文章编号:1671-4229(2022)04-0080-07

q分量二阶混料中心多项式模型V-最优设计

马景文[1],张崇岐[2*]
(1.兰州财经大学 统计学院,甘肃 兰州 730030;2.广州大学 经济与统计学院,广东 广州 510006)

摘 要:在混料试验设计与最优设计的研究中,对于常用最优准则的研究,理论已趋于成熟,且一般模型的D-最优设计和A-最优设计都已经研究得比较透彻。而对V-最优设计的研究相对较少,它的意义是回归方程预测方差在整个试验区域上平均值达到最小,主要的难点在于对整个试验区域上的积分。文章讨论了q分量二阶混料中心多项式模型的V-最优设计,为了得到该最优设计所对应的测度,主要运用分块矩阵的乘法运算、逆运算以及回归方程预测方差的积分运算。根据V最优准则,给出了相对应的条件极小值问题的目标函数,使用Lagrange乘子法并结合软件mathematica获得了该问题V-最优观测频数的一般解析表达式。最后利用软件mathematica得到了$q=3$时该二阶单纯形中心设计具体的V最优配置。

关键词:V-最优设计;中心多项式模型;mathematica
中图分类号:O 212.6 **文献标志码**:A

V-optimal designs for mixture central polynomial model of q-component second-degree

MA Jing-wen[1], *ZHANG Chong-qi*[2]
(1. School of Statistics, Lanzhou University of Finance and Economics, Lanzhou 730030, China;
2. School of Economics and Statistics, Guangzhou University, Guangzhou 510006, China)

Abstract: In the study of mixture experimental design and optimal design, for the research on common optimal criteria, the theory has become mature. And, the D-optimal design and A-optimal design of the general model have been studied thoroughly. However, there are relatively few V-optimal studies. Its significance is that the average value of the regression equation prediction variance reaches the minimum of the whole experimental area. Its main difficulty lies in the integration of the entire test area. This paper discusses the V-optimal design of the q-component second-order mixture center polynomial model. In order to obtain the measure corresponding to the optimal design, the multiplication operation, the inverse operation of the block matrix and the integral operation of the regression equation prediction variance are mainly used. According to the V-optimal criterion, the objective function of the corresponding conditional minima problem is given, and the general analytical expression of the V-optimal observation frequency of the problem is obtained by using the Lagrange multiplier method and the software mathematica. Finally, the software mathematica is used to obtain the specific V optimal configuration of the second-order simplex-center design when $q=3$.

Key words: V-optimal designs; central polynomial model; mathematica

收稿日期:2021-12-15;**修回日期**:2022-03-15
基金项目:国家自然科学基金资助项目(12071096)
作者简介:马景文(1997—),女,硕士研究生. E-mail:2047943585@qq.com
* 通信作者. E-mail:cqzhang@gzhu.edu.cn
引文格式:马景文,张崇岐. q分量二阶混料中心多项式模型V-最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版),2022,21(4):80-86.

0　引　言

混料试验设计是一种常见的、较特殊的涉及多因素的试验设计方法。在日常生产生活及科学实验中,很多产品的制造混合了多种成份。生产者或试验者常对产品的几种感兴趣的特性展开研究,这些特性往往与产品成份所占总量的比例之间存在函数关系,而不受混料总量的影响。混料问题的可控变量,即每种成份在混料总量中所占的百分比,是不能任意变化的,要受某些约束的限制。这些百分比必须都是非负的,而且相加之和必须是 1[1]。在 q 分量混料试验模型中,用 $E(Y)$ 表示试验指标或响应值,$x_1,x_2,\cdots,x_q$ 表示混料系统中 q 种成分各占的百分比,则混料试验设计就是要在满足约束条件

$$\begin{cases} 0 \leqslant x_i \leqslant 1,\ i = 1,2,\cdots,q \\ \sum_{i=1}^{q} x_i = 1, i = 1,2,\cdots,q \end{cases} \tag{1}$$

的限制下进行试验,并由此定义了一个 $q-1$ 维正规单纯形试验区域

$$S_{q-1} = \left\{ x:(x_1,x_2,\cdots,x_q) \mid \sum_{i=1}^{q} x_i = 1,\ x_i \geqslant 0; i = 1,2,\cdots q \right\} \tag{2}$$

在 Box 等[2]提出最优准则后,Laake[3]给出了积分方差达到最小的 V-最优设计,也称为 I_λ-最优设计。关颖男等[4]详细研究了二阶可加模型的 I_λ-最优。刘严[5]讨论了二阶 Scheffe 模型参数估计的 I_λ-最优设计。张小峰等[6]介绍了二阶随机变系数模型的 V-最优设计。基于此,本文将详细讨论 q 分量二阶中心多项式的 V-最优设计。

1　q 分量中心多项式

在试验设计中,每种试验设计方法是与一定的试验利益区域及数学模型相适应的。单纯形-格子设计的利益区域是整个的正规单纯形,其数学模型不是一般的多项式,而是混料规范多项式或者简称为 $\{q,m\}$ 多项式[7]。q 分量 m 阶多项式回归模型中各分量比例 $x_i(i=1,2,\cdots,q)$ 要受约束条件 $\sum_{i=1}^{q} x_i = 1\ (i = 1,2,\cdots,q)$ 的限制,因此,可以用恒等式 $x_1 + x_2 + \cdots + x_q = 1$ 来乘 m 阶完全型多项式的某些项,然后进行化简而得到适合于混料试验的回归模型。$\{q,m\}$ 多项式的项数是 C_{q+m+1}^{m},与相应的 $\{q,m\}$ 单纯形-格子设计的点数相同,当使用高阶混料规范多项式模型时,所需的试验点个数仍然很多。针对此缺点,Scheffé[8] 提出了单纯形-中心设计。单纯形-格子设计已是饱和设计,要进一步减少试验点数,就要从简化模型着手。同时,为了保持预测精度,又不能降低模型的阶数,可以删掉完全型多项式-混料规范多项式的某些项,而使保留的各项具有对称性。这样,可以采用以下特殊 q 阶多项式:

$$E(Y) = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \cdots + \beta_{1,2\cdots q} x_1 x_2 \cdots x_q = f^{\mathrm{T}}(x)\beta \tag{3}$$

其中,$x = [x_1,x_2,\cdots,x_q]^{\mathrm{T}}$,$f(x) = [x_1,x_2,\cdots,x_q, x_1x_2,x_1x_3,\cdots,x_{q-1}x_q,\cdots,x_1x_2\cdots x_q]^{\mathrm{T}}$,$\beta = [\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_q,\beta_{12},\beta_{13},\cdots,\beta_{q-1q},\cdots,\beta_{12\cdots q}]^{\mathrm{T}}$,因为多项式(3)是与单纯形中心设计联系在一起的,故把它称为 q 分量中心多项式。对于式(3),试验点安排在单纯形所有各类中心上,共有 2^q-1 个不同的试验点,分别是 $(1,0,\cdots,0)$ 的 q 个排列,$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0,\cdots,0)$ 的 C_q^2 个排列,$(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3},\cdots,0)$ 的 C_q^3 个排列,…,单纯形总体中心$(\frac{1}{q},\frac{1}{q},\cdots,\frac{1}{q})$,即全部分量的等比例混料。

本文将主要研究当 $m=2$ 时,正规单纯形上的 q 分量二阶中心多项式混料模型:

$$E(Y) = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j \tag{4}$$

2　V-最优设计

回归预测值 $\hat{y}(x)$ 的方差 $var(\hat{y}(x))$ 是利益区域上的点函数,即

$$var(\hat{y}(x)) = \xi(x)\delta^2 \tag{5}$$

这里 δ^2 是试验误差的方差[9]。对于不同的试验设计方案来说,$\xi(x)$ 在各个点 x 是不同的,可以把回归方程预测值方差在整个利益区域上的平均值作为衡量设计优良性的一种标准,它越小越好[10]。

设

$$W = \int\cdots\int var(\hat{y}(x))\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{q-1}$$

为整个单纯形区域上响应估计的积分方差。

对于模型(3),则

$$W = \int_{S_{q-1}} f^{\mathrm{T}}(x)M^{-1}f(x)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{q-1} = \int_{S_{q-1}} f^{\mathrm{T}}(x)(X^{\mathrm{T}}\Lambda X)^{-1}f(x)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{q-1} = \mathrm{tr}[(X^{\mathrm{T}}\Lambda X)^{-1}L] \tag{6}$$

这里,信息矩阵 $\boldsymbol{M}=X^{\mathrm{T}}\Lambda X$,设计矩阵 $\boldsymbol{X}=[f_1(x),f_2(x),\cdots,f_q(x)]^{\mathrm{T}}$,测度矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=diag(r_1I_{11},r_2I_{22},\cdots,r_qI_{qq})$,$\boldsymbol{I_{kk}}$为 $C_q^k\times C_q^k$ 阶单位阵,$f^{\mathrm{T}}(x)M^{-1}f(x)$ 为给定点 x 的响应估计的方差,$\boldsymbol{L}=\int_{S_{q-1}} f^{\mathrm{T}}(x)f(x)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{q-1}$。

使 W 在 $q-1$ 维正规单纯形试验区域 S_{q-1} 的平均值达极小值的设计称为 V-最优设计[11]。即

$$\mathrm{AVE}(var(\hat{y})) = \frac{\int_{S_{q-1}} f^{\mathrm{T}}(x)M^{-1}f(x)\,\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{q-1}}{\int_{S_{q-1}}\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{tr}[(X^{\mathrm{T}}\Lambda X)^{-1}L]}{\int_{S_{q-1}}\mathrm{d}x} = \frac{tr[M^{-1}L]}{\int_{S_{q-1}}\mathrm{d}x}$$

达极小值。这里,$\int_{S_{q-1}}\mathrm{d}x$ 为 $q-1$ 维单纯形的体积 $\int_{S_{q-1}}\mathrm{d}x=\frac{1}{\Gamma(q)}$,则

$$\mathrm{AVE}(var(\hat{y})) = \mathrm{tr}[M^{-1}B] \tag{7}$$

其中,$B=L\cdot\Gamma(q)$。

3 q分量二阶混料中心多项式V-最优设计

引理1[12] 对于混料试验区域 S_{q-1} 上的二阶中心多项式模型(4),响应估计的最优设计驻点是 S_{q-1} 上的各类中心点(顶点、中点和重心)。

引理2[13] 假设集合 $S_{q-1}=\{x:(x_1,x_2,\cdots,x_q)\mid\sum_{i=1}^{q}x_i=1,x_i\geqslant 0,i=1,2,\cdots,q\}$,则对 $\forall p_i>0$,有

$$\int_{S_{q-1}} x_1^{p_1}x_2^{p_2}\cdots x_q^{p_q}\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1} = \frac{\prod_{i=1}^{q}\Gamma(p_i+1)}{\Gamma(q+\sum_{i=1}^{q}p_i)}。$$

设 r_1, r_2 分别表示 S_{q-1} 上每个顶点及两顶点中心的测度,满足 $C_q^1r_1+C_q^2r_2=1$。

对模型(4)采用单纯形中心设计,对应的设计矩阵 $\boldsymbol{X}$ 见表1。

表1 单纯形中心设计的设计矩阵 $\boldsymbol{X}$

Table 1 Design matrix $\boldsymbol{X}$ for simple center design

N_0	x_1	x_2	x_3	…	x_{q-1}	x_q	x_1x_2	x_1x_3	…	$x_{q-1}x_q$
1	1	0	0	…	0	0	0	0	…	0
2	0	1	0	…	0	0	0	0	…	0
⋮	…	…	⋮	…	…	…	…	⋮	…	
q	0	0	0	…	0	1	0	0	…	0
C_q^1+1	1/2	1/2	0	…	0	0	1/4	0	…	0
C_q^1+2	1/2	0	1/2	…	0	0	0	1/4	…	0
⋮	…	…	…	⋮	…	…	…	…	⋮	…
C_{q+1}^2	0	0	0	…	1/2	1/2	0	0	…	1/4

它可分块为 $\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} I_q & 0_{\alpha_{12}} \\ \frac{1}{2}M_{\alpha_{21}} & \frac{1}{4}I_m \end{bmatrix}$,其中,$\boldsymbol{I_q}$ 为 q 阶单位阵,$\boldsymbol{0}_{a_{ij}}$为 $C_q^i\times C_q^j$ 阶零矩阵,$\boldsymbol{M_{\alpha_{ij}}}$为 $C_q^i\times C_q^j$ 阶的 0-1 矩阵。其第一行的前 i 个元素为1,其余行是第一行元素按字典顺序的全排列,$\boldsymbol{I_m}$ 是 C_q^2 阶单位阵。测度矩阵记为 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{\xi})=\begin{bmatrix} r_1I_q & 0 \\ 0 & r_2I_m \end{bmatrix}$,则该模型所对应的信息矩阵 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\xi})$ 为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\xi})=X^{\mathrm{T}}D(\xi)X=\begin{bmatrix} r_1I_q+\frac{r_2}{4}M_{\alpha_{21}}{}^{\mathrm{T}}M_{\alpha_{21}} & \frac{r_2}{8}M_{\alpha_{21}}{}^{\mathrm{T}} \\ \frac{r_2}{8}M_{\alpha_{21}} & \frac{r_2}{16}I_m \end{bmatrix}。$$

引理3[6] 设高阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解成4小块 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$,其中,$\boldsymbol{A}_{11}$及 $\boldsymbol{A}_{22}$都是方阵,且 $\boldsymbol{A}_{22}{}^{-1}$存在,则

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\begin{pmatrix}\widetilde{A}^{-1} & -\widetilde{A}^{-1}A_{12}A_{22}{}^{-1}\\ -A_{22}{}^{-1}A_{21}\widetilde{A}^{-1} & A_{22}{}^{-1}+A_{22}{}^{-1}A_{21}\widetilde{A}^{-1}A_{12}A_{22}{}^{-1}\end{pmatrix},$$

这里 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=A_{11}-A_{12}A_{22}{}^{-1}A_{21}$。

利用引理 3 矩阵反演公式,求出信息矩阵 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\xi})$ 的逆为

$$\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi})=\begin{pmatrix}\dfrac{1}{r_1}I_q & -\dfrac{2}{r_1}M_{\alpha_{21}}{}^{\mathrm{T}}\\ -\dfrac{2}{r_1}M_{\alpha_{21}} & \dfrac{16}{r_2}I_m+\dfrac{4}{r_1}M_{\alpha_{21}}M_{\alpha_{21}}{}^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}。$$

又可知

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}
x_1^2 & x_1x_2 & x_1x_3 & \cdots & x_1x_q & x_1^2x_2 & x_1^2x_3 & \cdots & x_1x_{q-1}x_q\\
x_2x_1 & x_2^2 & x_2x_3 & \cdots & x_2x_q & x_2^2x_1 & x_2x_1x_3 & \cdots & x_2x_{q-1}x_q\\
x_3x_1 & x_3x_2 & x_3^2 & \cdots & x_3x_q & x_3x_1x_2 & x_3^2x_1 & \cdots & x_3x_{q-1}x_q\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
x_qx_1 & x_qx_2 & x_qx_3 & \cdots & x_q^2 & x_qx_1x_2 & x_qx_1x_3 & \cdots & x_q^2x_{q-1}\\
x_1^2x_2 & x_2^2x_1 & x_3x_1x_2 & \cdots & x_qx_1x_2 & x_1^2x_2^2 & x_1^2x_2x_3 & \cdots & x_1x_2x_{q-1}x_q\\
x_1^2x_3 & x_2x_1x_3 & x_3^2x_1 & \cdots & x_qx_1x_3 & x_1^2x_2x_3 & x_1^2x_3^2 & \cdots & x_1x_3x_{q-1}x_q\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
x_1x_{q-1}x_q & x_2x_{q-1}x_q & x_3x_{q-1}x_q & \cdots & x_q^2x_{q-1} & x_1x_2x_{q-1}x_q & x_1x_3x_{q-1}x_q & \cdots & x_q^2x_{q-1}^2
\end{bmatrix},$$

则根据引理 3 可计算:

$$\int x_1^2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\int x_2^2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\cdots=\int x_q^2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\frac{2}{(q+1)!};$$

$$\int x_1x_2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\cdots=\int x_{q-1}x_q\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\frac{1}{(q+1)!};$$

$$\int x_1^2x_2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\cdots=\int x_{q-1}^2x_q\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\frac{2}{(q+2)!};$$

$$\int x_1x_2x_3\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\cdots=\int x_{q-2}x_{q-1}x_q\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\frac{1}{(q+2)!};$$

$$\int x_1^2x_2^2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\cdots=\int x_{q-1}^2x_q^2\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\frac{4}{(q+3)!};$$

$$\int x_1x_2x_{q-1}x_q\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\cdots=\int x_{q-3}x_{q-2}x_{q-1}x_q\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{q-1}=\frac{1}{(q+3)!}。$$

因此,矩阵 $\boldsymbol{L}$ 可写为

$$\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}
\dfrac{2}{(q+1!)} & \dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+1!)} & \cdots & \dfrac{1}{(q+1!)} & \dfrac{2}{(q+2)!} & \dfrac{2}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+2)!}\\
\dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{2}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+1)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{2}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+2)!}\\
\dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{2}{(q+1)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{2}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+2)!}\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
\dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+1)!} & \cdots & \dfrac{2}{(q+1)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{2}{(q+2)!}\\
\dfrac{2}{(q+2)!} & \dfrac{2}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{4}{(q+3)!} & \dfrac{2}{(q+3)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+3)!}\\
\dfrac{2}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{2}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{2}{(q+3)!} & \dfrac{4}{q+3!} & \cdots & \dfrac{1}{(q+3)!}\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
\dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+2)!} & \cdots & \dfrac{2}{(q+2)!} & \dfrac{1}{(q+3)!} & \dfrac{1}{(q+3)!} & \cdots & \dfrac{4}{(q+3)!}
\end{bmatrix},$$

其可分块为

$$\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix} \frac{1}{(q+1)!}(I_q+J_{\alpha_{11}}) & \frac{1}{(q+2)!}(M_{\alpha_{12}}+J_{\alpha_{12}}) \\ \frac{1}{(q+2)!}(M_{\alpha_{21}}+J_{\alpha_{21}}) & \frac{1}{(q+3)!}(2I_m+M_{\alpha_{22}}+J_{\alpha_{22}}) \end{bmatrix},$$

这里,$\boldsymbol{J}_{\alpha_{ij}}$为$C_q^i\times C_q^j$阶元素全为1的矩阵,$\boldsymbol{M}_{\alpha_{ij}}$为$C_q^i\times C_q^j$阶0-1矩阵,其第一行的前两个元素为1,其余行是第一行按字典顺序的全排列。

$$\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix} \frac{1}{(q+2)!\ r_1}A & \frac{1}{(q+3)!\ r_1}B \\ \frac{1}{(q+2)!\ r_1}C_1+\frac{16}{(q+2)!\ r_2}C_2 & \frac{1}{(q+3)!\ r_1}D_1+\frac{16}{(q+3)!\ r_2}D_2 \end{bmatrix},$$

其中,

$A=3(2-q)I_q+qJ_{\alpha_{11}}-2M_{\alpha21}^{\mathrm{T}}J_{\alpha_{11}}$,

$B=(q-1)M_{\alpha_{12}}+(q+3)J_{\alpha_{12}}-2M_{\alpha21}^{\mathrm{T}}M_{\alpha_{22}}-2M_{\alpha21}^{\mathrm{T}}J_{\alpha_{22}}$,

$C_1=2(q-6)M_{\alpha_{21}}+4(q-2)J_{\alpha_{21}}+4J_{\alpha_{11}}M_{\alpha21}^{\mathrm{T}}+4J_{\alpha_{11}}J_{\alpha21}^{\mathrm{T}}-2(q+2)M_{\alpha_{21}}J_{\alpha_{21}}$,

$C_2=M_{\alpha_{21}}+J_{\alpha_{21}}$,

$D_1=-(q+3)M_{\alpha_{21}}M_{\alpha_{12}}-M_{\alpha_{21}}J_{\alpha_{12}}+4(q-2)\cdot(2I_m+M_{\alpha_{22}}+J_{\alpha_{22}})+2J_{\alpha_{22}}+J_{\alpha_{22}}M_{\alpha_{22}}+J_{\alpha_{22}}^{\mathrm{T}}J_{\alpha_{22}}$,

$D_2=2I_m+M_{\alpha_{22}}+J_{\alpha_{22}}$。

则矩阵$\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{L}$的迹为

$$tr(M^{-1}(\xi)L)=\left[\frac{2}{(q+1)!r_1}+\frac{2}{(q+2)!}\cdot(-\frac{2}{r_2})\times2\right]\cdot q+\left\{\left[(-\frac{2}{r_1}\cdot\frac{2}{(q+2)!})\times2+\left[\frac{16}{r_2}+\frac{4(q-1)}{r_1}\right]\cdot\frac{4}{(q+3)!}+\frac{4}{r_1}\cdot\frac{1}{(q+3)!}\cdot\frac{(q-2)(q-3)}{2}\right]\right\}\cdot q=\frac{2q}{(q+2)!}\left[\frac{1}{r_1}(4q^2-7q-14)+\frac{1}{r_2}\frac{32}{q+3}\right]。$$

这样,V-最优准则下q分量二阶混料中心多项式模型的最优设计所对应的测度应是条件极小值问题

$$\begin{cases}\min\limits_{S_{q-1}} tr(M^{-1}(\xi)L)=\min\dfrac{2q}{(q+2)!}\cdot\left[\dfrac{1}{r_1}(4q^2-7q-14)+\dfrac{1}{r_2}\dfrac{32}{q+3}\right] \\ qr_1+C_q^2r_2=1\end{cases}\tag{8}$$

的解。利用拉格朗日乘子法,令

$$G(r_1,r_2,\lambda)=\frac{2q}{(q+2)!}\left[\frac{1}{r_1}(4q^2-7q-14)+\frac{1}{r_2}\frac{32}{q+3}\right]+\lambda(qr_1+C_q^2r_2-1),$$

对r_1, r_2, λ求偏导,并令$\frac{\partial G}{\partial r_1}=0$, $\frac{\partial G}{\partial r_2}=0$, $\frac{\partial G}{\partial\lambda}=0$,则可得

$$\begin{cases}\dfrac{\partial G}{\partial r_1}=-\dfrac{1}{r_1^2}\dfrac{2q}{(q+2)!}(4q^2-7q-14)+q\lambda=0 \\ \dfrac{\partial G}{\partial r_2}=-\dfrac{1}{r_1^2}\dfrac{64q}{(q+3)!}+\dfrac{q(q-1)}{2}\lambda=0 \\ \dfrac{\partial G}{\partial\lambda}=qr_1+C_q^2r_2-1=0\end{cases}\tag{9}$$

结合mathematica解方程组(9),可得模型(4)的V-最优观测频数的一般表达式为

$$\begin{cases}r_1^*=\dfrac{1}{2q}\left(2+\dfrac{32q^2-64q^3+32q^4}{26q^2+25q^3-56q^4+q^5+4q^6}+\dfrac{8q\sqrt{42q^2-7q^3-40q^4+q^5+4q^6}}{26q^2+25q^3-56q^4+q^5+4q^6}-\dfrac{8q^2\sqrt{42q^2-7q^3-40q^4+q^5+4q^6}}{26q^2+25q^3-56q^4+q^5+4q^6}\right) \\ r_2^*=\dfrac{8(4q-4q^2+\sqrt{42q^2-7q^3-40q^4+q^5+4q^6})}{26q^2+25q^3-56q^4+q^5+4q^6}\end{cases}。$$

4 实 例

下面考察当$q=3$时模型(4)的V-最优设计。

对于模型(4)当$q=3$对应设计矩阵$\boldsymbol{X}$为$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} I_3 & 0_{12} \\ \frac{1}{2}M_0 & \frac{1}{4}I_3 \end{bmatrix}$,其中,$\boldsymbol{M}_0=\begin{bmatrix}1&1&0\\1&0&1\\0&1&1\end{bmatrix}$,对应测度矩阵为$\boldsymbol{diag}(\boldsymbol{\xi})=\begin{pmatrix} r_1I_3 & 0 \\ 0 & r_2I_3 \end{pmatrix}$,其中,$r_1$、$r_2$满足$3r_1+3r_2=1$。信息矩阵$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\xi})=\begin{bmatrix} r_1I_3 & \frac{r_2}{4}M_0^{\mathrm{T}}M_0 \\ \frac{r_2}{8}M_0 & \frac{r_2}{16}I_3 \end{bmatrix}$,则易求得信息矩阵的逆$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\xi})$以及该模型所对应的矩阵$\boldsymbol{L}$:

$$\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi})=\begin{bmatrix}
\frac{1}{r_1} & 0 & 0 & -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} & 0\\
0 & \frac{1}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1}\\
0 & 0 & \frac{1}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1}\\
-\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} & 0 & \frac{16}{r_2}+\frac{8}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{4}{r_1}\\
-\frac{2}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{16}{r_2}+\frac{8}{r_1} & \frac{4}{r_1}\\
0 & -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{16}{r_2}+\frac{8}{r_1}
\end{bmatrix},\quad
\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}
\frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120}\\
\frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60}\\
\frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60}\\
\frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{180} & \frac{1}{360} & \frac{1}{360}\\
\frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{360} & \frac{1}{180} & \frac{1}{360}\\
\frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{360} & \frac{1}{360} & \frac{1}{180}
\end{bmatrix},$$

则矩阵 $\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{L}$ 为

$$\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}
\frac{1}{60r_1} & -\frac{1}{120r_1} & -\frac{1}{120r_1} & 0 & 0 & -\frac{1}{360r_1}\\
-\frac{1}{120r_1} & \frac{1}{60r_1} & -\frac{1}{120r_1} & 0 & -\frac{1}{360r_1} & 0\\
-\frac{1}{120r_1} & -\frac{1}{120r_1} & \frac{1}{60r_1} & -\frac{1}{360r_1} & 0 & 0\\
-\frac{1}{60r_1}+\frac{4}{15r_2} & -\frac{1}{60r_1}+\frac{4}{15r_2} & \frac{1}{30r_1}+\frac{2}{15r_2} & \frac{4}{45r_2} & \frac{1}{180r_1}+\frac{2}{45r_2} & \frac{1}{180r_1}+\frac{2}{45r_2}\\
-\frac{1}{60r_1}+\frac{4}{15r_2} & \frac{1}{30r_1}+\frac{2}{15r_2} & -\frac{1}{60r_1}+\frac{4}{15r_2} & \frac{1}{180r_1}+\frac{2}{45r_2} & \frac{4}{45r_2} & \frac{1}{180r_1}+\frac{2}{45r_2}\\
\frac{1}{30r_1}+\frac{2}{15r_2} & -\frac{1}{60r_1}+\frac{4}{15r_2} & -\frac{1}{60r_1}+\frac{4}{15r_2} & \frac{1}{180r_1}+\frac{2}{45r_2} & \frac{1}{180r_1}+\frac{2}{45r_2} & \frac{4}{45r_2}
\end{bmatrix}。$$

这样由 V-最优设计准则就可得如下条件极小值问题:

$$\begin{cases}\min\limits_{S_{q-1}} tr(M^{-1}(\xi)L)=\min\dfrac{1}{20r_1}+\dfrac{4}{15r_2}\\ 3r_1+3r_2=1\end{cases}。$$

结合 mathematica 利用拉格朗日乘子法可得到结果:

$r_1\to 0.100\ 723\ 159\ 750\ 654\ 081$,

$r_2\to 0.232\ 610\ 173\ 582\ 679\ 252$。

因此,三分量二阶中心多项式模型的 V-最优配置为

$$\begin{cases}r_1^*=0.100\ 723\ 159\ 750\ 654\ 081\\ r_2^*=0.232\ 610\ 173\ 582\ 679\ 252\end{cases}。$$

5　结　论

单纯形-中心设计的最优配置问题归结为在某种最优标准下选择各类设计点的最优配置比 $r_1:r_2:\cdots:r_m$。本文主要讨论了 q 分量二阶混料中心多项式的 V-最优配置,这类低价多项式模型能够较好地近似表示响应曲面,比高阶多项式使用起来方便,并且在多数情况下至多使用二阶多项式模型就足够了。因此,本文的研究是很有必要的。在本文的研究过程中主要使用了分块矩阵运算、拉格朗日乘子法以及软件 mathematica,这使得对于模型的 V-最优设计变得相对容易,也启发笔者在之后相关混料试验最优设计的研究中,要善于应用已有数学知识、优化算法以及各类软件。

参考文献:

[1] Peter G, Bradley J, Utami S. I-Optimal design of mixture experiments[J]. Journal of the American Statistical Association, 2016, 111(514): 899-911.

[2] Box G E P, Draper N R. A basis for the selection of a response surface design[J]. Journal of the American Statistical Association, 1959, 54(287): 622-654.

[3] Laake P. On the optimal allocation of observations in experiment with mixture[J]. Scandinavian Journal of Statistics, 1975, 2(3): 153-157.

[4] 关颖男,张崇岐. 二阶可加混料模型参数估计的 I_λ -最优设计[J]. 应用数学学报,1994,17(2):161-172.

[5] 刘严. 二阶 Scheffe 模型参数估计的 I_λ -最优设计[J]. 沈阳电力高等专科学校学报,1999,1(3):36-39.

[6] 张小峰,张崇岐. 随机变系数混料试验模型的 V-最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版),2016,15(1):27-31.

[7] 刘双喆. 关于广义单纯形中心设计的 I_λ -最优性[J]. 烟台大学学报(自然科学与工程版),1992,5(4):21-22.

[8] Scheffé H. The simplex-centroid design for experiments with Mixtures[J]. Journal of the Royal Statistical Society, 1963, 25(2): 235-263.

[9] 朱小渊,郝红花,张崇岐. 缺失项二阶混料模型 I 最优设计[J]. 高校应用数学学报 A 辑,2019,34(4):379-388.

[10] Liu S Z, Heinz N. A V-optimal design for Scheffe polynomial model[J]. Statistics and Probability Letters, 1995, 23(3): 253-258.

[11] 关颖男. 广义单纯形中心设计的 I_λ -最优观测配置[J]. 应用概率统计,1988,4(2):157-162.

[12] 关颖男. 混料试验设计[M]. 上海:上海科学技术出版社,1990.

[13] DeGroot M H. Optimal statistical decisions[M]. New Jersey: John Wiley & Sons, 2004.

【责任编辑:周 全】

(上接第52页)

参考文献:

[1] Alfardan N J, Paterson K G. Lucky thirteen: Breaking the tls and dtls record protocols[C]//2013 IEEE Symposium on Security and Privacy. Piscataway: IEEE, 2013: 526-540.

[2] Alfardan N, Bernstein D J, Paterson K G, et al. On the security of rc4 in TLS[C]//22nd USENIX Security Symposium (USENIX Security 13). Washington: USENIX Association, 2013: 305-320.

[3] Dobrauning C, Eichiseder M, Mendel F, et al. Ascon v1.2:Lightweight authenticated encryption and hashing[J]. Journal of Cryptology, 2021, 34(3): 33.

[4] Beyne T, Chen Y L, Dobraunig C, et al. Dumbo, jumbo, and delirium: Parallel authenticated encryption for the lightweight circus[J]. IACR Transactions on Symmetric Cryptology, 2020, 4(51): 5-30.

[5] Zhou H, Zong R, Dong X, et al. Interpolation attacks on round-reduced Elephant, Kravatte and Xoofff[J]. The Computer Journal, 2021, 64(4): 628-638.

[6] Lai X. Higher order derivatives and differential cryptanalysis[C]// Communications and Crytography. Berlin: Springer, 1994: 227-233.

[7] Dinur I, Shamir A. Cube attacks on tweakable black box polynomials[C]// Advance in Cryptology-EUROCRYPT 2009, 28th Annual International Conference on the Theory and Applications of Cryptographic Techniques. Berlin: Springer, 2009: 278-299.

[8] Dinur I, Liu Y, Meier W, et al. Optimized interpolation attacks on lowmc[C]// Advance in Cryptology-ASIACRYPT 2015, 21st International Conference on the Theory and Application of Cryptology and Information Security. Berlin: Springer, 2015: 535-560.

[9] Jakobsen T, Knudsen L R. The interpolation attack on block ciphers[C]// Fast Software Encryption 1997, Berlin: Springer, 1997: 28-40.

[10] Chaigneau C, Fuhr T, Gilbert H, et al. Key-recovery attacks on full kravatte[J]. IACR Transactions on Symmetric Cryptology, 2018, 10(1): 5-28.

【责任编辑:陈 钢】