P})^2 = \left(\frac{4}{3} \right)^s - 2 \left(\frac{11}{8} \right)^s + \left(\frac{3}{2} \right)^s \left[1 + \sum_{j=1}^s \frac{A_j(\mathcal{P})}{3^j} \right]. \quad (2.9)$$

推论 2.1 是定理 2.2 的特例.

3 SD 的投影性质

如 (1.3) 所示, 现广泛使用的各种偏差的数值公式在形式上都是相似的, 都考虑了所有不同维度投影空间中设计的均匀性. 但是, 不同的偏差在投影空间中的均匀性表现还是存在一定的差异. 为研究不同偏差的投影均匀性, 我们将偏差沿着不同维度子空间进行如下分解:

$$D(\mathcal{P})^2 = D_1(\mathcal{P}) + D_2(\mathcal{P}) + \cdots + D_s(\mathcal{P}), \quad (3.1)$$

其中

$$D_i(\mathcal{P}) = \int_{C^{2s}} \sum_{j \in u} \widetilde{K}_1(t_j, z_j) d(F_u - F_p)(\mathbf{t}) d(F_u - F_p)(\mathbf{z}), \quad (3.2)$$

$u \subseteq \{1, 2, \dots, s\}$, $|u|$ 表示 u 中元素的个数, $i = 1, 2, \dots, s$.

下面以一个例子说明设计点集的偏差分解.

例 3.1 考虑任意随机产生的水平数为 3、因素个数为 13 的 U- 型设计 $U(27; 3^{13})$. 计算该设计的各种偏差值. 并对各种偏差进行低维投影分解, 计算各维度子空间平均偏差, 即 $\bar{D}_i = D_i(\mathcal{P})/\binom{s}{i}$, $i = 1, \dots, s$.

图 4 展示了不同偏差在 i 维投影平均偏差相对一维投影平均偏差, 即 $\bar{D}_i/\bar{D}_1$, 沿着维度 i 升高的趋势变化. 从图 4 可以看出, 随着维数的升高, CD、WD、FD 和 MD 的比值逐渐降低, 而 SD 随维数的变化基本保持不变.

这种趋势说明 CD、WD、FD 和 MD 中低维投影均匀性比高维投影均匀性占有更重的比重, 这也与效应排序原则相符, 当然各偏差在不同维度空间中所占比重也不相同. 而 SD 不同维度中的平均偏差基本相同, 这说明 SD 虽然考虑了低维偏差的均匀性, 但没有考虑效应排序的原则. 这是造成其在高维问题中投影均匀性差的原因所在. 为此, 考虑对 SD 进行加权处理, 提高 SD 的低维投影均匀性.

图 4 (网络版彩图) 各偏差的低维分解趋势

4 投影加权对称偏差

由前面几节的讨论可知, SD 具有很多很好的性质, 但其在低维投影均匀性上的表现限制了它的整体表现. 当面对的问题维度较高时, 由于受制于有限的自由度, 往往需要放弃对高阶交互效应的估计 (对应于高维空间中的均匀性), 只追求低阶交互和主效应的估计 (对应于低维空间中的均匀性). 因此, 低维空间中的均匀性应该在总体偏差中占有更重的权重才是合理的. 为此, 考虑对 SD 进行维度加权得到投影加权对称偏差 (weighted symmetric discrepancy, WSD) 准则. 为提高 SD 的低维投影均匀性, 本节给出 WSD 的定义及相应的解析计算表达式.

4.1 WSD 的定义

由偏差的低维分解公式 (3.1), SD 的偏差表达式可分解为

$$\text{SD}(\mathcal{P})^2 = \text{SD}_1(\mathcal{P}) + \text{SD}_2(\mathcal{P}) + \cdots + \text{SD}_s(\mathcal{P}). \quad (4.1)$$

由前一节的分析知, 为使得 SD 与实验设计的效应排序原则相符, 我们人为地给每一维度添加一个权重, 例如, 从低维到高维的权重分别为 $\omega_{u_1}, \omega_{u_2}, \dots, \omega_{u_s}$, 各维的权重满足 $\omega_{u_1} > \omega_{u_2} > \cdots > \omega_{u_s}$. 为保持计算的简洁, 令各维的权重从低至高为 $\omega, \omega^2, \dots, \omega^s$, 其中 $0 < \omega < 1$. 从而, (4.1) 变为

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 = \omega \text{SD}_{u_1}(\mathcal{P}) + \omega^2 \text{SD}_{u_2}(\mathcal{P}) + \cdots + \omega^s \text{SD}_{u_s}(\mathcal{P}). \quad (4.2)$$

另一方面, 我们知道 SD 的一维核函数 $\widetilde{K}_1(t_j, z_j) = 1 - 2|t_j - z_j|$. 从而结合 (3.2) 和 (4.2) 可得

$$\begin{aligned} \text{WSD}(\mathcal{P})^2 &= \omega \text{SD}_1(\mathcal{P}) + \omega^2 \text{SD}_2(\mathcal{P}) + \cdots + \omega^s \text{SD}_s(\mathcal{P}) \\ &= \sum_{\mathbf{u} \subseteq \{1:s\}} \omega^{|\mathbf{u}|} \int_{C^{2s}} \sum_{j \in \mathbf{u}} \widetilde{K}_1(t_j, z_j) d(F_u - F_p)(\mathbf{t}) d(F_u - F_p)(\mathbf{z}) \\ &= \int_{C^{2s}} \sum_{\mathbf{u} \subseteq \{1:s\}} \omega^k \sum_{j \in \mathbf{u}} \widetilde{K}_1(t_j, z_j) d(F_u - F_p)(\mathbf{t}) d(F_u - F_p)(\mathbf{z}). \end{aligned}$$

令

$$K_\omega(\mathbf{t}, \mathbf{z}) = \sum_{\mathbf{u} \subseteq \{1:s\}} \omega^k \sum_{j \in \mathbf{u}} \widetilde{K}_1(t_j, z_j),$$

易证其满足核函数定义中的对称性和正定性. 再由二项式定理可得

$$K_\omega(\mathbf{t}, \mathbf{z}) = \prod_{j=1}^s (1 + \omega \widetilde{K}_1(t_j, z_j)) = \prod_{j=1}^s [1 + \omega(1 - 2|t_j - z_j|)]. \quad (4.3)$$

将核函数代入偏差公式 (2.1) 可得如下定理所示的 WSD 计算公式.

定理 4.1 对于 C^s 中给定的实验点集 $\mathcal{P} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$, $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{is})^T$, $i = 1, 2, \dots, s$, WSD 有如下的计算表达式:

$$\begin{aligned} \text{WSD}(\mathcal{P})^2 &= \left(1 + \frac{w}{3}\right)^s - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s [1 + 2w(x_{ij} - x_{ij}^2)] \\ &\quad + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n \prod_{j=1}^s [1 + w - 2w|x_{ij} - x_{kj}|], \end{aligned} \quad (4.4)$$

其中 $\omega \in (0, 1)$ 为所加权重.

例 4.1 考虑表 1 中两个设计 $\mathcal{P}_5$ 和 $\mathcal{P}_6$, 两个设计的广义字长型分别为

$$\text{GWP}(\mathcal{P}_5) = (0.1224, 1.9388, 2.0408, 2.9184, 1.1020, 0.0204),$$

$$\text{GWP}(\mathcal{P}_6) = (0.1224, 1.6122, 3.6735, 1.9388, 0.7755, 0.0204).$$

从广义字长型的角度可知, 设计 $\mathcal{P}_6$ 比 $\mathcal{P}_5$ 具有更低的混杂, 也就是 $\mathcal{P}_6$ 比 $\mathcal{P}_5$ 有更小的广义低阶混杂. 另外, 可计算两个设计的 CD、WD 和 MD (见表 1), 这些结果同样表明, 相对 $\mathcal{P}_5$, $\mathcal{P}_6$ 更均匀. 但是对称偏差度量下, $\text{SD}(\mathcal{P}_5) < \text{SD}(\mathcal{P}_6)$, 即 SD 认为设计 $\mathcal{P}_5$ 更均匀, 这与广义字长型和其他偏差准则的判定矛盾. 这时, 如果考虑加权对称偏差 WSD, 则如表 1 所示 $\text{WSD}(\mathcal{P}_5) > \text{WSD}(\mathcal{P}_6)$, WSD 的度量结果与常用的偏差 (如中心化偏差、可卷偏差和混合偏差) 的度量结果相同, 且与广义字长型的判定结果一致, 即认为设计 $\mathcal{P}_6$ 比 $\mathcal{P}_5$ 更均匀. 从这个例子中可知, WSD 赋予低维投影空间均匀性更大的比重, 有效地提高了它的整体性质.

4.2 权重 ω 的选取

从例 4.1 可以看出, 权重 ω 可以有效提高 WD 的低维投影均匀性. 而 WSD 的定义 4.2 也显示, 小的 ω 值对应更高权重的低维均匀性; 当 $\omega = 1$ 时, WSD 回到 SD. 一个自然的疑问是, 如何选取合适的权重值?

由 (1.3) 可知, 点集在目标区域的局部投影区域 $J_{\mathbf{x}_u}$ 在偏差定义中的重要性. 进一步地分析, 可以看出所谓的偏差可以视为区域 $J_{\mathbf{x}_u}$ 中偏差的累计. 因此, 在某一维度上的偏差与该维度下的积分 $\int_{C^s} \text{Vol}(J_u)(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ 有成正比的尺度. 计算这些累计体积和一维空间累计体积的比可得表 2.

由表 2 的结果可知随着维数的升高, CD、WD 和 FD 的局部投影区域的积分是逐渐降低的, 也就是在低维情形下偏差值相比高维情形下占有更大的比重, 这也验证了例 3.1 中图 4 的结论. 该结论说明, 随着维数的升高, CD 的局部投影均匀性权重下降最快, FD 和 WD 的权重下降大致相同.

因此, 我们给出关于 ω 的选取建议: (1) 众所周知, WD 和 CD 的使用最为广泛, 这在一定程度上说明 WD 和 CD 所体现出的低维投影权重是合适的, 特别是在面对维度不是太高的问题时. 所以, 我

表 1 两个设计

	$\mathcal{P}_5$							$\mathcal{P}_6$						
设计点集	2	1	1	2	2	2	2	2	1	2	2	2	2	2
	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	1	2	2	2
	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	1	2	2
	1	1	2	1	2	2	2	1	2	2	1	1	1	1
	1	2	1	2	1	1	2	2	1	2	2	2	1	1
	2	2	2	2	1	1	1	1	1	2	1	2	2	2
	2	2	2	1	2	2	2	2	1	2	2	1	1	1
SD	2.7813							2.8032						
CD	0.5500							0.5464						
WD	1.1552							1.1507						
MD	1.5601							1.5529						
WSD ($\omega = \frac{1}{2}$)	1.0949							1.0919						
WSD ($\omega = \frac{1}{4}$)	0.5500							0.5464						

表 2 各维度偏差相对一维偏差尺度比

维度	1	2	3	...	d	...
CD	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4^2}$	$\frac{1}{4^3}$	...	$\frac{1}{4^d}$	...
FD	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3^2}$	$\frac{1}{3^3}$	...	$\frac{1}{3^d}$	...
WD	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3^2}$	$\frac{1}{3^3}$	...	$\frac{1}{3^d}$	...
SD	1	1^2	1^3	...	1^d	...

们建议当所面对的问题维度不是非常高时, 可使用 $\omega = \frac{1}{4}$ 或 $\omega = \frac{1}{3}$. (2) 当面对的问题维度较高时, 特别是实验次数小于因子数时, 此时通常只有主效应和部分低阶交互效应被考虑, 则我们建议一个更小的 ω 值, 如 $\frac{1}{8}$ 或 $\frac{1}{16}$.

5 WSD 与其他优良准则的关系

现常用的偏差如 CD、WD 和 MD 等均与其他准则具有一致性, 新改进的偏差 WSD 也不例外, 具有与正交性和混杂等准则的一致性.

5.1 WSD 与正交性

给定设计 $\mathcal{P}(n, q^s)$, 令 $n(\mathbf{l})$ 表示设计 $\mathcal{P}$ 中水平组合为 $\mathbf{l}$ 的实验次数, $\mathbf{y}_{\mathcal{P}}$ 表示按自然顺序排列的所有水平组合出现次数构成的 q^s - 向量. 类似于 (2.3), 我们将投影加权对称偏差表示为 $\mathbf{y}_{\mathcal{P}}$ 的二次型形式如下:

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 = \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s - \frac{2}{n} \mathbf{m}^s \mathbf{y}_{\mathcal{P}} + \frac{1}{n^2} \mathbf{y}_{\mathcal{P}}^T \mathbf{M}^s \mathbf{y}_{\mathcal{P}}, \quad (5.1)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^s &= (m_1, m_2, \dots, m_s)^T \otimes \dots \otimes (m_1, m_2, \dots, m_s)^T = \otimes^s (m_1, m_2, \dots, m_s)^T, \\ \mathbf{M}^s &= (m_{ij})_{q \times q} \otimes \dots \otimes (m_{ij})_{q \times q} = \otimes^s (m_{ij})_{q \times q}, \\ m_i &= 1 + \frac{\omega(2i-1)}{q} - \frac{\omega(2i-1)^2}{2q^2}, \quad m_{ij} = 1 + \omega - 2\omega \frac{|i-j|}{q}, \quad i, j = 1, 2, \dots, q. \end{aligned}$$

同定理 2.1, WSD 与正交 B- 准则具有一致性.

定理 5.1 对于设计 $\mathcal{P}(n, 2^s)$, 投影加权对称偏差与正交性的关系为

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 = \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s - 2\left(1 + \frac{3\omega}{8}\right)^s + \left(\frac{2+\omega}{2}\right)^s + \frac{(2+\omega)^s}{n^2} \sum_{j=1}^s \left(\frac{\omega}{2+\omega}\right)^j B_j(\mathcal{P}), \quad (5.2)$$

其中 $B_j(\mathcal{P})$ 即为设计 $\mathcal{P}$ 与强度为 j 的正交表的偏离程度的度量.

5.2 WSD 与 GWP

引理 2.1 指出任一由核函数定义的偏差均与广义字长型有密切联系. 投影加权对称偏差的定义核函数 (4.3) 满足引理 2.1 中的要求, 由此可得平均投影加权对称偏差 $\overline{\text{WSD}}$ 与 GWP 的关系.

定理 5.2 投影加权对称偏差的核函数 $\mathbf{K}_\omega = \prod_{j=1}^s [1 + \omega(1 - 2|t_j - z_j|)]$ 为再生核, 对于给定的 q 水平的设计 $\mathcal{P}$, 由引理 2.1 中的结论 (2.7) 可得平均投影加权对称偏差与 GWP 的关系为

$$\begin{aligned} \overline{\text{WSD}}(\mathcal{P}, \mathbf{K}_\omega) &= \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s - 2 \left(\frac{2(3+\omega)q^2 + \omega}{6q^2}\right)^s \\ &\quad + \left(\frac{(3+\omega)q^2 + 2\omega}{3q^2}\right)^s \sum_{i=0}^s \left(\frac{2\omega(1+q)}{(3+\omega)q^2 + 2\omega}\right)^i A_i(\mathcal{P}), \end{aligned} \quad (5.3)$$

其中 $0 < \omega < 1$ 为偏差中的权重.

(5.3) 有力说明了平均 WSD 与设计的广义混杂的一致性. 特别地, 对于 2 水平的设计, 我们可以得到 WSD 与广义混杂的关系.

推论 5.1 设 $\mathcal{P}$ 为任一 2 水平的设计, $\mathcal{P}$ 的平方加权对称偏差值与广义字长型的关系为

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 = \overline{\text{WSD}}(\mathcal{P}) = \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s - 2 \left(1 + \frac{3\omega}{8}\right)^s + \left(\frac{2+\omega}{2}\right)^s \left[1 + \sum_{j=1}^s \left(\frac{\omega}{2+\omega}\right)^j A_j(\mathcal{P})\right]. \quad (5.4)$$

5.3 WSD 的下界

文献 [17] 给出了对称偏差 SD 的下界定理, 投影加权对称偏差同样具有下界. WSD 的表达式可以表示为相遇数的形式. 所谓相遇数是任意两个向量之间对应元素相同的元素个数.

5.3.1 2 水平设计的 WSD 下界

对于 2 水平的 U- 型设计 $\mathcal{P}(n, 2^s)$, 易证 WSD 的解析表达式可以表示为相遇数的形式:

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 = \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s - 2 \left(1 + \frac{3\omega}{8}\right)^s + \frac{1}{n^2} \sum_{1 \leq l, k \leq n} (1 + \omega)^{\lambda_{kl}}, \quad (5.5)$$

其中 λ_{ij} 表示设计 $\mathcal{P}(n, 2^s)$ 中 k 和 l 两行间的相遇数.

基于此可得 2 水平设计的 WSD 下界.

定理 5.3 给定 U- 型设计 $\mathcal{P}(n, 2^s)$, 有下面不等式成立:

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 \geq \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s - 2 \left(1 + \frac{3\omega}{8}\right)^s + \frac{(1+\omega)^s}{n} + \frac{(n-1)[1 + \omega(\lambda - \gamma)](1+\omega)^\gamma}{n}, \quad (5.6)$$

其中 $\lambda = \frac{s(n-2)}{2(n-1)}$, γ 为 λ 的整数部分.

证明 $\mathcal{P}(n, 2^s)$ 为 U- 型设计, 可知

$$\sum_{1 \leq l, k \leq n} \lambda_{lk} = \frac{sn^2}{2} = \sum_{1 \leq l \neq k \leq n} \lambda_{lk} + ns.$$

于是,

$$\sum_{1 \leq l \neq k \leq n} \lambda_{lk} = \frac{sn(n-2)}{2}$$

为固定常数. 另一方面, 表达式 (5.5) 中,

$$\frac{1}{n^2} \sum_{1 \leq l, k \leq n} (1 + \omega)^{\lambda_{kl}} = \frac{1}{n^2} \sum_{1 \leq l = k \leq n} (1 + \omega)^{\lambda_{kl}} + \frac{1}{n^2} \sum_{1 \leq k \neq l \leq n} (1 + \omega)^{\lambda_{kl}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(1+\omega)^s}{n} + \frac{1}{n^2} \sum_{1 \leq k \neq l \leq n} (1+\omega)^{\lambda_{kl}} \\
&\geq \frac{(1+\omega)^s}{n} + \frac{n-1}{n} (1+\omega)^c.
\end{aligned}$$

考虑到函数 $(1+\omega)^x$ 的凸性, 由优势理论可知, 当且仅当所有 λ_{kl} ($k \neq l$) 中有 $n(n-1)(\lambda-\gamma+1)$ 个等于 γ , 剩下的 $n(n-1)(\gamma-\lambda)$ 个为 $\gamma+1$ 时, $\sum_{1 \leq k \neq l \leq n} (1+\omega)^{\lambda_{kl}}$ 达到下界. 所以,

$$\sum_{1 \leq k \neq l \leq n} (1+\omega)^{\lambda_{kl}} \geq \frac{(n-1)[1+\omega(\lambda-\gamma)](1+\omega)^\gamma}{n}.$$

因此, 由偏差公式 (5.5) 可得定理结论. $\square$

5.3.2 3 水平设计的 WSD 下界

对于 3 水平的 U-型设计 $\mathcal{P}(n, 3^s)$, 其水平的取值范围是 $\{1, 2, 3\}$, 且 $0 < \omega < 1$, 则 3 水平设计的 WSD 的解析表达式表示为相遇数的形式为

$$\begin{aligned}
\text{WSD}(\mathcal{P})^2 &= \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s + \frac{(1+\omega)^s}{n} - \frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \sum_{i=1}^n \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\gamma_i} \\
&\quad + \frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^{\gamma_{ik}^1} \left(1 - \frac{\omega}{3}\right)^{\gamma_{ik}^2}, \tag{5.7}
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
\gamma_i &= \#\left\{x_{ij} = \frac{1}{2}, j = 1, 2, \dots, s\right\}, \\
\gamma_{ik}^1 &= \#\left\{(x_{ij}, x_{kj}) \in \left\{\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{5}{6}\right)\right\}, j = 1, 2, \dots, s\right\}, \\
\gamma_{ik}^2 &= \#\left\{(x_{ij}, x_{kj}) \in \left\{\left(\frac{1}{6}, \frac{5}{6}\right)\right\}, j = 1, 2, \dots, s\right\},
\end{aligned}$$

$\#\{A\}$ 表示集合 A 中元素的个数.

从而由 (5.7) 可得 WSD 的下界.

定理 5.4 对任一给定的 3 水平设计 $\mathcal{P}(n, 3^s)$, 有下面不等式成立:

$$\text{WSD}(\mathcal{P})^2 \geq \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^s + \frac{(1+\omega)^s}{n} - \frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \left[\left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right)^{\frac{sn}{3}} + (n-1)\right] + \frac{n-1}{n} e^{\hat{\delta}}, \tag{5.8}$$

其中

$$\hat{\delta} = \frac{4sn}{9(n-1)} \ln \left(1 + \frac{\omega}{3}\right) + \frac{2sn}{9(n-1)} \ln \left(1 - \frac{\omega}{3}\right).$$

证明 由 (5.7), 对于 3 水平的 U-型设计 $\mathcal{P}(n, 3^s)$, 其满足

$$\sum_{i=1}^n \gamma_i = \frac{1}{3} sn, \quad \sum_{i \neq k} \gamma_{ik}^1 = \frac{n}{3} \cdot \frac{n}{3} \cdot 2 \cdot 2 \cdot s = \frac{4sn^2}{9}, \quad \sum_{i \neq k} \gamma_{ik}^2 = \frac{n}{3} \cdot \frac{n}{3} \cdot 2 \cdot s = \frac{2sn^2}{9}.$$

用 $\frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} \delta_{ik}$ 表示 (5.7) 中的 $\frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} (1 + \frac{\omega}{3})^{\gamma_{ik}^1} (1 - \frac{\omega}{3})^{\gamma_{ik}^2}$. 对 δ_{ik} 取对数, 可得

$$\ln \delta_{ik} = \gamma_{ik}^1 \ln \left(1 + \frac{\omega}{3}\right) + \gamma_{ik}^2 \ln \left(1 - \frac{\omega}{3}\right),$$

则有

$$\frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} \delta_{ik} = \frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} e^{\ln(\delta_{ik})} = \frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} e^{[\gamma_{ik}^1 \ln(1+\frac{\omega}{3}) + \gamma_{ik}^2 \ln(1-\frac{\omega}{3})]}.$$

由均值不等式 $\sqrt[n]{x_1 x_2 \cdots x_n} \leq \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}$, 可得

$$\begin{aligned} \frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} e^{[\gamma_{ik}^1 \ln(1+\frac{\omega}{3}) + \gamma_{ik}^2 \ln(1-\frac{\omega}{3})]} &= \frac{2^s(n-1)}{n} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i \neq k} e^{[\gamma_{ik}^1 \ln(1+\frac{\omega}{3}) + \gamma_{ik}^2 \ln(1-\frac{\omega}{3})]} \\ &\geq \frac{2^s(n-1)}{n} \left(\prod_{i \neq k} e^{[\gamma_{ik}^1 \ln(1+\frac{\omega}{3}) + \gamma_{ik}^2 \ln(1-\frac{\omega}{3})]} \right)^{\frac{1}{n(n-1)}} \\ &= \frac{2^s(n-1)}{n} (e^{[\ln(1+\frac{\omega}{3}) \sum_{i \neq k} \gamma_{ik}^1 + \ln(1-\frac{\omega}{3}) \sum_{i \neq k} \gamma_{ik}^2]})^{\frac{1}{n(n-1)}}. \end{aligned}$$

从而可得

$$\frac{1}{n^2} \sum_{i \neq k} \left(1 + \frac{\omega}{3}\right)^{\gamma_{ik}^1} \left(1 - \frac{\omega}{3}\right)^{\gamma_{ik}^2} = \frac{2^s(n-1)}{n} e^{\hat{\delta}},$$

其中

$$\hat{\delta} = \ln \left(1 + \frac{\omega}{3}\right) \frac{4ns}{9(n-1)} + \ln \left(1 - \frac{\omega}{3}\right) \frac{2ns}{9(n-1)}.$$

等号成立当且仅当每个 $\delta_{ik} = e^{\hat{\delta}}$ ($i \neq k$).

(5.7) 中的

$$-\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \sum_{i=1}^n \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\gamma_i}$$

记为 $g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$, γ_i 为 0 到 s 的整数, 且 $\sum_{i=1}^n \gamma_i = \frac{ns}{3}$, 求 $g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ 的极小值转化为条件极值问题, 利用 Lagrange 乘数法, 令

$$h(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) = \sum_{i=1}^n \gamma_i - \frac{sn}{3} = 0,$$

Lagrange 函数为

$$F(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n; \lambda) = -\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \sum_{i=1}^n \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\gamma_i} + \lambda \left(\sum_{i=1}^n \gamma_i - \frac{sn}{3}\right),$$

分别对 γ_i 和 λ 求导得

$$\begin{cases} \frac{\partial F(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n; \lambda)}{\partial \gamma_1} = -\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\gamma_1} \ln \left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right) + \lambda = 0, \\ \vdots \\ \frac{\partial F(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n; \lambda)}{\partial \gamma_n} = -\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\gamma_n} \ln \left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right) + \lambda = 0, \\ \frac{\partial F(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n; \lambda)}{\partial \lambda} = \gamma_1 + \gamma_2 + \cdots + \gamma_n - \frac{sn}{3} = 0, \end{cases}$$

解方程组得

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \cdots = \gamma_n = \frac{s}{3},$$

$$\lambda = \frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\frac{s}{3}} \ln \left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right).$$

所以, $g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ 的最大值点在 $(\frac{s}{3}, \frac{s}{3}, \dots, \frac{s}{3})$ 取得. 因为 $g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ 只有一个极值点且 $g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ 是凸函数, 所以其最小值在边界 $(\frac{sn}{3}, 0, \dots, 0)$ 处取得. 所以,

$$\begin{aligned} g(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) &= -\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \sum_{i=1}^n \left[\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right]^{\gamma_i} \\ &\geq -\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \left[\left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right)^{\gamma_1} + \cdots + \left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right)^{\gamma_n}\right] \\ &= -\frac{2}{n} \left(1 + \frac{5\omega}{18}\right)^s \left[\left(\frac{18+9\omega}{18+5\omega}\right)^{\frac{sn}{3}} + (n-1)\right]. \end{aligned}$$

等号成立当且仅当 $\gamma_1 = \frac{sn}{3}, \gamma_2 = \gamma_3 = \cdots = \gamma_n = 0$. 定理得证. $\square$

致谢 衷心感谢两位审稿人对本文提出的宝贵修改意见.

参考文献

- 1 Fang K T. The uniform design: Application of number-theoretic methods in experimental design. *Acta Math Appl Sin Engl Ser*, 1980, 3: 363–372
- 2 Wang Y, Fang K T. A note on uniform distribution and experimental design. *Sci Bull*, 1981, 26: 485–489
- 3 Fang K T, Liu M Q, Qin H, et al. *Theory and Application of Uniform Experimental Design*. Singapore: Springer; Beijing: Science Press, 2019
- 4 Hua L, Wang Y. *Applications of Number Theory to Numerical Analysis*. Berlin: Springer; Beijing: Science Press, 1981
- 5 Niederreiter H. Random number generation and quasi-Monte Carlo methods. In: *CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics*. Philadelphia: SIAM, 1992
- 6 Warnock T T. Computational investigations of low discrepancy point sets. *Appl Number Theory Number Anal*, 1972, 106: 319–343
- 7 Wu C F J, Hamada M S. *Experiments: Planning, Analysis, and Optimization*, 2nd ed. New York: Wiley, 2009, 172–173
- 8 Hickernell F J. A generalized discrepancy and quadrature error bound. *Math Comp*, 1998, 67: 299–322
- 9 Hickernell F J. What effects the accuracy of quasi-Monte Carlo quadrature? In: *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods*. Berlin: Springer-Verlag, 1998, 16–55
- 10 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
- 11 Zhou Y D, Fang K T, Ning J H. Mixture discrepancy for quasi-random point sets. *J Complexity*, 2013, 29: 283–301
- 12 Sloan I H, Woźniakowski H. When are quasi-Monte Carlo algorithms efficient for high dimensional integrals? *J Complexity*, 1998, 14: 1–33
- 13 Fang K T, Qin H. A note on construction of nearly uniform designs with large number of runs. *Statist Probab Lett*, 2003, 61: 215–224
- 14 Fang K T, Ma C X, Mukerjee R. *Uniformity in Fractional Factorials, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods*. Berlin-Heidelberg: Springer, 2002, 232–241
- 15 Tang Y, Xu H, Lin D K J. Uniform fractional factorial designs. *Ann Statist*, 2012, 40: 891–907
- 16 Zhou Y D, Xu H. Space-filling fractional factorial designs. *J Amer Statist Assoc*, 2014, 109: 1134–1144
- 17 Wang Z H, Qin H, Chatterjee K. Lower bounds on the symmetric L_2 -discrepancy and their application. *Comm Statist Theory Methods*, 2007, 36: 2413–2423

Projection weighted symmetric discrepancy

Lanlan He, Minyu Xie & Jianhui Ning

Abstract The uniform design was proposed in the 1980s, and since then lots of researchers have studied it. In order to distribute the points evenly in the experimental domain, many criteria have been forwarded to measure the uniformity of the design array. Among those criteria, the L_2 -discrepancies, developed from star discrepancy in the number theoretic method, are the most popular measurement, such as the centered L_2 -discrepancy (CD). There are still some disadvantages with those discrepancies. For example, the central points of the experimental domain plays a much more important role than other points when choosing CD as the criterion. Although, symmetric L_2 -discrepancy (SD) have better geometric sense than CD, the poor performance at projection uniformity limits the use of SD. In this paper, we propose a projection weighted SD (WSD) to refine the projection properties of SD. Some other properties of SD and WSD are also studied in this work.

Keywords uniform design, discrepancy, projection uniformity

MSC(2010) 62K15, 62K99

doi: 10.1360/N012019-00014