用于计算机实验的均匀最大投影设计

Miroslav Vořechovský[a], *, Jan Mašek[a]

[a] 布尔诺理工大学结构力学研究所，*Veveří 331/95，602 00* 布尔诺，捷克共和国

arXiv:2603.19778v1 [cs.CE] 20 Mar 2026

摘要

空间填充试验设计广泛应用于工程计算机试验，因为这类试验只能承担数量有限且成本高昂的模型评估。最大最小准则或最小最大距离设计等基于距离的设计可确保全局空间填充，而拉丁超立方抽样可保证一维投影的均匀性，但两者都无法保证低维子空间中的均匀性。最大投影（MaxPro）设计旨在提高低维子空间中的均匀性，但其原始形式依赖欧几里得距离，可能导致有界域内出现系统性的密度扭曲。我们证明，标准的MaxPro准则会导致统计上的非均匀抽样，使角落区域抽样不足，并造成蒙特卡洛估计偏差。

为解决这一问题，我们引入该准则的一种周期变体，称为均匀最大投影（uMaxPro）；该方法以基于最小镜像约定的周期距离取代欧几里得度量。所提出的uMax-Pro 设计保留了MaxPro 的投影感知结构，同时使设计生成机制具有统计均匀性。数值实验表明，该方法能够实现无偏的蒙特卡洛积分、降低方差、取得出色的子空间投影性能，并具有良好的偏差特性。我们还在基准工程问题上进一步验证了该方法，包括一个混凝土细观尺度有限元模型，结果表明该方法能够提高代理建模和概率估计的精度。

由此得到的准则对MaxPro 进行了简单且计算高效的改进，增强了其在非自适应计算机试验中的稳健性。本文还提供了构造算法、开源实现和可复现的优化设计，以便于实际应用该方法。

关键词： 填充空间设计、基于投影的设计、统计均匀性、拉丁超立方抽样、周期性距离度量、蒙特卡洛积分、代理建模

1. 引言

计算机实验在多种场景中都是不可或缺的工具，包括模型筛选、代理建模，以及作为不确定性传播分析一部分的概率积分数值估计（涵盖统计评估、敏感性评估和可靠性评估）。

填充空间设计是计算机试验设计中的一个重要类别，其目标是探索整个设计域，包括其边界，从而使仿真结果能够充分代表所有可能输入构成的空间。Johnson 等人 [13] 的一篇开创性论文提出了最大最小准则和最小最大距离设计这两种基于距离的设计，此后这些设计在 [25, 28] 及其他文献中得到了推广。

另一类独特的填充空间设计是均匀设计，其旨在使设计点在整个定义域上的经验分布近乎均匀。其均匀性可通过偏差度量来量化；参见 [11], ，这些度量用于评估点相对于理想均匀分布的分散程度。

在这两类设计中，无论是模型近似还是统计积分的场景，将设计点均匀且充分地投影到低维子空间上都可能至关重要。这在受稀疏性原理支配的高维情形中尤为重要，因为可能只有部分因子会显著影响模型输出。因此，当已知（或高度怀疑）哪些因子具有显著影响时，确保相应的低维子空间得到充分覆盖就十分重要。

通过将设计限制为拉丁超立方体样本[2, 21], ，可以在每个一维投影中实现良好的覆盖；而优化基于距离的准则（例如最大最小准则），则可以获得良好的全局空间填充性质。然而，要确保所有子空间同时具有良好的覆盖更具挑战性；相关讨论请参见 [32, 24, 4] 。

*通讯作者电子邮箱： miroslav.vorechovsky@vut.cz(Miroslav Vořechovský)

为弥补这一不足，Joseph 等人 [14] 提出了最大投影（MaxPro）准则。该准则通过强调各坐标上成对距离平方的乘积，改进了常见的基于距离的目标函数。实际上，这使设计不仅在全维空间中分布得更均匀，在低维投影中也更加均匀。通过以贝叶斯方式处理距离指数或权重，均值（或期望）目标函数自然会包含各子空间中的乘积项，从而有利于获得子维度覆盖良好的设计。

1.1 研究空白与贡献

尽管空间填充设计得到了广泛发展，但在计算机实验中仍有两个问题尚未得到充分解决。首先，虽然MaxPro 准则专为提升投影均匀性而设计，但其采用标准欧几里得点间距离，导致在有界域的边界附近出现系统性的密度扭曲。其次，目前尚无机制能够保证设计生成过程具有统计均匀性，而这对于无偏积分以及在低维子空间中的可靠表现至关重要。这些观察揭示了一个明确的方法学空白：一种兼具投影感知特性和统计均匀性的设计。

本研究通过引入MaxPro 准则的周期变体（uMaxPro）填补了这一空白。该变体在保留原始形式投影结构的同时，消除了边界效应。我们在MaxPro 准则的基础上进行简单改进，以确保设计域得到均匀覆盖。我们发现，现有MaxPro 设计会系统性地遗漏某些区域，从而降低其在某些应用中的效能。通过融入这项改进，所得布局不仅在所有子空间中保持空间填充特性，具有更优的子空间表现和跨维度的竞争性偏差性质，而且点的分布也达到了统计均匀性。这种双重特性使改进后的设计既适用于代理建模（需要进行函数逼近），也适用于无偏蒙特卡罗型积分，从而拓宽了MaxPro类设计的有效应用范围。

1.2. 样本均匀性的重要性

本文中，两种不同的　均匀性 概念发挥着重要作用，为避免混淆，我们将其明确阐述。　:

1. 确定性设计的几何（空间填充）均匀性。对于一组固定点$D = \{x_s\}_{s=1}^{N_{\text{sim}}} \subset [0,1]^{N_{\text{var}}}$，可以评估这些点在区域内的填充是否均匀。这是单个设计的一种纯几何属性，可通过偏差度量（例如环绕差异度）或基于距离的准则（如最大最小准则 [13]）进行量化。其中不涉及任何概率模型。

2. 设计生成机制的统计（概率）均匀性。在实践中，单个设计通常通过运行随机的优化过程（随机初始点、模拟退火中的随机移动等）获得。因此，结果是一个随机设计。如果在多次生成设计的过程中，区域内每个子区域被访问的概率都与其体积成正比，我们就称这种设计生成机制具有统计均匀性。形式上，若X 是从随机生成的设计D中均匀随机抽取的一个点，那么统计均匀性意味着$\mathbb{P}(X \in A) = |A|$ 对任意子区域$A \subseteq [0,1]^{N_{\text{var}}}$均成立，其中 $|A|$ 表示其归一化的勒贝格测度。

因此，偏差评估的是单个确定性设计的几何均匀性，而我们稍后构建的直方图则评估设计生成过程的统计均匀性。这两个概念相辅相成，但并不等同。

长期以来，蒙特卡罗模拟一直是工程学和应用科学中进行数值积分与不确定性传播的标准方法 [22, 9, 8, 29]。为改善收敛特性并降低估计量的方差，人们开发了基于低差异度序列的准蒙特卡罗（QMC）方法 [26, 1, 17]。随机化准蒙特卡罗技术则进一步将方差缩减与估计量的无偏性结合起来 [27]。本研究置于这一更广泛的背景之中，重点关注优化确定性点集的设计，使其在保持投影质量的同时，确保设计生成机制具有统计均匀性。与通常基于序列构造的经典 QMC 方法不同，我们考虑针对固定样本量计算机实验量身设计的优化型试验设计。

在蒙特卡罗数值估计中，我们希望（a）尽量减少积分点的数量（从而降低计算成本），（b）降低估计结果的方差，以及（c）保持无偏估计，使其收敛到精确值。通常通过优化样本均匀性 来兼顾这些相互冲突的要求，即优化N_{sim} 个积分点在N_{var}维单位超立方体 $[0,1]^{N_{\text{var}}}$中的分布。此外，为了获得无偏估计，样本还必须具有统计均匀性——也就是说，设计域中的每个区域被访问的概率都相同。

虽然直觉上可能会认为样本均匀性会影响积分误差，但二者之间的关系是间接的，也有些模糊。Koksma–Hlawka不等式 [15], 说明了这种联系：它将积分误差限制在函数变差（按Hardy和Krause的定义）与样本点偏差的乘积以内。从这个意义上说，较低的偏差（表明均匀性较高）会降低误差的上界，但并不能直接量化实际误差。

当被积函数的局部特征（即高变差区域）的尺度与均匀分布样本中各点之间的最小距离相当时，样本均匀性对估计方差的影响尤为显著

；例如，参见 [36] 第 5.1 节和 [20]第 6.5 节。然而，这类函数或元模型曲面确实存在，但并不代表大多数典型的工程问题。对于大多数被积或近似函数，局部特征的尺度大于点样本均匀性中的波动；例如参见 [18]。在大多数应用场景中，只要点样本经过了足够优化，不存在严重违反均匀性的点簇，那么经过一定优化的点样本通常就足以满足需求。

虽然降低方差是可取的，但确保估计量保持无偏至关重要。无偏性是蒙特卡洛积分的一项基本要求：采样点在统计上不应偏向设计域的任何特定区域，从而确保各个区域都得到同等代表。在处理未知函数或黑箱 计算机模型时，这一条件尤为重要。在某些特定情况下，对某些区域进行过度抽样可能会带来益处；例如，参见 [3] 有关高斯过程近似的内容。同样，重要性抽样会有意对对积分贡献较大的区域进行过度抽样，但这种方法需要预先了解函数的行为。在本文余下部分，我们只关注未知函数的积分与近似，不假设对其性质掌握任何先验信息。

我们指出，原则上，如果已知抽样密度并应用适当的重要性抽样校正，非均匀样本仍可产生无偏估计。然而，在优化填充空间设计的背景下，优化过程所诱导的抽样分布无法以闭式形式获得，并且取决于样本量、算法细节以及最终达到的特定局部最优解。因此，无法根据单个设计估计有效密度，这使得重要性抽样校正在实践中难以实施。基于这一原因，为了在典型的计算机实验场景中获得无偏的蒙特卡洛估计，设计生成机制的统计均匀性仍然至关重要。

2. 基于距离的填充空间设计

1990年，Johnson 等人 [13] 发表了可能是最常用的基于距离的空间填充准则——最大最小准则。最大最小准则 ϕ_{Mm} 评估样本中所有点对i 和j 之间的相互距离，并试图使所有点对中的最短距离最大化

$$\phi_{\mathrm{Mm}} = \min_{\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j \in \mathscr{U}} d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j), \quad i \neq j. \tag{1}$$

相互距离通常采用欧几里得距离度量

$$d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \sqrt{\sum_{v=1}^{N_{\mathrm{var}}} \left(\Delta_{ij,v}\right)^2}, \tag{2}$$

点i、j 在维度v 上的单变量投影距离为

$$\Delta_{ij,v} = |x_{i,v} - x_{j,v}|. \tag{3}$$

1995年，Morris和Mitchell [25] 提出了对最大最小准则的一种修正，将所有点对之间距离的倒数纳入考量，而非仅关注距离最小的点对。对于欧几里得距离度量，他们提出的准则为

$$\min_{D} \left\{ \frac{1}{\binom{N_{\mathrm{sim}}}{2}} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sim}}-1} \sum_{j=i+1}^{N_{\mathrm{sim}}} \frac{1}{\left[\sum_{v=1}^{N_{\mathrm{var}}} \Delta_{ij,v}^2\right]^{k/2}} \right\}^{1/k}, \tag{4}$$

此外，在不受限制的情况下，最大最小准则往往偏好在较低维子子空间上具有非唯一坐标投影的点模式（可折叠设计）。如果将此类设计用于对输入变量之间交互作用较弱或没有交互作用的函数进行数值积分，其性能主要取决于一维抽样均匀性，即仅取决于唯一坐标投影的数量。Morris和Mitchell [25] 提出了一种解决方案，将可能的解限制在拉丁超立方体样本（LHS）这一类中。修正后的拉丁超立方最大最小准则产生了均匀性更高、数值积分性能更好的设计。

将表现不佳的优化准则限定于拉丁超立方体抽样，确实能通过两种方式改善所得点样本的空间填充性质：(a) 限制优化算法生成过度聚集的点；(b) 自动改善对一维子空间的投影，因为这些投影被严格设定为等距，即每个维度上的N_{sim} 个坐标必须设置在N_{sim} 个水平上。然而，限定为LHS设计只是限制了有缺陷的优化准则充分暴露其问题的可能性。

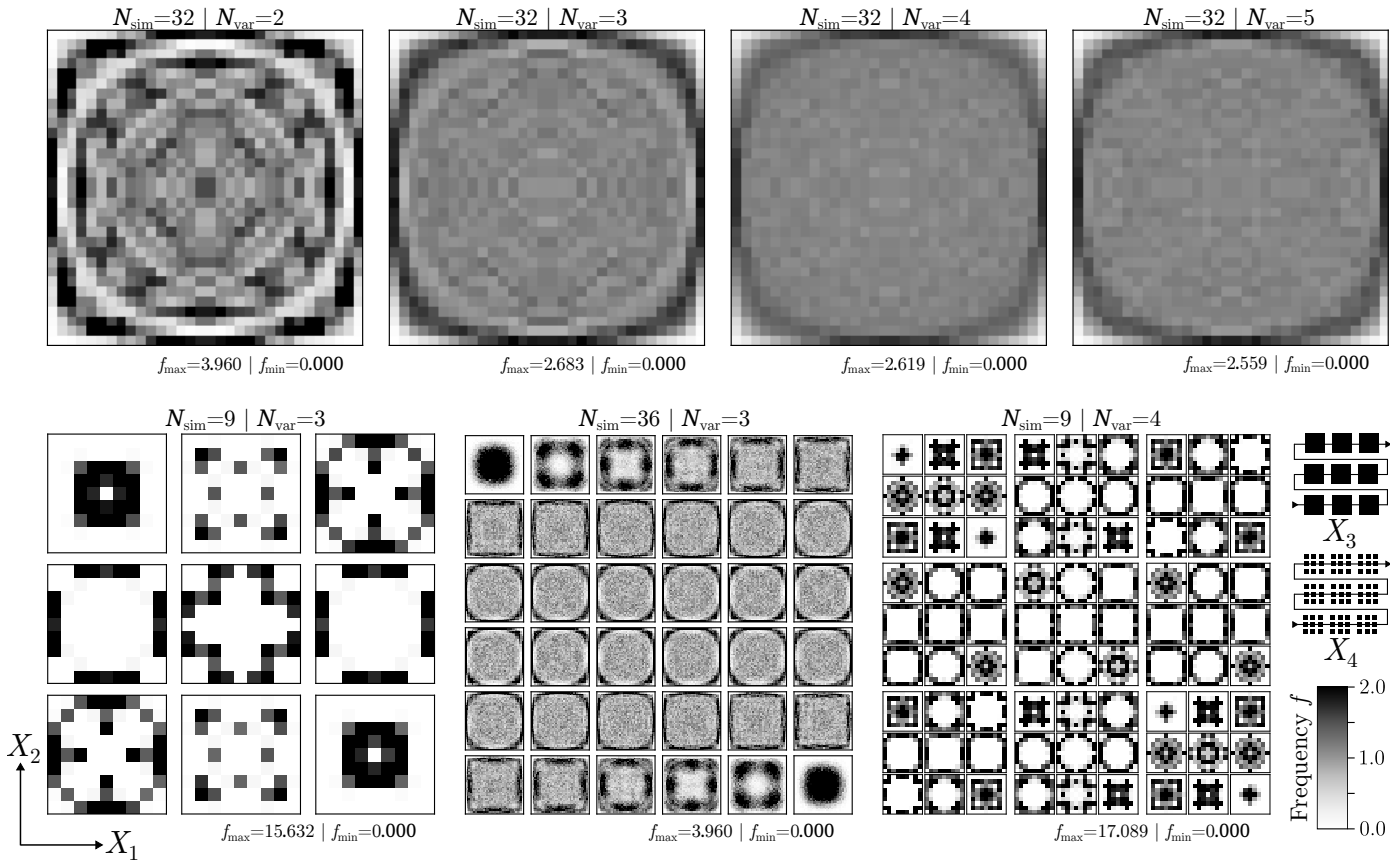


图 1：对于不同样本量 N_{sim} 和域维数 N_{var}，MaxPro 准则在给定拉丁超立方体分箱中取值时相对频率的直方图。频率经过归一化，使数值为 1 表示统计均匀性完美（每个分箱被取值的概率与其体积成正比）。低于 1 的数值表示某些区域被系统性地欠采样，高于 1 的数值表示某些区域被过度采样。这些直方图总结了由N_{run} 个独立优化设计得到的经验分布。

3. 最大投影设计

3.1. 最大投影准则

进行数值实验时，我们知道通常只有少数几个输入变量（因子）会显著影响结果。这称为稀疏效应原理。如果识别出这些起主导作用的输入变量，就能将当前问题的维数（复杂度）大幅降低至原来的N_{var}的一小部分。因此，后续计算将变得高效得多。然而，仍存在遗漏因子间重要交互作用，或完全未纳入潜在关键输入变量的风险。因此，输入变量的设计域中可能包含许多冗余变量；只有在识别出关键影响因子之后，例如通过对初始筛选结果进行敏感性分析，才能利用稀疏效应。在此之前，点样本应同等对待所有输入变量，并尽可能均匀地对所有包含的子空间（因子组合）进行抽样。

确实，拉丁超立方最大最小准则改善了完整N_{var}维空间中的空间填充性，并确保每个一维坐标投影都具有均匀性。然而，它并不能从根本上保证其余 $(N_{var}-1)$ 至二维子空间中的均匀性。为提高这些子空间中的均匀性，Joseph 等人于 2015 年在其公式 (5) 中定义了最大投影设计准则（下文简称 MaxPro），其形式为

$$\min_{D}\left\{\frac{1}{\binom{N_{sim}}{2}}\sum_{i=1}^{N_{sim}-1}\sum_{j=i+1}^{N_{sim}}\frac{1}{\prod_{v=1}^{N_{var}}(x_{i,v}-x_{j,v})^2}\right\}^{1/N_{var}}. \tag{5}$$

分母中包含每对点的所有一维距离投影的N_{var} 平方乘积，而采用欧几里得度量的松弛最大最小准则则将它们相加；参见公式 (4)。因此，MaxPro 准则倾向于选择能使点在所有子空间上的坐标投影最大化的设计。在这里，任意一对点在任何投影中都不会过于接近。因此，与最大最小准则不同，MaxPro 准则会惩罚所有可用子空间中的点聚集。由此可以预期，MaxPro最优设计会使点在任意子空间内均匀分布。然而，事实并非如此。

3.2. 最大投影设计的统计（非）均匀性

为研究这些设计的统计特性，我们从随机初始值出发，反复优化MaxPro 准则，并收集所得设计，以构建设计域中的直方图。用于直方图分析的所有设计均按以下方式生成。对于每次试验，我们抽取一个独立的随机拉丁超立方体设计，并基于坐标交换操作对其进行模拟退火（SA）优化（[35], 见下文），直至满足模拟退火终止准则。由此得到一个局部最优的 MaxPro 设计。随后独立重复该过程$N_{\text{run}} = 10^4$ 次，从而得到N_{run} 个彼此独立的优化后LHS设计。

我们考察点分布在设计域内的统计均匀性。设计域被划分为$n_b = N_{\text{sim}}^{N_{\text{var}}}$ 个分箱（类似于拉丁超立方体分箱）。对于每个分箱，我们统计N_{run} 个MaxPro样本实现中点落入该分箱的次数。对于统计均匀的点样本，每个分箱被点访问的平均频数为$f_{\text{u}} = N_{\text{sim}} N_{\text{run}} / n_b$。分析MaxPro 样本时，我们将各分箱的频数除以这一“均匀”频数，得到相对频率f，以此反映各个分箱的过采样或采样不足情况。对于真正均匀的样本，所有分箱被点访问的概率都必须相同，即点出现的频数相同且为 1。换言之，如果设计生成机制具有统计均匀性，那么预期的分箱频数应与分箱体积成正比，直方图也应近似平坦。

图 1 显示，MaxPro 并非如此：某些区域，尤其是域角附近的区域，被访问的频率系统性地较低，而远离边界的区域则被过度采样。从这种概率意义上说，MaxPro 机制不满足统计均匀性。图 1 顶行展示了设计域维度从 $N_{\text{var}} = 2$ 到 $N_{\text{var}} = 5$ 的所有二维子空间的直方图，其中包含 32 个点的 MaxPro 样本（N_{sim}）。图 1 底行试图展示 $N_{\text{var}} = 3$ 和 $N_{\text{var}} = 4$ 维域内点的完整空间分布。对于 $N_{\text{var}} = 3$维域，沿第三维依次针对 N_{sim} 个层（拉丁超立方体水平——增量）构建二维直方图。对于 $N_{\text{var}} = 4$ 维域，这种方法还会沿第四维循环执行。

可以看出，原始的 MaxPro 准则生成的点样本从不访问域中的很大一部分区域。使用这些点样本进行蒙特卡洛积分或近似时，这种行为不可避免地会导致有偏估计。MaxPro 准则避免对域的角落区域进行采样，同时在远离边界处形成一个过度采样层。随着域维数 N_{var}增加，这个问题似乎正在消失。然而，这一结论具有很大的误导性。随着维数增加，角落几乎占据了超立方体的全部体积；参见 [34]中的第 6 节。

现在我们更详细地考察点分布。为此，我们根据点位置到超立方体中心的距离绘制直方图；见图 2 第一行。我们绘制了 LH–MaxPro 样本的直方图，并以理想的均匀点样本作为比较。两者之间可以看出一些偏差，不过这些偏差似乎尚不严重。然而，在图 2 第二行中，直方图按各区域（径向层/区间）所包含的定义域体积占比进行加权。这种经过体积校正的视图揭示了MaxPro 度量造成的角落区域欠采样。我们还估算了归一化欠采样体积的占比 δ：即抽样密度相对于均匀分布的不足。红色阴影区域的总面积表示每个径向层中优化设计的密度低于均匀分布的体积度量。因此，δ 衡量的是优化设计密度低于均匀参考的定义域体积比例。如图 2 所示，随着设计域维度增加，这种欠采样现象会愈发明显。

MaxPro 准则未能满足统计均匀性的基本要求——也就是说，它不会以相同的概率选取设计域中的所有区域。这种点分布的系统性偏差必然会导致数值积分和近似中的估计偏差。

Joseph 等人 [14] 意识到了非均匀性问题，并指出：“最大投影设计和广义最大最小拉丁超立方设计都会使边界附近的点比中心区域更多，从而影响设计空间中点的整体均匀性。”他们还指出，令人惊讶的是，尽管拉丁超立方设计对各水平的等间距施加了限制，但将其与 MaxPro 准则结合，能够提升所有子空间中的均匀性。尽管如此，他们仍以计算机试验的首要目标是函数逼近而非积分为由，对这种非均匀性不以为意，并认为“最大投影设计在均匀性度量下表现不佳，并不是什么值得担忧的问题。”

接下来，我们将对原有的MaxPro准则作出一项关键改进，实现其预期目标：将出色的投影性质与完全的统计均匀性结合起来。

4. 均匀最大投影设计

MaxPro 准则无意中过度采样边界区域的问题，与所采用的距离度量有关。原始研究提出使用站点间欧几里得距离度量（见式 (2)），这与最大最小准则类似。然而，这不可避免地导致成对距离向量方向的分布不均匀，尤其是在边界附近。因此，借鉴我们此前对基于距离的填充空间设计类别所作的改进 [33], ，我们也提出通过重新定义度量来改进基于投影的 MaxPro 设计。具体而言，我们提出，成对互距离不应仅仅定义为点 i 和 j之间的直接距离，而应采用

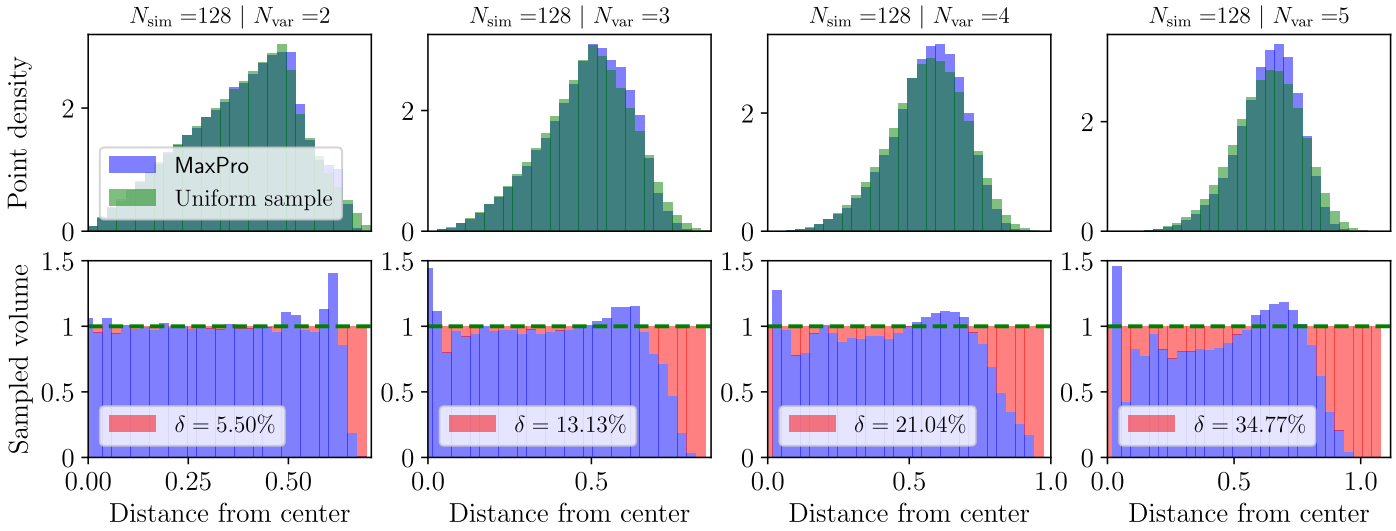


图2：二维、三维、四维和五维设计域内MaxPro 128点样本的径向直方图。相对于参考均匀分布曲线的偏差突显了MaxPro对角落区域的系统性欠采样，且这一现象在更高维度中更为明显。

最小镜像约定，计算无边界、周期重复的设计域内两点最近周期镜像之间的距离。在这种方法中，式 (3) 中的距离 $\Delta_{ij,\,v}$ 由其周期变体 $\Delta_{ij,\,v}$取代

$$\overline{\Delta}_{ij,v} = \min\left(\Delta_{ij,v},\, 1-\Delta_{ij,v}\right). \tag{6}$$

因此，我们引入了最大投影准则的一个周期变体——称为均匀最大投影准则（以下简称uMaxPro）——其目标是最小化

$$\overline{\psi}(D) = \left\{ \frac{1}{\binom{N_{sim}}{2}} \sum_{i=1}^{N_{sim}-1} \sum_{j=i+1}^{N_{sim}} \frac{1}{\prod_{v=1}^{N_{var}} \overline{\Delta}_{ij,v}^{2}} \right\}^{1/N_{var}} \tag{7}$$

与原始MaxPro 设计生成机制不同，周期变体uMaxPro 不偏好设计域中的任何特定区域。由于周期距离$\Delta_{ij,\,v}$ 在坐标系平移下保持不变，由此诱导的抽样分布也基本具有平移不变性。在重复实现中，每个区间（在全空间及所有坐标投影中）被访问的频率与其体积成正比，见图3中的直方图。因此，周期MaxPro 机制在每次确定性实现中保持MaxPro 强大的几何均匀性和投影结构的同时，实现了统计均匀性。通过这种方式，周期性弥补了与域边界相关的问题。

这种平移不变性意味着，优化准则不会偏好设计域中的任何区域。因此，即使单个实现并非完全（几何上）均匀，将多个独立实现与任意整体平移相结合，也会产生一种统计均匀的采样机制，即每个子区域被访问的概率与其体积成正比。这种统计均匀性并非单个确定性实现的属性，而是设计生成机制所诱导的分布的属性。它源自准则的群对称性，具体而言，是模 1 意义下的平移不变性。

一种可能的顾虑是，在各个维度上应用公式（6）中的最小值运算并不具有旋转不变性。然而，尽管欧几里得距离度量具有旋转不变性，原始的 MaxPro 设计准则却不具有旋转不变性。因此，引入周期度量并不会损害整体设计，旋转不变性的任何损失都无关紧要。

所得点样本可通过评估图2和图4所示的加权直方图进行比较。uMaxPro 准则不会倾向于对任何区域进行过度采样或采样不足。这一性质可实现方差降低的无偏估计，而投影性质作为MaxPro准则的固有特征已得到优化。从实现角度看，周期性修改只需对现有代码进行微小调整，且计算公式（6）的计算开销可以忽略不计。

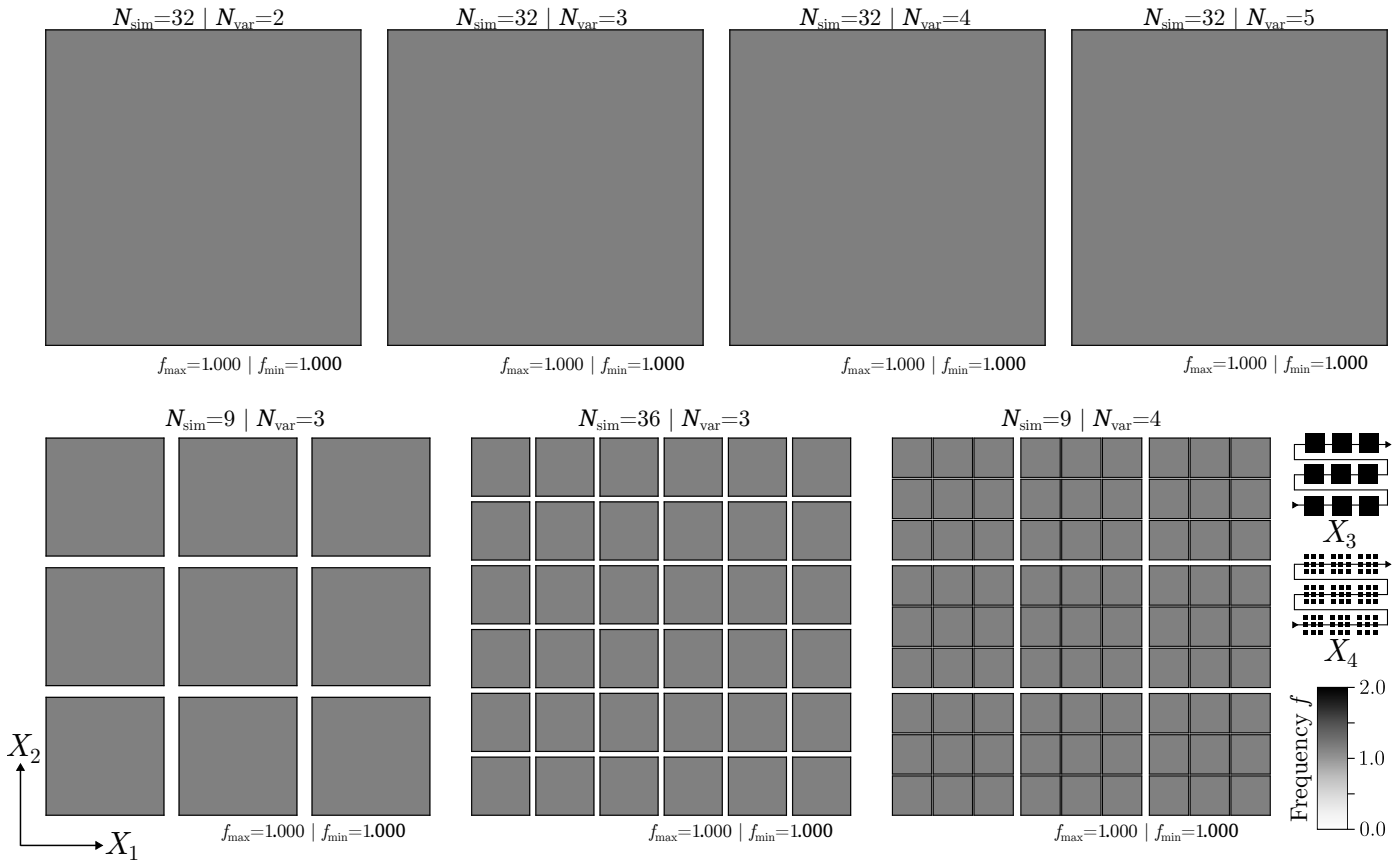


图3：对于不同样本量N_{sim}和设计空间维数N_{var}，所提出的uMaxPro 准则访问给定拉丁超立方体分箱的相对频率直方图。频率经过归一化，使数值为1时表示达到完美的统计均匀性（每个分箱被访问的概率与其体积成正比）。低于1的数值表示某些区域被系统性地欠采样，高于1的数值则表示过采样。这些直方图总结了由N_{run} 个独立优化设计得到的经验分布。

5. 优化样本构造算法

为获得根据所引入的uMaxPro 准则优化的点样本，我们采用模拟退火（SA）算法，并遵循此前用于相关性最优拉丁超立方体的框架 [35]。本文所考虑的所有优化设计均限于拉丁超立方体样本这一类别。模拟退火算法本身并不局限于拉丁超立方体结构；然而，在本研究中，它在拉丁超立方体框架内运行，以保持边缘分层。模拟退火尤其适用于具有离散边际的设计问题，例如LHS设计，因为它能够在固定的水平网格内自然地执行坐标交换操作。

该优化问题是组合型的，且具有高度多峰性，因此确定性算法通常会陷入较差的局部极小值。模拟退火提供了一种实用的折中方案：虽然它无法保证找到全局最优解，但其概率接受规则允许偶尔接受目标值上升的移动，从而有助于跳出局部极小值并探索设计空间中有希望的区域。在整个退火调度过程中，我们记录遇到的最佳设计；当温度降至最低后，再执行一个简短的贪心（局部改进）阶段，以确保保存的设计相对于所有单坐标交换至少达到局部最优。

该方法在实践中已证明行之有效，能够持续生成在MaxPro 和uMaxPro 准则下均接近最优的设计。其实现已作为开源Python软件包 `uMaxPro` [38] 发布，该软件包用于生成本文报告的所有设计和直方图。原始MaxPro（采用点间度量）和所提出的uMaxPro （采用周期度量）的可复现优化设计可在随文提供的 `zenodo` 仓库 [37] 中获取。

6. 数值研究

在下文中，我们将介绍数值研究，比较根据原始MaxPro准则和所提出的uMaxPro 准则优化的点样本的性质。

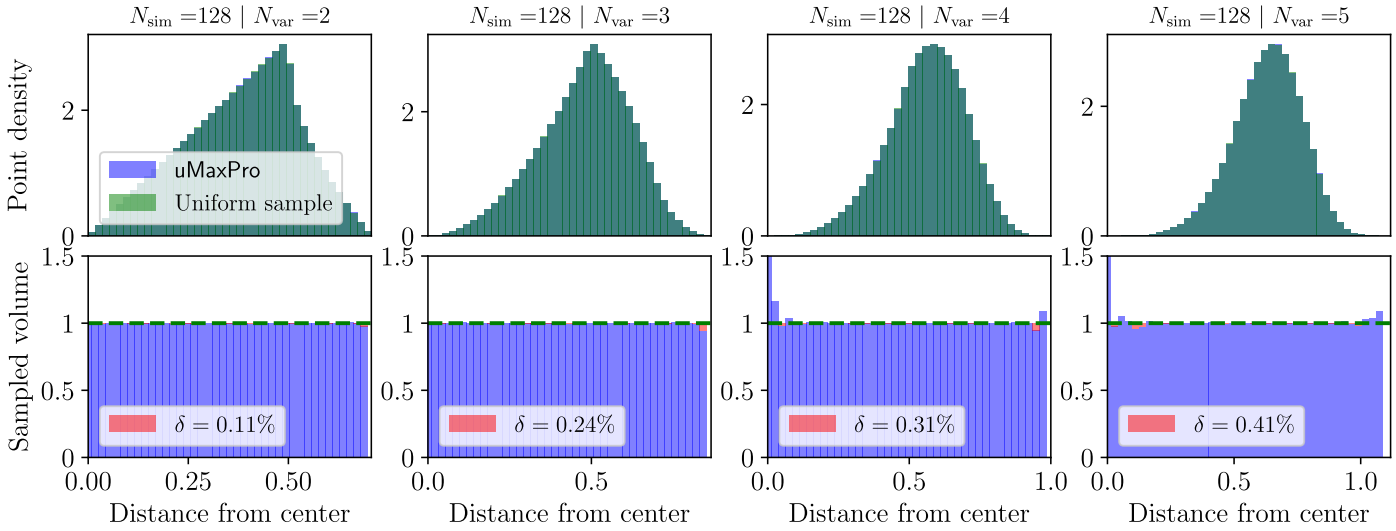


图 4：uMaxPro 128 点样本在二维、三维、四维和五维设计域内的径向分布直方图。uMaxPro 直方图与均匀参考相匹配，证实了边界偏差已被消除。

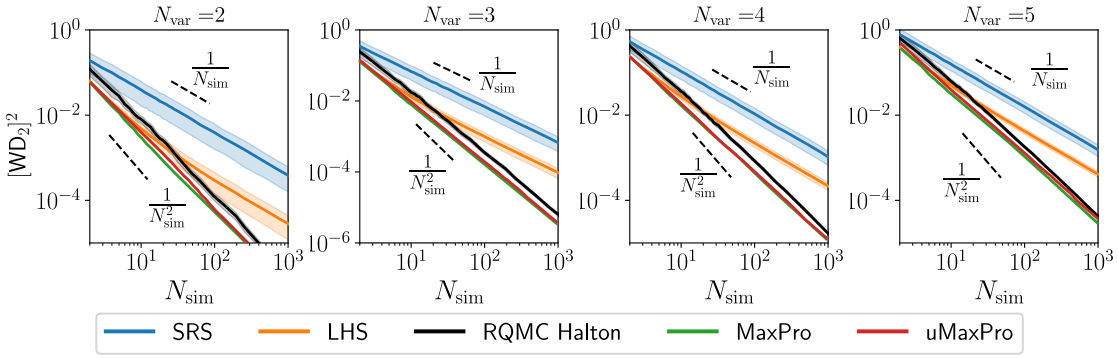


图 5：二维、三维、四维和五维设计域的偏差比较。

6.1. 偏差

偏差可以作为试验设计均匀性的标准化度量。为避免域边界相关的问题，我们选用 Hickernell [10]提出的环绕偏差（WD_2）；另见 [7]。WD_2 偏差对采样点的顺序、不同维度之间点坐标的交换（旋转不变性）以及点坐标的镜像（反射不变性）均不敏感。WD_2 偏差的另一项真正独特的性质是对坐标平移的不变性（非锚定偏差），即它不会使偏差值相对于例如域原点或域中心固定。因此，WD_2 偏差完全不受域边界的影响。WD_2 偏差的表达式为

$$[\mathrm{WD}_2(\mathscr{D})]^2 = -\left(\frac{4}{3}\right)^{N_{\mathrm{var}}} + \frac{1}{N_{\mathrm{sim}}}\left(\frac{3}{2}\right)^{N_{\mathrm{var}}} + \frac{2}{N_{\mathrm{sim}}^2}\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sim}}-1}\sum_{j=i+1}^{N_{\mathrm{sim}}}\prod_{\nu=1}^{N_{\mathrm{var}}}\left[\frac{3}{2} - \Delta_{ij,\nu}\left(1-\Delta_{ij,\nu}\right)\right], \tag{8}$$

其中，$\Delta_{ij,\nu}$是公式（3）中的投影距离。乘积 $\Delta_{ij,\nu}\left(1-\Delta_{ij,\nu}\right)$消除了域边界的影响；请回顾公式（6）中的最小镜像约定度量。

由于评估了所有相互之间的一维距离投影，WD_2 偏差对各个边缘分布上坐标的均匀性表现出较高的敏感性。任何聚集的坐标对都会不利于WD_2 值。

尽管拉丁超立方采样强制实施了边缘分层，但环绕偏差仍然对投影坐标之间的相对一维距离敏感。因此，即使在 LHS 设计这一类别中，不同的层内放置也可能导致不同的偏差值。

在本研究中，按照 [35] 中引入的术语，所有 LH 设计均采用每个分层内的拉丁超立方中位数法（中点）进行放置。在该文献中，拉丁超立方构造被区分为三种变体：拉丁超立方随机法（在每个分层内进行均匀采样）、拉丁超立方中位数法（在每个分层的中点进行采样）以及拉丁超立方均值法（在限制于该分层的条件分布的均值处进行采样）。对于本文所考虑的均匀单位超立方体

而言，拉丁超立方中位数法与拉丁超立方均值方案是一致的。因此，一维投影中不存在额外的层内随机性。偏差值因此纯粹反映优化设计的结构特性，而不是由 LHS 随机抽样引入的额外扰动。这解释了为什么在图 5 中看不到层内离散效应。

Halton 序列专门用于最小化偏差，其偏差下降速率最快，因此在这方面可视为近乎最优。图 5 展示了维度为 $N_{\text{var}} = 2$–5 时，环绕偏差随样本量变化的情况。数值结果表明，原始 MaxPro 设计和均匀最大投影（uMaxPro）设计的下降速率均与 Halton 序列相当，在二维情况下达到 $\mathcal{O}(1/N^2{}_{\text{sim}})$ 的速率（对于$[\text{WD}_2]^2$，即 $\mathcal{O}(1/N_{\text{sim}})$ WD_2）。尽管在更高维度下，绝对速率会变慢，但在所有测试维度中，uMaxPro 设计的偏差值仍接近 Halton 序列。

值得注意的是，偏差度量仅与数值积分或近似中的预期表现间接相关。因此，不能将样本在偏差方面的表现视为对“均匀性”本身的直接衡量。偏差与直观意义上的均匀性之间并非简单对应。尽管 MaxPro和 uMaxPro 准则都能取得出色的偏差值，但它们在蒙特卡洛积分中的实际表现还有待后文揭示。

6.2. 周期性最大最小准则

周期性最大最小准则 [33], ϕ_{PMm} 是对原始最大最小准则的改进，采用了最小镜像约定。该准则计算样本中所有点对 i 和 j 之间的周期距离，并试图使所有点对之间的最短距离最大化

$$\phi_{\text{PMm}} = \min_{\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j \in \mathscr{U}} \overline{d}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j), \quad i \neq j. \tag{9}$$

此处使用周期欧几里得距离度量来衡量点之间的距离

$$\overline{d}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \sqrt{\sum_{v=1}^{N_{\text{var}}} \left(\overline{\Delta}_{ij,v}\right)^2} \tag{10}$$

其中周期投影距离 $\Delta_{ij,v}$ 定义于公式（6）中。

图 6 所示结果表明，与所有对比的抽样方法相比，所提出的uMaxPro 在样本中找到的最短成对距离上取得了最佳（数值越大越好）的结果。LH-MaxPro 和 LH-uMaxPro设计甚至优于 Halton 序列，更不用说简单随机样本和采用随机排序的 LH 设计了。uMaxPro 设计的 ϕ_{PMm}值呈现出系统性提升，优于原始的MaxPro 设计；后者在 [14] 的最大最小基准问题中已表现良好。

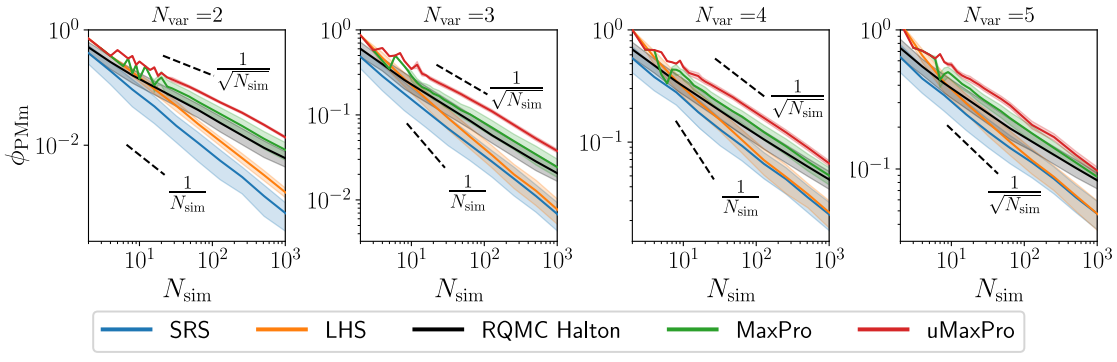


图 6：二维、三维、四维和五维设计域中的周期性最大最小值比较（数值越高越好）。

6.3. 积分具有强变量交互的函数

可以方便地利用一个在输入随机变量之间具有强交互作用的函数，来检验整体样本均匀性和投影性质。考虑由独立标准正态变量组成的向量X_v所定义的多元函数：

$$g_{\Pi\exp}(\boldsymbol{X}) = \prod_{v=1}^{N_{\text{var}}} \exp(-X_v^2). \tag{11}$$

该函数的精确均值为；见 [20] 中的附录 A

$$\mathrm{E}[g_{\Pi\exp}] \equiv I = \frac{1}{\sqrt{3^{N_{\text{var}}}}}. \tag{12}$$

蒙特卡洛积分通过取平均值来估计解，为每个 $1/N_{\text{sim}}$ 积分点赋予相等的权重

$$I_N = \frac{1}{N_{\text{sim}}} \sum_{s=1}^{N_{\text{sim}}} g_{\Pi\exp}(\boldsymbol{X}_s). \tag{13}$$

给定样本的 N_{run} 个实现，每个实现包含 N_{sim} 个点并给出一个估计值 I_N，我们得到 N_{run} 个积分估计值。随后，通过计算这些估计值的均值来近似均方根误差

$$\mathrm{RMSE}[I_N] \approx \sqrt{\frac{1}{N_{\text{run}}} \sum_{r=1}^{N_{\text{run}}} \left(I_{N,r} - I\right)^2}. \tag{14}$$

现在，让我们估计均值 $\mathrm{E}[g_{\Pi\exp}]$，并报告通过 $N_{\text{run}} = 500$ 次独立运行获得的均方根误差 $\mathrm{RMSE}[g_{\Pi\exp}]$。使用维度为 $N_{\text{var}} = 2$、3、4、5 的各种抽样方法获得的样本。通过单变量逆累积分布函数，将采样点从单位超立方体转换为标准高斯变量。

图 7 的上方子图比较了均值估计的收敛图。图中显示了估计均值及表示 ± 一个标准差（σ）的带状区域。为增强清晰度，对于能够提供无偏估计的抽样方法，使用虚线边界表示 ± σ 带状区域。在图 7 的下方子图中，绘制了均方根误差 $\mathrm{RMSE}[g_{\Pi\exp}]$。结果表明，与原始的 MaxPro 准则相比，所提出的uMaxPro 准则显著提高了估计精度，同时由于样本均匀性而实现了无偏估计。

uMaxPro 均方根误差的下降速率接近于 $1/N_{\text{sim}}$，与 Halton 序列相当。然而，uMaxPro 产生的误差始终小于 Halton 序列。

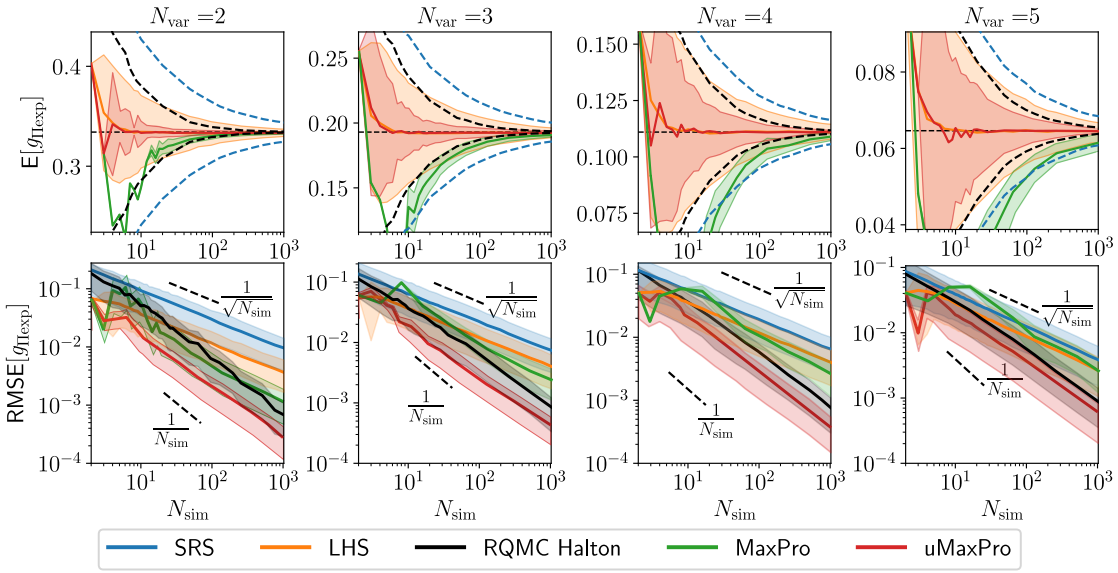


图 7：对于包含$N_{\text{var}} = 2,3,4,5$ 个强交互变量的函数，估计均值的收敛情况与估计量方差的收敛情况对比。无偏估计方法的 $\pm\sigma$ 区间带以虚线边缘绘制；有偏方法（MaxPro）的估计均值曲线与真实值（顶行中的水平线）明显分离。底行显示RMSE，其中uMaxPro的曲线急剧下降，始终表明其在所有维度下的误差最低。

6.4. 子空间投影基准问题

MaxPro 准则最初被提出作为一种样本优化准则，其不仅能最大化整个域维数上的空间填充性质，还能最大化所有因子子集中的空间填充性质。如果只有部分因子处于活动状态，这一点就很重要。

现在，我们研究所选抽样方法在五维设计域 ($N_{\text{var}} = 5$) 内所有可能的$N_{\text{var,sub}} = 2,3,4 < N_{\text{var}}$维子空间中的投影性质。我们估计$N_{\text{var,sub}}$维偏差变体（第 6.1 节）和乘积函数（第 6.3 节）。

图 8 展示了所有可能子空间组合的偏差分析结果。可以得出结论，原始MaxPro准则即使在子空间投影中也能保持出色的偏差，这正是其最初的设计目标。所提出的uMaxPro 准则的偏差几乎相同，这表明样本偏差不受周期性修改的影响。

图 9 展示了在所有可能的子空间组合中，$g^{\Pi\text{exp}}$ 函数的估计均值（回顾第 6.3 节）以及估计的均方根误差。与全维度分析类似（回顾第 6.3 节），LH-MaxPro 设计会产生有偏估计，因此无法用于蒙特卡洛积分。然而，在子空间分析中，MaxPro准则的表现甚至不如随机排序的 LH 样本。这是由于MaxPro 样本存在统计非均匀性，即域角采样不足而边界采样过多。当将此类非均匀样本投影到子空间时，采样不足或过多的区域往往会进一步累积；随着样本被投影到越来越低维的子空间中，样本非均匀性也会加剧。

周期性修改 uMaxPro 是对原始 MaxPro 准则的一项关键改进，使其能够实现

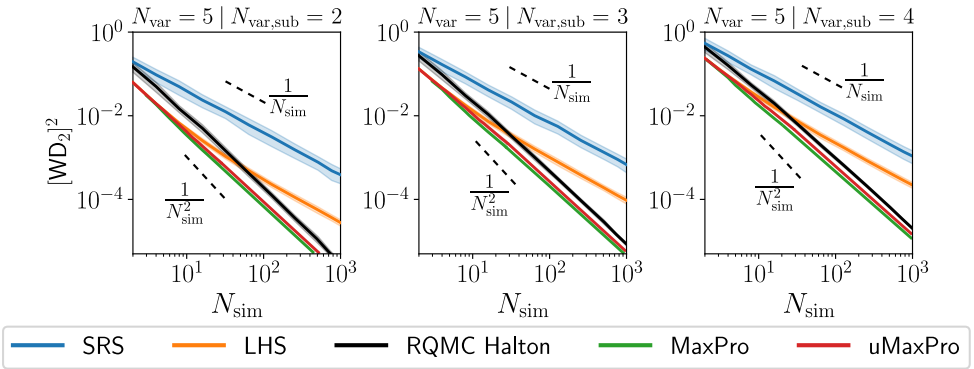


图 8：计算五维设计在所有二维、三维和四维子空间上的偏差。

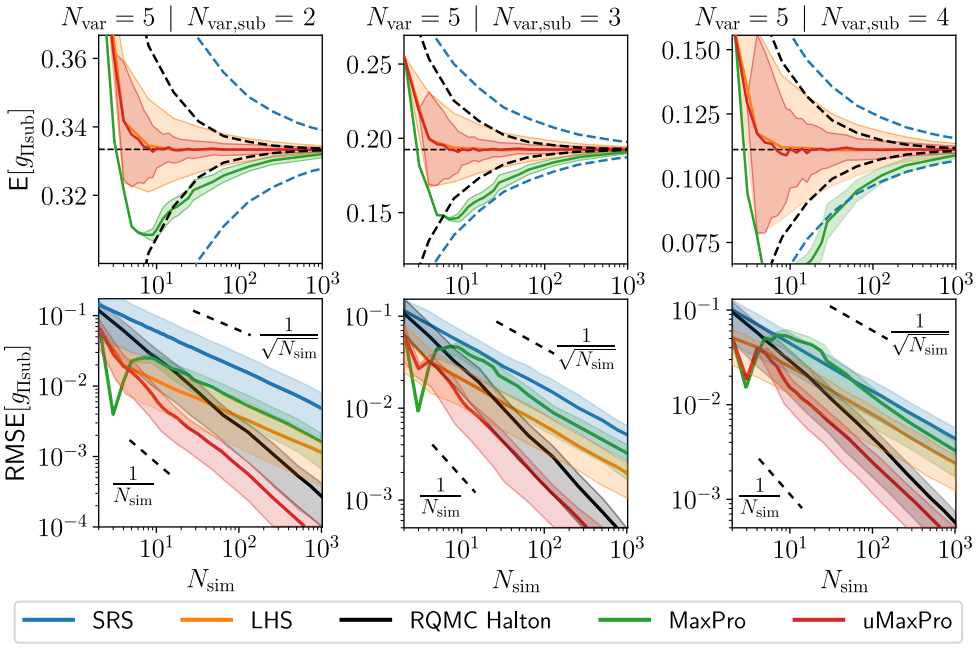


图 9：乘积函数　　在五维设计域的二维、三维和四维子空间中的比较。阴影带表示 ± 一个标准差　　.

最初的目标，即在对函数进行积分时表现出色，尤其是在原始点样本的子空间中。另一方面，uMaxPro 准则保留了无偏估计，同时实现了显著的方差缩减。在这些子空间中，uMaxPro 样本继续展现出优异性能，甚至明显超越 Halton 序列。

7. 工程问题中的应用

本节展示如何在实际工程场景中应用所提出的 uMaxPro 准则、配套软件实现以及预先计算的设计。我们考虑结构力学中的两个基准问题：极限状态下的短柱和正常使用极限状态下的悬臂梁。对于每个问题，我们使用这些设计生成输入样本，通过相应的底层计算机模型评估响应，并构建高斯过程（克里金）代理模型。随后根据预测误差量化代理模型的质量，从而直接比较不同的设计策略。

7.1. 基准问题与投影设置

这两个示例取自仿真实验虚拟图书馆：测试函数与数据集 [31], ，这是一个广泛用于计算机实验设计与分析中基准测试方法的资料库。

在投影性质方面，我们关注一种具有挑战性的设定：响应所依赖的维度比优化设计少一个。更具体地说，在分析一个 $N_{\text{var}} = D$ 维点样本时，$N_{\text{var}} = D-1$ 维子空间代表了一种要求较高的情形。

为有意检验投影稳健性，我们在低于设计优化维度的子空间中评估响应函数。更具体地说，我们在D 维空间中构建抽样设计，而底层工程模型仅依赖$D-1$ 个变量。

因此，以下示例中使用的输入样本，对于短柱问题（见第 7.2 节），取自$N_{\text{var}} = 3$ 维设计的$N_{\text{var}} = 4$维子空间；对于悬臂梁问题（见第 7.3 节），则取自$N_{\text{var}} = 4$ 维设计的$N_{\text{var}} = 5$维子空间。在每种情况下，原始设计中都额外包含一个设计维度作为冗余变量，并在模型评估阶段将其省略。

这种设置模拟了常见的实际情况：事先并不知道哪些输入变量是活跃的。在实际的计算机实验中，经过筛选或敏感性分析后，才可能发现某些变量并不活跃或影响较弱。因此，即使投影到任意低维子空间，投影鲁棒设计仍应保持良好的空间填充性和均匀性性质。

以下示例中的冗余维度在设计构造过程中有意保留，仅在模型评估阶段移除。这样可以对不同抽样准则的投影特性进行受控且严格的检验。

7.2. 短柱工程问题

短柱函数 [5, 6, 16] 是一个广泛用于不确定性量化和可靠性分析的基准问题。该问题模拟一根材料属性具有不确定性的短结构柱在随机载荷作用下的行为。性能函数定义为

$$f(Y,M,P)=1-\frac{4M}{bh^2Y}-\frac{P^2}{b^2h^2Y^2}+0\cdot X_4, \tag{15}$$

其中，Y 为屈服应力，M 为弯矩，P 为轴向力，b 为横截面的宽度（$b=5$ 毫米），h 为横截面的深度（$h=15$ 毫米），而 X_4 是第四个冗余样本维度。表 1 列出了输入随机变量及其分布，其中M 和P之间的相关系数为 0.5。

变量	分布	均值 (μ)	标准差 (σ)
Y	对数正态分布	5	0.5
M	正态分布	2000	400
P	正态分布	500	100

表 1：输入随机变量及其分布。

该问题综合了非线性、相关随机变量和材料不确定性，因此已成为评估多项式混沌展开、随机配点法和基于可靠性的优化等方法的经典基准问题。

7.3. 悬臂梁工程问题

可靠性分析和不确定性量化中常用的悬臂梁函数 [5, 6, 40], ，用于描述承受水平载荷和垂直载荷的均匀悬臂梁。关注的响应为梁$D(x)$自由端处的位移和应力$S(x)$。它们的表达式为

$$D(x)=\frac{4L^3}{Ewt}\sqrt{\left(\frac{Y}{t^2}\right)^2+\left(\frac{X}{w^2}\right)^2}+0\cdot X_5, \tag{16}$$

$$S(x)=\frac{600Y}{wt^2}+\frac{600X}{w^2t}+0\cdot X_5, \tag{17}$$

其中，R 为屈服应力，E 为梁材料的杨氏模量，X 为水平载荷，Y 为垂直载荷，w为梁宽，t 为梁厚，$L=100$ 英寸为梁长，$D_0=2.2535$英寸为最大允许位移，X_5 为第五个冗余采样维度。与短柱工程学问题类似，项$0\cdot X_5$ 在保持高维采样结构的同时，使物理响应仅取决于一组缩减后的变量。这反映了输入可能不活跃的实际情况，并支持直接评估投影稳健性。

随机输入变量遵循表2中列出的分布。有时会使用修正后的响应形式来定义安全区域，例如

变量	分布	均值 (μ)	标准差 (σ)
R	正态分布	40,000	2,000
E	正态分布	2.9×10^7	1.45×10^6
X	正态分布	500	100
Y	正态分布	1000	100

表2：悬臂梁问题的输入随机变量及其分布。

$$\frac{S}{R}-1\le 0,\quad \frac{D}{D_0}-1\le 0.$$

7.4. 高斯过程回归与评估程序

对于第7.2节和第7.3节中的两个问题，使用变换后的输入及其对应的响应值训练高斯过程（GP）回归模型，该模型等同于地质统计学和工程学中的克里金。GP模型采用 Matérn-5/2 核，并结合自动相关性确定，以捕捉各输入的不同敏感度

参数。 一个较小且固定的 假设存在噪声方差，以避免数值不稳定性。核超参数 a re
通过最大化 t 进行优化 对数边际似然。

该过程得到一个概率代理模型，可对新的输入样本进行预测，并提供相应的不确定性度量。为量化预测精度，我们使用一个通用的高保真测试集计算高斯过程预测的均方根误差（RMSE）；该测试集包含输入点，且这些点的精确响应值已知。

图10的左、右面板分别展示了短柱问题和悬臂梁问题中高斯过程预测的平均均方根误差。每条粗曲线对应一种采样策略，其数值是对设计的 500 次独立实现所得均方根误差取平均得到的，曲线周围还标示了 ± 一个标准差带。对于每次实现，均使用相应的设计点训练高斯过程模型，并相对于通用测试集评估预测误差。这种设置能够在实际工程应用中公平比较不同的设计策略。

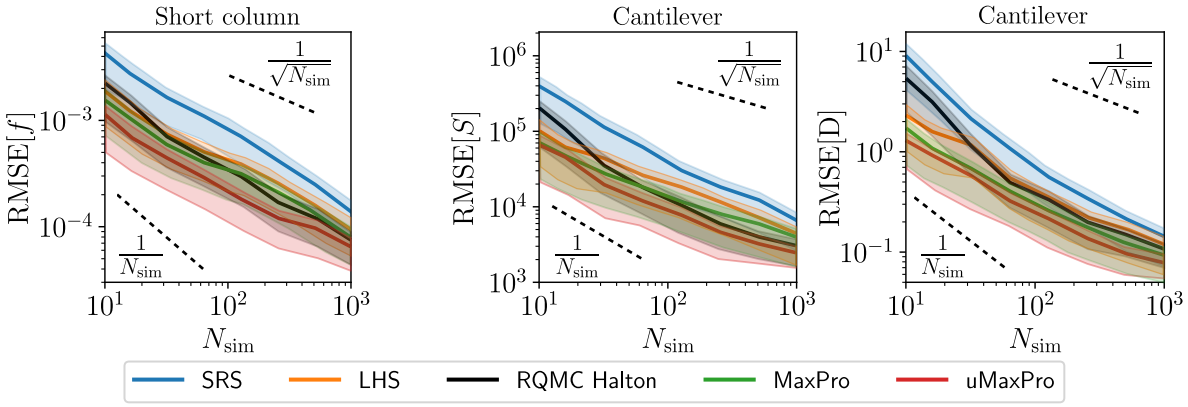


图 10：工程学示例中高斯过程预测的均值均方根误差。左图对应短柱响应。中图和右图对应悬臂梁问题，分别展示应力 S 和位移 D的预测误差。阴影带表示在 500 次独立实现中的 ± 一个标准差。

此外，图11给出了相应的均方根误差图，适用于使用不含冗余维度的输入点样本求解工程问题的情形，即第一个示例中 $N_{\text{var}} = 3$，第二个示例中$N_{\text{var}} = 4$。

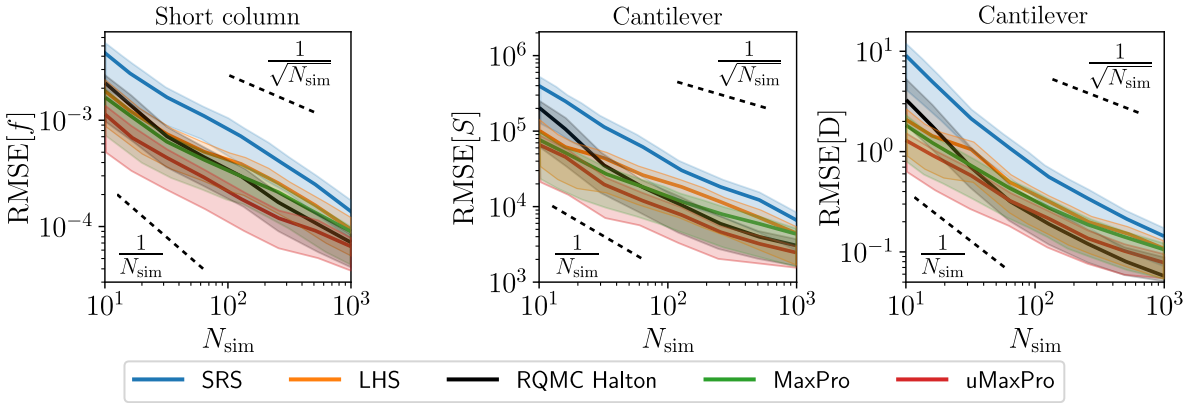


图 11：使用无冗余维度的点样本求解工程学示例时，高斯过程预测的均值均方根误差。左图对应短柱响应。中图和右图对应悬臂梁问题，分别展示应力 S 和位移 D的预测误差。阴影带表示在 500 次独立实现中的 ± 一个标准差。

7.5. 有限元法工程学问题

最后一个工程示例研究了混凝土细观尺度有限元模型的力学响应。建模方法见 [19]。该详细模型明确呈现了各个骨料和基体的体积。骨料和基体均采用损伤塑性微平面材料模型，以模拟材料内部的损伤。此外，骨料表面覆盖有定向黏聚单元，也能实现相分离。

采用标准三点弯曲构型。试件几何形状的特征参数包括支撑跨距$S = 240\,\text{mm}$、深度$D = 80\text{mm}$和厚度$T = 80\,\text{mm}$。在带缺口构型中，缺口深度定义为$a = 0.1D$。缺口宽度为 3 mm，缺口尖端为圆角，如图12所示。边界条件采用三点弯曲试验的设置。通过在梁的底面定义刚性区域（CERIG单元，即 Ansys 软件中的约束方程刚性区域）来表示支撑边界条件。每个刚性区域均连接到一个位于其形心的主节点（MASS21 – 点质量单元），如图12中的红色标记所示。两个主支撑节点之间的距离等于梁的跨距S。沿试件顶面定义一个狭窄的加载刚性区域，并在其中心设置一个主节点。在主节点处施加大小为$F_y = 1\text{N}$的竖直单位载荷，同时约束水平位移分量u_x 和u_z 。

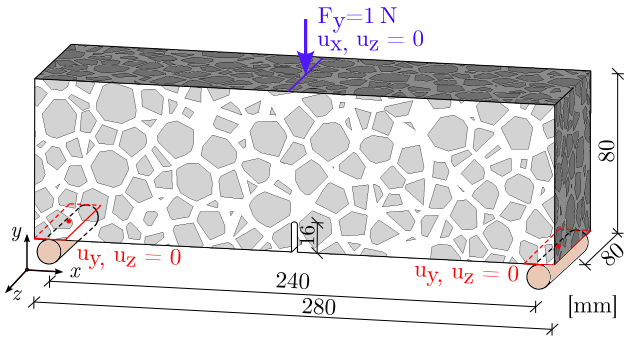


图 12：三点弯曲试件：边界条件和尺寸。

花岗岩骨料、水泥浆体和界面过渡区（ITZ）的杨氏模量采用对数正态概率分布进行建模，以考虑材料固有的非均质性和正值物理约束；输入参数分布见表 3。所选参数范围依据文献[12, 30, 23, 39]报道的实验测量结果确定。由于水泥基体与界面过渡区具有共同的水化来源，且二者在微观结构上相互依赖，因此其弹性模量在统计上相关。先前的纳米压痕研究表明，界面过渡区的模量通常为基体模量的 40–70%，并且与基体刚度呈强正相关 [23, 39]。因此，采用相关随机变量表述，以确保材料表征在物理上保持一致。

表 3：混凝土各相杨氏模量的统计参数和相关性假设

材料相	分布	均值（GPa）	变异系数 (%)	相关系数 (ρ)
花岗岩骨料	对数正态分布	60.0	17.5	–
水泥基体（浆体）	对数正态分布	27.5	22.5	含界面过渡区（ITZ）的 0.70
界面过渡区（ITZ）	对数正态分布	17.5	30.0	含基体的 0.70

此工程学示例旨在研究骨料、基体和界面过渡区（ITZ）的杨氏模量之间的相互作用及其对材料内部应力分布的影响。本示例尝试估算三种细观结构相（即骨料、基体和界面过渡区（ITZ）材料）中最大拉应力的第95百分位数：第一主应力 $\sigma_1^{95^{\text{th}}}$ ，骨料和 $\sigma^{95^{\text{th}}}{}_{,\text{Mx}}$ 和最大法向牵引力 $\sigma^{95^{\text{th}}}{}_{\text{SX}}$,ITZ。

为突出子空间投影的特性，我们从每种抽样方法得到的五维点样本中随机选取三维子空间。图 13 展示了对 $\sigma_1^{95^{\text{th}}}{}_{,\text{Agg}}$、$\sigma_1^{95^{\text{th}}}{}_{,\text{Mx}}$ 和 $\sigma^{95^{\text{th}}}{}_{\text{SX,ITZ}}$进行估计时均方根误差的下降情况。显然，与MaxPro 样本相比，使用uMaxPro 的优势十分明显。然而，受限于拉丁超立方体抽样结构，uMaxPro 的均方根误差下降斜率无法优于MaxPro、拉丁超立方体抽样，甚至简单随机抽样的样本。尽管随机化准蒙特卡罗 Halton 样本的均方根误差下降斜率本身更大，但其小样本均匀性较差，这一明显劣势在样本量相当大时便会消失。在工程应用中，通常需要尽量降低计算成本，因此样本量应尽可能小。由此，uMaxPro 样本在估计精度与计算时间之比方面具有明显优势。

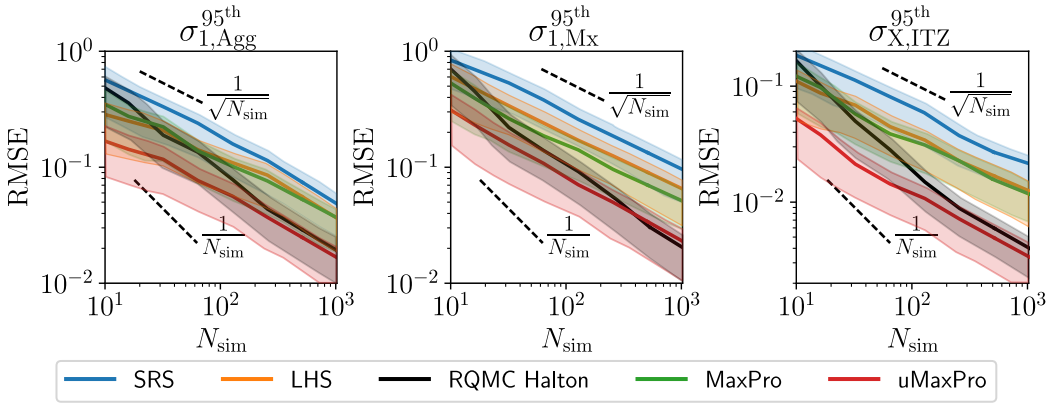


图13：分别在骨料、基体和界面过渡区相中达到的最大拉应力第95百分位数估计值的均方根误差。阴影带表示 ± 个标准差。

8. 结论

MaxPro 准则最初被提出作为一种样本优化方法，旨在不仅最大化整个设计域中的空间填充性质，还最大化所有因子子集中的空间填充性质。当只有部分因子处于活动状态时——这在实践中十分常见——这一特性尤为重要，尤其是在事先未知活动因子的情况下。在数值积分或函数逼近等应用中，既降低估计方差又确保结果无偏是非常理想的。

在本研究中，我们证明了原始的 MaxPro 准则即使与拉丁超立方抽样结合使用，也无法产生统计均匀的样本。它会系统性地过度抽样域边界，而对域角抽样不足。因此，这种不均匀性会导致数值积分中的估计偏差和缓慢收敛。此外，当这些不均匀样本被投影到低维子空间时，这种失衡会进一步加剧，从而进一步降低样本质量。

为解决这些问题，我们引入了周期变体——称为 uMaxPro——该方法采用基于最小镜像约定的周期性设计域。这一修改确保点样本以相同概率遍历域的所有区域，从而同时实现统计均匀性和优化的空间填充性质。因此，uMaxPro 能够以更低的方差实现无偏数值积分和筛选。事实上，我们的实验表明，在子空间中，uMaxPro 样本表现出色，甚至优于 Halton 序列。

除合成测试函数外，我们还通过两个源自结构力学的基准工程问题展示了uMaxPro的有效性：短柱的极限承载力和悬臂梁的位移。在这两种情况下，测试函数的维数都比优化设计少一维，因此对基于距离的抽样方法尤其具有挑战性。结果证实，在这些真实的工程情境中，uMaxPro 仍能保持其优越的投影性质，而标准设计无法对低维子空间进行控制。

总之，uMaxPro所采用的周期性修改，是对原始MaxPro准则的一项重要改进。它不仅实现了在函数积分和方差缩减方面表现优异这一预期目标，而且在具有挑战性的工程应用中也证明了其有效性；在这些应用中，低维主动子空间至关重要。

致谢

作者感谢捷克科学基金会通过项目 # GF22-06684K 提供的资金支持。用于构建优化设计的软件开发由欧盟通过 OP JAK 项目 INODIN (CZ.02.01.01/00/23_020/0008487) 资助。

数值计算在捷克共和国 IT4Innovations 国家超级计算中心完成，并由捷克共和国教育、青年与体育部通过 e-INFRA CZ（ID:90254）提供支持。

作者还感谢 Martin Voˇrechovský 协助实现用于生成所提出设计的软件。

9. 利益冲突

未声明任何利益冲突。

参考文献

[1] R. E. Caflisch. 蒙特卡罗与准蒙特卡罗方法。*Acta Numerica*, 7:1–49, 1998. DOI: 10.1017/S0962492900002804.[2] W. J. Conover. 关于一种更好的输入变量选择方法。未发表的洛斯阿拉莫斯国家实验室手稿，作为 J.C. Helton 和 F.J. Davis 所著《拉丁超立方抽样与复杂系统分析中的不确定性传播》的附录 A 重印，桑迪亚国家实验室报告 SAND2001-0417，1975。[3] H. Dette 和 A. Pepelyshev. 用于计算实验的广义拉丁超立方设计。《技术计量学》, 52(4): 421–429, 2010. DOI: 10.1198/TECH.2010.09157.[4] D. Dragulji´c、T. J. Santner 和 A. M. Dean. 有界非矩形区域的非塌缩空间填充设计。《技术计量学》, 54(2):169–178, 2012. ISSN 1537-2723. DOI: 10.1080/00401706.2012.676951. [5] M. S. Eldred 和 J. Burkardt. 用于不确定性量化的非侵入式多项式混沌方法与随机配置方法比较。载于第 *47* 届 *AIAA* 航空航天科学会议与展览论文集，第 123 卷，第 124 页，奥兰多，2009 年。美国航空航天学会。DOI: 10.2514/6.2009-976。

[6] M. S. Eldred、C. G. Webster 和 G. Constantine. Wiener-Askey广义多项式混沌非侵入式方法评估。载于《第 10 届 AIAA非确定性方法会议论文集》，第 117 卷，第 189 页，伊利诺伊州绍姆堡，2008 年。AIAA。DOI: 10.2514/6.2008-1892.[7] K.-T. Fang 和 C.-X. Ma. 随机抽样、拉丁超立方与均匀设计的环绕 L_2-偏差。《复杂性杂志》，17(4):608–624, 2001. ISSN 0885-064X. DOI: 10.1006/jcom.2001.0589.[8] G. S. Fishman.《蒙特卡罗：概念、算法与应用》。施普林格，纽约，1996. DOI: 10.1007/978-1-4757-2553-7.[9] J. M. Hammersley 和 D. C. Handscomb. 蒙特卡罗方法的一般原理。载于《蒙特卡罗方法》，第 50–75 页。施普林格，1964. DOI: 10.1007/978-94-009-5819-7.[10] F. J. Hickernell. 格点规则：其表现如何？载于 P. Hellekalek 和 G. Larcher 编，《随机与准随机点集》，章节“格点规则：其表现如何？”，第 109–166 页。施普林格纽约，纽约州纽约，1998. ISBN 978-1-4612-1702-2. DOI: 10.1007/978-1-4612-1702-2_3.[11] F. J. Hickernell. 广义偏差与求积误差界。《计算数学》，67(221):299–322, 1998. ISSN 1088-6842. DOI: 10.1090/S0025-5718-98-00894-1.[12] J. Jaeger、N. Cook 和 R. Zimmerman.《岩石力学基础》。Wiley-Blackwell，第 4 版，2007. ISBN 978-0-632-05759-7.[13] M. Johnson、L. Moore 和 D. Ylvisaker. 最小最大距离设计与最大最小准则距离设计。《统计规划与推断杂志》，2(26):131–148, 1990. ISSN 0378-3758. DOI: 10.1016/0378-3758(90)90122-B.[14] V. R. Joseph、E. Gul 和 S. Ba. 用于计算实验的最大投影设计。《生物统计学》，102(2):371–380, 2015. URL https://www.jstor.org/stable/43908541.[15] J. F. Koksma. 关于模 1 均匀分布理论中的一个一般定理。《Mathematica B》，11:7–11, 1942.[16] N. Kuschel 和 R. Rackwitz. 基于可靠性的结构优化中的两个基本问题。《运筹学数学方法》，46(3):309–333, 1997 年 10 月。ISSN 1432-5217. DOI: 10.1007/bf01194859. URL http://dx.doi.org/10.1007/BF01194859.[17] C. Lemieux.《蒙特卡罗与准蒙特卡罗抽样》。施普林格统计学丛书。施普林格，纽约，2009. DOI:10.1007/978-0-387-78165-5.[18] L. Liu 和 W. Wakeland. 均匀分布程度更高的抽样是否通常能提升计算机实验中的预测精度？载于《冬季仿真会议论文集》，2005 年，第 11 pp.–。IEEE，2005. DOI: 10.1109/WSC.2005.1574552.[19] J. Mašek 和 P. Miarka. 混凝土细观有限元模型：相异质性影响下固有应力集中的统计评估。arXiv 预印本 arXiv:2506.16242, 2025.[20] J. Mašek 和 M. Vo˘rechovský. 分层样本平铺。《工程软件进展》，189:103593, 2024. ISSN 0965-9978. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2024.103593.[21] M. D. McKay、W. J. Conover 和 R. J. Beckman. 在计算机代码输出分析中选择输入变量取值的三种方法比较。《技术计量学》，21:239–245, 1979. DOI: 10.1080/00401706.1979.10489755.[22] N. Metropolis 和 S. Ulam. 蒙特卡罗方法。《美国统计学会杂志》，44(247):335–341, 1949.[23] P. Mondal、S. P. Shah 和 L. Marks. 一种用于确定水泥基材料纳米尺度局部力学性能的可靠技术。《水泥与混凝土研究》，37(10):1440–1444, 2007 年 10 月。ISSN 0008-8846. DOI: 10.1016/j.cemconres.2007.07.001. URL http://dx.doi.org/10.1016/j.cemconres.2007.07.001.[24] H. Moon、A. Dean 和 T. Santner. 生成极大极小拉丁超立方设计与正交设计的算法。《统计理论与实践杂志》，5(1):81–98, 2011. ISSN 1559-8616. DOI: 10.1080/15598608.2011.10412052.[25] M. D. Morris 和 T. J. Mitchell. 计算实验的探索性设计。《统计规划与推断杂志》，43(3):381–402, 1995. ISSN 0378-3758. DOI: 10.1016/0378-3758(94)00035-T。

[26] H. Niederreiter。《随机数生成与准蒙特卡罗方法》。CBMS-NSF 应用数学区域会议系列。工业与应用数学学会，费城，宾夕法尼亚州，1992。ISBN 978-0- 898712-957。DOI: 10.1137/1.9781611970082.[27] A. B. Owen。光滑函数积分的扰乱网方差。《统计年鉴》，25(4):1541–1562，1997。ISSN 00905364。DOI: 10.1214/aos/1031594731.[28] L. Pronzato。最小最大距离设计和极大极小空间填充设计：若干性质及构造方法。法国统计学会期刊，158(1):7–36，2017。ISSN 2102-6238。URL https://hal.science/hal-01496712.[29] R. Y. Rubinstein 和 D. P. Kroese。《模拟与蒙特卡罗方法》。威利，霍博肯，新泽西州，第3版，2017。DOI:10.1002/9781118631980.[30] K. L. Scrivener、A. K. Crumbie 和 P. Laugesen。混凝土中水泥浆体与骨料之间的界面过渡区（ITZ）。《界面科学》，12(4):411–421，2004。DOI: 10.1023/B:INTS.0000042339.92990.4c.[31] S. Surjanovic 和 D. Bingham。仿真实验虚拟图书馆：测试函数与数据集。网页，2025。URL https://www.sfu.ca/~ssurjano/index.html。访问日期：2025-09-11。[32] B. Tang。基于正交表的拉丁超立方体。《美国统计学会杂志》，88(424):1392–1397，1993。ISSN 1537-274X。DOI: 10.1080/01621459.1993.10476423.[33] M. Voˇrechovský 和 J. Eliáš。对最大最小准则和 ϕ_p (phi) 准则的修改，以实现采样点的统计均匀分布。《技术计量学》，62(3):371–386，2020。DOI: 10.1080/00401706.2019.1639550.[34] M. Voˇrechovský 和 J. Mašek。超立方体中的基于距离的最优采样：高维低饱和度设计的能量势。《工程软件进展》，149:102880，2020。ISSN 0965-9978。DOI: 10.1016/j.advengsoft.2020.102880.[35] M. Voˇrechovský 和 D. Novák。小样本蒙特卡罗型模拟中的相关性控制 I：模拟退火方法。《概率工程力学》，24(3):452–462，2009。ISSN 0266-8920。DOI: 10.1016/j.probengmech.2009.01.004.[36] M. Voˇrechovský、J. Mašek 和 J. Eliáš。超立方体中的基于距离的最优采样：与N体系统的类比。《工程软件进展》，137:102709，2019。ISSN 0965-9978。DOI: 10.1016/j.advengsoft.2019.102709.[37] M. Voˇrechovský 和 J. Mašek。均匀最大投影设计，2025。URL https://zenodo.org/doi/10.5281/zenodo.15058298。可从 Zenodo代码仓库获取。[38] M. Voˇrechovský 和 M. Voˇrechovský。uMaxPro：用于（均匀）最大投影设计的 Python 库，2025。URL https://zenodo.org/doi/10.5281/zenodo.15036025。可从 Zenodo代码仓库获取。[39] X. Wang、S. Dong、Z. Li、B. Han 和 J. Ou。纳米工程混凝土界面过渡区的纳米力学特性。《工程学》，17:99–109，2022。ISSN 2095-8099。DOI: 10.1016/j.eng.2020.08.025.[40] Y.-T. Wu、Y. Shin、R. Sues 和 M. Cesare。基于安全系数的方法在基于概率的设计优化中的应用。载于第19届AIAA应用空气动力学会议。美国航空航天学会，2001。DOI: 10.2514/6.2001-1522。URL http://dx.doi.org/10.2514/6.2001-1522。