文章编号:1671-4229(2021)02-0031-04

一类非线性混料指数模型及其最优设计

陈嘉丽,张崇岐*
(广州大学 经济与统计学院,广东 广州 510006)

摘 要:非线性混料模型是混料模型中研究甚少但却有广泛实际应用意义的一类模型. 与以往根据经验法则取得设计点不同的是,文章基于一类非线性混料指数模型,通过优化函数 fmincon 搜索出二分量混料指数模型的 D-最优设计,并用等价性定理证明该设计的 D-最优性.

关键词:非线性;混料指数模型;D-最优设计
中图分类号:O 212.6 **文献标志码**:A

Nonlinear mixture exponential model and its optimal design

CHEN Jia-li, *ZHANG Chong-qi**
(School of Economics and Statistics, Guangzhou University, Guangzhou 510006, China)

Abstract: Nonlinear mixture model is a kind of mixture model which is rarely studied but has wide practical significance. Different from the previous design points obtained according to the rule of thumb, based on a kind of nonlinear mixture exponential model, this paper searches for the D-optimal design of a two-component mixture exponential model through the optimization function fmincon, and verifies the D-optimality of the design with equivalence theorem.

Key words: nonlinearity; mixture exponential model; D-optimal design

0 引 言

混料试验设计[1-3]被广泛应用于食品加工、化工、医药、农业等行业,越来越受到大家的关注. 怎样保证估计量在精确性方面具有某种优良性质并且使试验成本较低,从而更有效地选取设计点,是混料试验设计的研究范畴. 目前的混料试验设计多是建立在线性模型上,如 Fedorov[4]、Cornell[5]、Mandal 等[6]和 Sinha 等[7],这些模型可以用 q 变量系统的 q 阶多项式模型来表示[8-9]:

$$\eta = \sum_{i=1}^{q}\beta_i x_i + \sum_{i\leqslant j}\beta_{ij}x_i x_j + \sum_{i\leqslant j\leqslant k}\beta_{ijk}x_i x_j x_k + \cdots + \beta_{12\cdots q}x_1 x_2\cdots x_q,$$

其中 $x_i(i=1,2,\cdots,q)$ 满足 $\sum_{i=1}^{q}x_i=1$,通常将这类多项式模型统称为线性混料模型.

目前学者对线性混料模型研究甚多,研究手法较为成熟. 但实际应用中很多问题用线性模型去拟合总存在一定误差. 因此,对非线性混料模型[10-11]的最优设计问题进行研究十分必要. 由于非线性混料模型信息矩阵的逆求解过于复杂,从而衍生出的一种方法是将原本的非线性模型进行泰勒展开,使其转化成常见的幂函数的线性模型. 此做法本质上解决的仍是线性问题,难免会产生一定的误差,因此,有必要对非线性混料模型进行更为深入的探讨. 2012年朱志彬等[12]基于 becker 模型提出了非线性分式混料模型,并研究了二分

基金项目:国家自然科学基金资助项目(12071096)
作者简介:陈嘉丽(1994—),女,硕士研究生. E-mail:2112064104@e.gzhu.edu.cn
*通信作者. E-mail:cqzhang@gzhu.edu.cn
引文格式:陈嘉丽,张崇岐. 一类非线性混料指数模型及其最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版),2021,20(2):31-34.

量模型的D-最优设计. 2015年张崇岐等[13]提出了一类含常数项的混料指数模型，并直接在单纯形格子点上研究了模型的D-最优设计. 本文提出一类特殊的混料指数模型，通过在试验域内多次迭代得到模型的D-最优设计,并用等价定理来证明该设计的D-最优性.

1 模型构造

实际生活中很多产品都是由多种物质混合制作而成的,如面包、药品和饮料等. 不同成分之间占比的变化将会影响最终产品的质量. 为了生产出质量更佳的产品,得到最优的配料比例,减少成本,需要寻找最优混料试验设计.

假设某产品有 q 种成分,它们在生产中的比例分别为 $x_1,\cdots,x_q$,显然 $x_1\geqslant 0,\cdots,x_q\geqslant 0$,且 $x_1+\cdots+x_q=1$. 故混料的试验区域为

$$S^{q-1}=\{(x_1,\cdots,x_q)\mid x_i\geqslant 0,i=1,\cdots,q,x_1+\cdots+x_q=1\}.$$

考虑一般的线性回归模型,其基本形式为

$$y=\beta^{\mathrm{T}}f(x)+\varepsilon,$$

其中,y 是响应变量,ε 是随机误差,$\beta=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_k)^{\mathrm{T}}$ 是 k 维未知参数向量,$f(x)=(f_1(x),f_2(x),\cdots,f_k(x))^{\mathrm{T}}$ 为已知的关于设计点 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_q)\in S^{q-1}$的实值函数向量. 一般假设

$$E(\varepsilon)=0,\ Var(\varepsilon)=\delta^2.$$

与线性回归模型不同的是,非线性回归模型 $G(x,\beta)$ 的一般表达式如下:

$$y=G(x,\beta)+\varepsilon.$$

目前国内对非线性混料模型的研究较少,常见的非线性混料模型包括非线性混料指数模型和非线性分式可加混料模型,其中以非线性混料指数模型更为常见.

现考虑二分量非线性混料指数模型

$$\eta=\beta_1x_1+\beta_2\mathrm{e}^{\alpha x_2}+\varepsilon \tag{1}$$

其中,η 是响应变量,β_1,β_2 和 α 是待估参数,ε 是均值为0、方差为 σ^2 的随机误差,$x_1+x_2=1$. 不失一般性,本文考虑当 $\alpha=1$ 时的情况:

$$\eta=\beta_1x_1+\beta_2\mathrm{e}^{x_2}+\varepsilon \tag{2}$$

就模型(2)讨论它的D-最优性,显然模型具有两个未知参数,因此,必须找到一个两点设计使其满足D-最优性. 设在试验区域X中的一个设计 ξ 为

$$\xi=\begin{pmatrix}\mathrm{x}_1 & \mathrm{x}_2\\ \lambda_1 & \lambda_2\end{pmatrix},$$

其中,$\mathrm{x}_1=(x_{11},x_{12})$,$\mathrm{x}_2=(x_{21},x_{22})$ 为不同的支撑点,$0\leqslant\lambda_1,\ \lambda_2\leqslant 1,\ \lambda_1+\lambda_2=1$. 记 $f(x)=(x_1,\mathrm{e}^{x_2}))^{\mathrm{T}}$.

设计 ξ 所对应的信息矩阵 $\boldsymbol{M}(\xi)$ 为

$$\boldsymbol{M}(\xi)=\sum_{i=1}^{2}\lambda_i f(x_i)f^{\mathrm{T}}(x_i),$$

且与模型 η 相对应的方差函数为

$$d(x,\xi)=f^{\mathrm{T}}(x)M^{-1}(\xi)f(x).$$

在混料试验设计中,若存在设计 ξ^* 使得信息矩阵的 $\boldsymbol{M}(\xi)$ 的行列式最大化,即

$$|\boldsymbol{M}(\xi^*)|=\max|\boldsymbol{M}(\xi)|,$$

称 ξ^* 为D-最优设计.

由等价定理可知,对连续回归模型与紧致空间而言,ξ^* 称为模型 η 的D-最优设计当且仅当 ξ^* 满足

$$\max_X d(x,\xi^*)=q.$$

2 主要结果

根据D-最优准则可知,D-最优设计是最小化 $|\boldsymbol{M}^{-1}(\xi)|$ 或最大化 $|\boldsymbol{M}(\xi)|$ 的设计. 首先计算出模型(2)在设计 ξ 下的信息矩阵

$$\boldsymbol{M}(\xi)=\begin{pmatrix}x_{11} & x_{21}\\ \mathrm{e}^{x_{12}} & \mathrm{e}^{x_{22}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_{11} & \mathrm{e}^{x_{12}}\\ x_{21} & \mathrm{e}^{x_{22}}\end{pmatrix}=$$

$$\begin{pmatrix}\lambda_1x_{11} & \lambda_2x_{21}\\ \lambda_1\mathrm{e}^{x_{12}} & \lambda_2\mathrm{e}^{x_{22}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_{11} & \mathrm{e}^{x_{12}}\\ x_{21} & \mathrm{e}^{x_{22}}\end{pmatrix}=$$

$$\begin{pmatrix}\lambda_1x_{11}^2+\lambda_2x_{21}^2 & \lambda_1x_{11}\mathrm{e}^{x_{12}}+\lambda_2x_{21}\mathrm{e}^{x_{22}}\\ \lambda_1x_{11}\mathrm{e}^{x_{12}}+\lambda_2x_{21}\mathrm{e}^{x_{22}} & \lambda_1\mathrm{e}^{2x_{12}}+\lambda_2\mathrm{e}^{2x_{22}}\end{pmatrix}.$$

其次,计算设计 ξ 在模型(2)下的信息矩阵行列式

$$|\boldsymbol{M}(\xi)|=\begin{vmatrix}\lambda_1x_{11}^2+\lambda_2x_{21}^2 & \lambda_1x_{11}\mathrm{e}^{x_{12}}+\lambda_2x_{21}\mathrm{e}^{x_{22}}\\ \lambda_1x_{11}\mathrm{e}^{x_{12}}+\lambda_2x_{21}\mathrm{e}^{x_{22}} & \lambda_1\mathrm{e}^{2x_{12}}+\lambda_2\mathrm{e}^{2x_{22}}\end{vmatrix}=$$

$$(\lambda_1x_{11}^2+\lambda_2x_{21}^2)\times(\lambda_1\mathrm{e}^{2x_{12}}+\lambda_2\mathrm{e}^{2x_{22}})-(\lambda_1x_{11}\mathrm{e}^{x_{12}}+\lambda_2x_{21}\mathrm{e}^{x_{22}})^2=$$

$$\lambda_1^2x_{11}^2\mathrm{e}^{2x_{12}}+\lambda_1\lambda_2x_{11}^2\mathrm{e}^{2x_{22}}+\lambda_1\lambda_2x_{21}^2\mathrm{e}^{2x_{12}}+\lambda_2^2x_{21}^2\mathrm{e}^{2x_{22}}-\lambda_1x_{11}^2\mathrm{e}^{2x_{12}}-2\lambda_1\lambda_2x_{11}x_{21}\mathrm{e}^{x_{12}+x_{22}}-\lambda_2^2x_{21}^2\mathrm{e}^{2x_{22}}=$$

$$\lambda_1\lambda_2(x_{11}^2\mathrm{e}^{2x_{22}}-2x_{11}x_{21}\mathrm{e}^{x_{12}+x_{22}}+x_{21}^2\mathrm{e}^{2x_{12}})=(\lambda_1\lambda_2)(x_{11}\mathrm{e}^{x_{22}}-x_{21}\mathrm{e}^{x_{12}})^2.$$

由约束条件 $\lambda_1+\lambda_2=1$ 进一步可得

$$|M(\xi)| = (\lambda_1 - \lambda_1^2)(x_{11}e^{x_{22}} - x_{21}e^{x_{12}})^2,$$

因此有

$$\max(|M(\xi)|) = \max(\lambda_1 - \lambda_1^2) * \max(x_{11}e^{x_{22}} - x_{21}e^{x_{12}})^2.$$

其中,$0 < \lambda_1 < 1$,易知当 $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$ 时,$\max(x_1 - \lambda_1^2) = 1/4$. 然而求 $\max(x_{11}e^{x_{22}} - x_{21}e^{x_{12}})^2$ 就可以转化为方程 $f(x_1, x_2) = (x_{11}e^{x_{22}} - x_{21}e^{x_{12}})^2$ 的有约束的非线性规划问题. 为避免局部最小的影响,根据 MATLAB 中的优化函数 fmincon,使用默认的内点法,随机产生 10 组初始值进行计算,得到结果如表 1.

表 1　$f(x_1, x_2)$ 函数的 10 组不同初始值计算结果

Table 1　The result of ten different initial values of the function $f(x_1, x_2)$

初始值 (x_{11}, x_{21})	$(x_{11}e^{x_{22}} - x_{21}e^{x_{12}})^2$	迭代次数	最终值 (x_{11}, x_{21})
(0.2,0.3)	1	18	(0,1)
(0.5,0.7)	1	19	(0,1)
(0.1,0.6)	1	15	(0,1)
(0.3,0.9)	1	17	(0,1)
(0.4,0.8)	1	17	(0,1)
(0.2,0.7)	1	12	(0,1)
(0.0,0.3)	1	18	(0,1)
(0.8,0.9)	1	14	(0,1)
(0.6,1.0)	1	22	(0,1)
(0.5,0.9)	1	19	(0,1)

从表 1 可以知道,10 组不同初始值对应的最终值都是(0,1),且 $(x_{11}e^{x_{22}} - x_{21}e^{x_{12}})^2 = 1$,迭代次数在 20 次左右,显然另一设计点为(1,0).

此外,根据方程 $f(x_1, x_2) = (x_1e^{x_2} - x_2e^{x_1})^2$,在区域 $0 \leqslant x_1 \leqslant 1, 0 \leqslant x_2 \leqslant 1$,用 MATLAB 画出对应的三维立体图形,从图 1 中也可以得到在(0,1)和(1,0)时,$\max((x_1e^{x_2} - x_2e^{x_1})^2) = 1$.

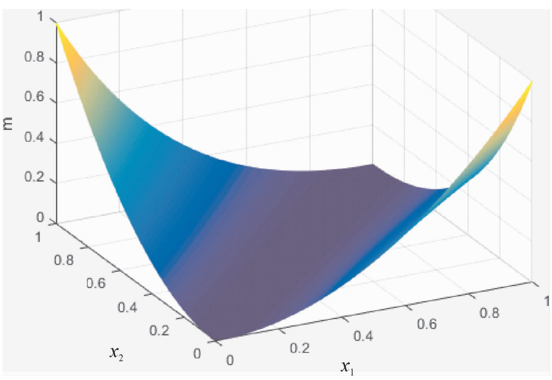

图 1　$f(x_1, x_2)$ 函数的三维图

Fig. 1　The three-dimensional graph of the function $f(x_1, x_2)$

由此可以得到模型(2)的 D-最优设计

$$\xi^* = \begin{pmatrix} (0,1) & (1,0) \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}.$$

对于模型(2),证明所得的设计 ξ^* 是设计域上的 D-最优设计. 该设计的信息矩阵 $\boldsymbol{M}(\xi)$ 与它的逆 $\boldsymbol{M}^{-1}(\xi)$

$$\boldsymbol{M}(\xi) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}e^2 + \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{M}^{-1}(\xi) = \begin{pmatrix} 2 + \frac{2}{e^2} & -\frac{2}{e^2} \\ -\frac{2}{e^2} & \frac{2}{e^2} \end{pmatrix}.$$

由此可得方差函数

$$d(x;\xi^*) = f^{\mathrm{T}}(x)\boldsymbol{M}^{-1}(\xi)f(x) = (x_1 \quad e^{x_2})\boldsymbol{M}^{-1}(\xi)\begin{pmatrix} x_1 \\ e^{x_2} \end{pmatrix} = \frac{2}{e^2}(e^{2x_2} - 2x_1e^{x_2} + x_1^2 + x_1^2e^2) = 2\left(e^{-2x_1} - 2x_1e^{-1-x_1} + x_1^2 + \frac{x_1^2}{e^2}\right),$$

其中,$0 \leqslant x_1, x_2 \leqslant 1, x_1 + x_2 = 1$,通过 MATLAB 画出 $d(x;\xi^*)$ 在区间[0,1]范围的曲线图,如图 2.

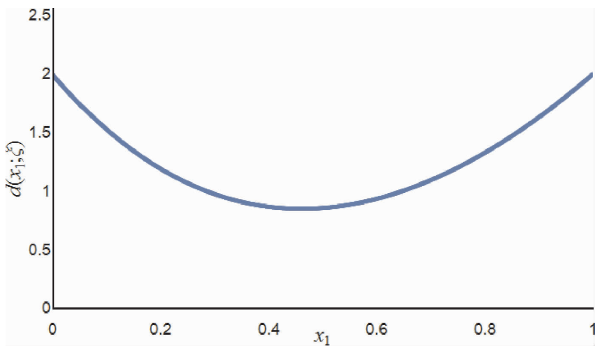

图 2　$d(x;\xi^*)$ 的曲线图

Fig. 2　The curve graph of $d(x;\xi^*)$

从图 2 可以看出 $d(x;\xi^*)$ 在区间[0,1]内的值都小于等于 2(模型 1 有 2 个未知参数),而且只有当 $x_1 = 0$ 和 $x_1 = 1$ 时,$d(x;\xi^*) = 2$,由此可以证明 $\xi^* = \begin{pmatrix} (0,1) & (1,0) \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$ 是模型(2)的 D-最优设计.

3　结束语

在各种不同的混料模型中,非线性混料模型

因其在实际生活中存在广泛的应用价值而成为当前研究热点. 由于该模型计算非常复杂,算法效率低,没有一套相对完善的理论,因此,需要进一步的深入研究. 本文以二分量非线性混料指数模型为基础,通过多次迭代得到该模型的D-最优设计,并用等价定理来证明该设计的D-最优性. 在未来的研究中,可以考虑对更高阶的非线性混料指数模型的最优设计问题做出进一步探讨.

参考文献:

[1] 李光辉,李俊鹏,张崇岐.单纯形体积公式的一个注记[J].数学的实践与认识,2020,50(19):221-227.
[2] 李卫霞,张崇岐.不确定性响应混料模型的最优设计[J].数学的实践与认识,2020,50(6):182-189.
[3] 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.
[4] Fedorov V V. Theory of optimal experiments[M]. New York: Academic Press, 1972.
[5] Cornell J A. Experiments with mixtures[M]. 3rd ed. New York:Wiley,2002.
[6] Mandal N K,Pal M. Optimum mixture design using deficiency criterion[J]. Communication in Statistics:Theory & Methods, 2008, 37(37):1565-1575.
[7] Sinha B K, Mandal N K, Pal M, et al. Optimal mixture experiments[M]. Kolkata: Springer India, 2014.
[8] 关颖男,佟毅. 塌落的单纯型-中心设计及其D-最优性[J]. 工程数学学报,2000,17(3):36-42.
[9] 关颖男,薛海玲. Becker齐次模型参数估计的D-最优设计[J]. 东北大学学报(自然科学版),1998,19(6):93-96.
[10] 韦博成,胡跃清. 非线性回归模型相关性和异方差性的检验[J]. 工程数学学报, 1994,11(4):1-12.
[11] 谢五三,冯予. 指数族非线性模型的试验设计[J]. 淮北煤炭师范学院学报(自然科学版),2006,27(4):8-13.
[12] 朱志彬,张崇岐.非线性分式可加混料模型及其最优设计[J].广州大学学报(自然科学版),2012,11(3):24-26.
[13] 张崇岐,陈博照.一类混料指数模型的D-最优设计[J].广州大学学报(自然科学版),2015,14(4):1-3.

【责任编辑: 周　全】

(上接第27页)

[9] Xu S, Li H, Miao Y, et al. Implementation of half adder and half subtractor with a simple and universal DNA-based platform[J]. NPG Asia Materials, 2013, 5(12): e76.
[10] Chao J, Wang J, Wang F, et al. Solving mazes with single-molecule DNA navigators[J]. Nature Materials, 2019, 18(3): 273-279.
[11] 唐震, 殷志祥, 崔建中, 等. DNA折纸术在一类特殊的整数规划问题中的应用[J]. 计算机工程与应用, 2019, 55(16): 49-54.
[12] Tang Z, Yin Z, Sun X, et al. Dynamically NAND gate system on DNA origami template[J]. Computers in Biology and Medicine, 2019, 109: 112-120.
[13] 王林林. 基于混沌的密码算法设计与研究[D]. 大连:大连理工大学, 2010.
[14] 贾嫣, 张萍, 陈蕾. 基于改进混沌映射的图像加密算法[J]. 计算机工程与设计, 2015, 36(5): 1187-1191.
[15] 严利民, 葛雨阳, 石磊. 混沌映射和流密码结合的图像加密算法仿真[J]. 计算机仿真, 2020, 37(3): 264-269.
[16] 蔡敏, 尚钦明, 孟晓燕. 基于混沌时间序列的图像加密算法设计与实现[J]. 现代电子技术, 2021, 44(5): 47-51.
[17] 曾祥秋, 叶瑞松. 基于改进的Logistic映射的混沌图像加密算法[J]. 计算机工程, 2021, doi:10.19678/j.issn.1000-3428.0059928.
[18] Wang X Y, Zhang H L, Bao X M. Color image encryption scheme using CML and DNA sequence operations[J]. Biosystems, 2016, 144: 18-26.
[19] 孙倩, 胡苏. 基于DNA编码与统计信息优化的图像加密算法[J]. 计算机应用研究, 2017, 34(9): 2799-2803.
[20] 朱凯歌, 武相军, 任广龙. 基于DNA动态编码和混沌系统的彩色图像无损加密算法[J]. 计算机应用研究, 2020, 37(S2): 230-233.

【责任编辑: 陈　钢】