

文章编号:1671-4229(2024)05-0048-06

# 混料指数衰减模型的局部 $R$ -最优设计

许秀钿<sup>1</sup>, 李俊鹏<sup>2</sup>, 张崇岐<sup>1\*</sup>

(1. 广州大学 经济与统计学院, 广东 广州 510006; 2. 凯里学院 理学院, 贵州 凯里 556011)

**摘要:** 混料指数衰减模型在药物动力学和化学动力学中发挥着重要作用。不同于以往根据 Taylor 展开转化为线性模型进行研究的方法, 文章基于  $R$ -最优设计的理论, 运用非线性优化方法、盛金公式以及内点法等, 推导出两衰减参数相等时该模型下的  $R$ -最优设计, 同时给出了两衰减参数不等时  $R$ -最优设计的算法, 并通过等价性定理验证了导出的设计是  $R$ -最优的。

**关键词:**  $R$ -最优设计; 混料试验设计; 指数衰减模型; 盛金公式; 内点法

中图分类号: O212.6 文献标志码: A

## Local $R$ -optimal design for a mixture exponential decay model

XU Xiu-tian<sup>1</sup>, LI Jun-peng<sup>2</sup>, ZHANG Chong-qi<sup>1\*</sup>

(1. School of Economics and Statistics, Guangzhou University, Guangzhou 510006, China;

2. School of Science, Kaili University, Kaili 556011, China)

**Abstract:** The mixture exponential decay model plays an important role in pharmacokinetics and chemical kinetics. Different from the previous research method which was transformed into a linear model according to Taylor's development, based on the theory of  $R$ -optimal design, this paper uses a nonlinear optimization method, Shengjin formula and interior point method to deduce  $R$ -optimal design under the model when the two decay parameters are equal. Meanwhile, the  $R$ -optimal design algorithm is given when the two decay parameters are unequal. It is verified by the equivalence theorem that the derived design is  $R$ -optimal.

**Key words:**  $R$ -optimal design; mixture experiment design; exponential decay model; Shengjin formula; interior point method

## 0 引言

混料试验设计<sup>[1]</sup>是一种研究多个成分混合物配比的试验设计方法, 它可以用来生产良性数据, 被广泛应用于医药、化工、金融等领域。为评估各种试验设计的好坏, 研究者提出了一些最优设计的概念。其中, Dette<sup>[2]</sup>提出的  $R$ -最优设计不仅具有良好的统计解释, 还具备一个非常实用的不变

性特征, 这一特征使得在各种线性变换的设计空间中轻松地计算出最优设计成为可能。 $R$ -最优设计的概念涉及信息矩阵逆的求解。对于非线性模型<sup>[3-8]</sup>来说, 一方面, 其信息矩阵依赖于模型的未知参数, 要获得该模型下的最优设计是不易的; 另一方面, 通过 Taylor 展开变成常见的线性模型来得到信息矩阵的逆<sup>[9]</sup>, 但在实际问题中难免会产生误差。因此, 深入研究具体的非线性模型的最优设计是必要的。

收稿日期: 2023-07-07; 修回日期: 2023-11-30

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(12071096); 凯里学院课题(Z1803)

作者简介: 许秀钿(1998—), 女, 硕士研究生. E-mail: xuxiutian00@163.com

\*通信作者. E-mail: cqzhang@gzhu.edu.cn

引文格式: 许秀钿, 李俊鹏, 张崇岐. 混料指数衰减模型的局部  $R$ -最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版), 2024, 23(5): 48-53.

指数衰减模型是较为常见的一类非线性模型,在药物动力学和化学动力学中发挥着重要的作用<sup>[10]</sup>。如公式(1),该模型可以用来描述和预测物质的消失速率和作用时间,以及计算半衰期和反应速率常数等关键参数。

$$\eta_i = \alpha e^{-\lambda x_i}, i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

其中,  $\eta_i$  表示在点  $x_i$  处的响应均值。目前,已有学者研究了该模型的局部  $D$ -、 $c$ -、 $E$ -最优设计<sup>[8-11]</sup>等,但其局部  $R$ -最优设计的讨论还较为空白。对于混料试验设计中指数模型的研究,张崇岐等<sup>[3]</sup>将单纯形各类中心点作为设计点,求解出一类含常数项 2 分量一阶混料指数模型的  $D$ -最优设计;陈博照等<sup>[4]</sup>将该研究推广到  $A$ -最优设计;李俊鹏等<sup>[7]</sup>在此基础上研究了  $q$  分量二阶指数混料模型的  $A$ -最优设计的一般形式。本文考虑的混料指数衰减模型是模型(1)在混料系统的延伸,可表示为

$$\eta_i = \sum_{j=1}^q \alpha_j e^{-\lambda_j x_{ij}}, i = 1, \dots, n. \quad (2)$$

当前研究的混料指数模型大多是基于  $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_q = 1$  的情况,然而,在实际应用中,该情况很少见。基于此,本文主要讨论的是指数衰减参数  $\lambda_j = c > 0, j = 1, 2, \dots, q$  以及指数衰减参数  $\lambda_j = c_j > 0, j = 1, 2, \dots, q$  不全相等的局部  $R$ -最优设计。具体安排如下:第 1 节介绍混料试验设计以及指数衰减模型的相关理论;第 2 节讨论混料指数模型在两种情形下获取局部  $R$ -最优设计的方法;第 3 节总结并给出未来可以进一步研究的方向。

## 1 预备知识

在  $q$  分量混料试验设计中,一个具有  $n$  个支撑点的设计可表示为

$$\xi_n = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & \dots & X_n \\ w_1 & w_2 & \dots & w_n \end{pmatrix} \in \Xi,$$

其中,  $\Xi$  表示所有设计组成的集合,权重满足

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1, 0 \leq w_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, n, \quad (3)$$

第  $i$  个设计点  $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iq})^T$  满足

$$\sum_{j=1}^q x_{ij} = 1, 0 \leq x_{ij} \leq 1, i = 1, 2, \dots, n. \quad (4)$$

不失一般性,本文考虑 2 分量一阶混料指数衰减模型:

$$\eta_i = \alpha_1 e^{-\lambda_1 x_{i1}} + \alpha_2 e^{-\lambda_2 x_{i2}}, i = 1, 2, \dots, n, \quad (5)$$

其中,  $\lambda_1 = c_1$  及  $\lambda_2 = c_2$  均是大于 0 的衰减参数,  $\alpha_1, \alpha_2$  是未知参数,

$$f(X) = \frac{\partial \eta_i}{\partial (\alpha_1, \alpha_2)^T} = (e^{-c_1 x_1}, e^{-c_2 x_2})^T \quad (6)$$

是模型(5)对应的函数向量。对于混料最优设计问题,一般采用饱和设计,即设计点个数等于未知参数个数<sup>[7]</sup>。由于该模型有两个未知参数,故其饱和设计为 2 点设计,即

$$\xi_2 = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{12} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} x_{21} \\ x_{22} \end{pmatrix} \\ w_1 & w_2 \end{pmatrix}.$$

由 Fedorov<sup>[12]</sup> 给出的 Fisher 信息矩阵的定义可知,模型(5)在设计  $\xi_n$  下的信息矩阵为

$$M(\xi_n) = \int_{\mathcal{X}} f(X) f^T(X) \xi_n(dX) = \sum_{i=1}^n w_i f(X_i) f^T(X_i). \quad (7)$$

Dette<sup>[2]</sup> 定义的  $R$ -最优设计  $\xi_n^*$  是使信息矩阵的逆的对角线元素乘积达到最小的设计,即

$$\xi_n^* = \arg \min_{\xi_n \in \Xi} \Phi_R(\xi_n),$$

其中,

$$\Phi_R(\xi_n) = \prod_i (M^{-1}(\xi_n))_{ii}. \quad (8)$$

在 Dette 研究的基础上,He 等<sup>[13]</sup> 给出非线性回归模型  $R$ -最优设计的等价性定理,即对于非线性回归模型,设计  $\xi_n^*$  为  $R$ -最优设计,当且仅当

$$\sum_{i=1}^p \frac{e_i^T M^{-1}(\xi_n^*) f(X) f^T(X) M^{-1}(\xi_n^*) e_i}{e_i^T M^{-1}(\xi_n^*) e_i} \leq p,$$

其中,  $p$  为信息矩阵  $M(\xi_n^*)$  的维数。于是,对于任意  $\xi \in \Xi$ , 令判定函数

$$\phi(X, \xi) = \sum_i \frac{(M^{-1}(\xi) f(X) f^T(X) M^{-1}(\xi))_{ii}}{(M^{-1}(\xi))_{ii}}, \quad (9)$$

若  $\phi(X, \xi_n^*) \leq p$ , 则设计  $\xi_n^*$  为  $R$ -最优设计。

## 2 局部 $R$ -最优设计

由式(7)知,模型(5)的信息矩阵依赖于衰减参数  $c_1$  和  $c_2$ , 为此本节主要讨论参数在  $c_1 = c_2 = c > 0$  和  $c_1 \neq c_2, c_1 > 0, c_2 > 0$  的情况下,模型(5)的  $R$ -最优设计问题。

2.1 两衰减参数  $c_1 = c_2 = c$ 

由式(7)可计算得到此时的信息矩阵为

$$\mathbf{M}(\xi_2) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i1}} & e^{-c} \\ e^{-c} & \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i2}} \end{pmatrix} \circ$$

根据矩阵的逆矩阵计算方法,首先,可以得到该信息矩阵的行列式为

$$\begin{aligned} \det \mathbf{M}(\xi_2) &= \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i1}} \cdot \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i2}} - e^{-2c} = \\ &= (w_1^2 + w_2^2 - 1)e^{-2c} + w_1 w_2 (e^{-2c(x_{12}+x_{21})} + e^{-2c(x_{11}+x_{22})}) = \\ &= w_1 w_2 (e^{-2c(x_{12}+x_{21})} + e^{-2c(x_{11}+x_{22})}) - 2e^{-2c} = \\ &= w_1 w_2 (e^{-c(x_{12}+x_{21})} - e^{-c(x_{11}+x_{22})})^2 = w_1 w_2 a, \end{aligned} \quad (10)$$

其中,

$$a = (e^{-c(x_{12}+x_{21})} - e^{-c(x_{11}+x_{22})})^2. \quad (11)$$

又该信息矩阵的伴随矩阵为

$$\mathbf{M}^*(\xi_2) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i2}} & -e^{-c} \\ -e^{-c} & \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i1}} \end{pmatrix} \circ \quad (12)$$

由式(8)可得  $R$ -最优的准则函数

$$\begin{aligned} \Phi_R(\xi_2) &= \prod_{i=1}^2 ((\det \mathbf{M}(\xi_2))^{-1} \mathbf{M}^*(\xi_2))_{ii} = \\ &= (\det \mathbf{M}(\xi_2))^{-2} \cdot \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i1}} \cdot \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2cx_{i2}} = \\ &= \frac{(w_1^2 + w_2^2)e^{-2c} + w_1 w_2 (e^{-2c(x_{12}+x_{21})} + e^{-2c(x_{11}+x_{22})})}{(\det \mathbf{M}(\xi_2))^2} = \\ &= \frac{w_1 w_2 a + e^{-2c}}{w_1^2 w_2^2 a^2}. \end{aligned}$$

由式(3)可知,  $w_2 = 1 - w_1$ , 要使  $\Phi_R(\xi)$  达到最小, 等价于使

$$g(w_1) = \frac{w_1(1-w_1)a + e^{-2c}}{w_1^2(1-w_1)^2 a^2}$$

达到最小。于是令

$$g'(w_1) = \frac{-2aw_1^3 + 3aw_1^2 + (4e^{-2c} - a)w_1 - 2e^{-2c}}{w_1^3(1-w_1)^3 a^2} = 0,$$

即令

$$-2aw_1^3 + 3aw_1^2 + (4e^{-2c} - a)w_1 - 2e^{-2c} = 0. \quad (13)$$

这是一个关于  $w_1$  的一元三次方程, 盛金公式<sup>[14]</sup>是实系数一元三次方程的一种辅助算法, 适用范围广且准确高效。由盛金公式的结论可知,

对于方程

$$a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4 = 0, \quad (14)$$

称重根判别式为

$$\begin{cases} A = a_2^2 - 3a_1 a_3, \\ B = a_2 a_3 - 9a_1 a_4, \\ C = a_3^2 - 3a_2 a_4, \end{cases}$$

总判别式为

$$\Delta = B^2 - 4AC.$$

若  $\Delta < 0$  且  $A > 0$ , 则方程(14)有3个不相等的实数根, 分别为

$$\begin{cases} x_1 = \frac{-a_2 - 2\sqrt{A}\cos\frac{\theta}{3}}{3a_1}, \\ x_2 = \frac{-a_2 + \sqrt{A}\left(\cos\frac{\theta}{3} + \sqrt{3}\sin\frac{\theta}{3}\right)}{3a_1}, \\ x_3 = \frac{-a_2 + \sqrt{A}\left(\cos\frac{\theta}{3} - \sqrt{3}\sin\frac{\theta}{3}\right)}{3a_1}, \end{cases}$$

其中,

$$T = \frac{2Aa_2 - 3a_1 B}{2A^{3/2}} = 0,$$

$$\theta = \arccos T.$$

接下来用盛金公式计算  $w_1$ 。首先计算方程(13)的重根判别式:

$$\begin{cases} A = (3a)^2 - 3 \cdot (-2a) \cdot (4e^{-2c} - a) = \\ \quad 3a(a + 8e^{-2c}) > 0, \\ B = 3a \cdot (4e^{-2c} - a) - 9 \cdot (-2a) \cdot (-2e^{-2c}) = \\ \quad -A, \\ C = (4e^{-2c} - a)^2 - 3 \cdot 3a \cdot (-2e^{-2c}) = \\ \quad a^2 + 10ae^{-2c} + 16e^{-4c}, \end{cases}$$

于是总判别式:

$$\Delta = B^2 - 4AC = -3a(a + 8e^{-2c})^3 \leq 0.$$

当且仅当  $a = 0$ , 即  $x_{11} = x_{21}$  时,  $\Delta = 0$ 。此时为单点设计, 与一开始所考虑的2点设计相冲突, 暂不考虑。所以,  $\Delta < 0$ , 进而由盛金公式, 有

$$T = \frac{2 \cdot A \cdot 3a - 3 \cdot (-2a) \cdot B}{2A^{3/2}} = 0,$$

$$\theta = \arccos T = \frac{\pi}{2},$$

$$\begin{aligned} w_1^{(1)} &= \frac{-3a - 2\sqrt{3a(a + 8e^{-2c})}\cos\theta}{3 \cdot (-2a)} = \\ &= \frac{a + \sqrt{a(a + 8e^{-2c})}}{2a} > 1, \end{aligned}$$

$$w_1^{(2)} = \frac{-3a + \sqrt{3a(a + 8e^{-2c})} \left( \cos \frac{\theta}{3} + \sqrt{3} \sin \frac{\theta}{3} \right)}{3 \cdot (-2a)} =$$

$$\frac{a - \sqrt{a(a + 8e^{-2c})}}{2a} < 0,$$

$$w_1^{(3)} = \frac{-3a + \sqrt{3a(a + 8e^{-2c})} \left( \cos \frac{\theta}{3} - \sqrt{3} \sin \frac{\theta}{3} \right)}{3 \cdot (-2a)} =$$

$$\frac{1}{2} \circ$$

由式(3), 可把  $w_1^{(1)}$  以及  $w_1^{(2)}$  舍去。又由于当  $g'(w_1) = 0$  时, 有

$$g''\left(\frac{1}{2}\right) =$$

$$\frac{(-6Aw_1^2 + 6Aw_1 + 4e^{-2c} - A) \cdot w_1^3(1 - w_1)^3 A^2}{w_1^6(1 - w_1)^6 A^4} \Big|_{w_1 = \frac{1}{2}} =$$

$$\frac{256e^{-2c} + 32A}{A^2} > 0.$$

所以,  $w_1 = \frac{1}{2}$  是  $g(w_1)$  的极小值点。因此,  $w_1 = w_2 = \frac{1}{2}$  是模型(5)的R-最优设计权重, 此时要求

$$\min_{\xi_2 \in \Xi} \Phi_R(\xi_2) = \frac{4a + 16e^{-2c}}{a^2}$$

等价于求优化问题:

$$\min_{x_{11}, x_{21} \in [0, 1]} h(x_{11}, x_{21}) =$$

$$\frac{4(e^{-c(1-x_{11}+x_{21})} - e^{-c(x_{11}+1-x_{21})})^2 + 16e^{-2c}}{(e^{-c(1-x_{11}+x_{21})} - e^{-c(x_{11}+1-x_{21})})^4} \circ$$

MATLAB 中的 fmincon 函数可以处理多种类型的优化问题, 具有良好的收敛性。通过这个函数默认的内点法, 取 10 组不同的  $c$  值, 随机产生

100 组不同的初始值进行计算, 取其中  $h(x_{11}, x_{21})$  最小对应的各个指标的值, 结果如表 1 所示, 所有得出的最优解都收敛。

表 1  $h(x_{11}, x_{21})$  函数的不同初始值计算结果  
Table 1 Calculation results of different initial values of function  $h(x_{11}, x_{21})$

$c$	$h(x_{11}, x_{21})$	平均迭代次数	最终值 $(x_{11}, x_{21})$	$\phi(X, \xi_2^*)$
0.1	12 255	8.10	(1, 0)	2
0.5	46.88	9.20	(1, 0)	2
0.8	14.24	9.07	(1, 0)	2
1.0	9.22	9.60	(1, 0)	2
1.3	6.29	9.37	(1, 0)	2
1.5	5.41	8.66	(1, 0)	2
2.0	4.47	9.05	(1, 0)	2
5.0	4.00	9.68	(1, 0)	2
10.0	4.00	15.35	(1, 0)	2
100.0	4.00	16.90	(1, 0)	2

从表 1 中可以看出, 由这 10 组不同的  $c$  值计算得到的  $h(x_{11}, x_{21})$  最小值随着  $c$  值的增加逐渐减小, 但设计的支撑点始终保持不变, 当  $c$  值大于 5 时,  $h(x_{11}, x_{21})$  值基本为 4。平均迭代次数在 10 次左右, 最后导出的设计点均为 (0, 1) 和 (1, 0), 即模型的 R-最优设计为

$$\xi_2^* = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}.$$

不失一般性, 当  $c = 1$  时的  $h(x_{11}, x_{21})$  函数三维图如图 1 所示。从图 1 中也可看出, 目标函数  $h(x_{11}, x_{21})$  在 (0, 1) 和 (1, 0) 两点处取得最小值。

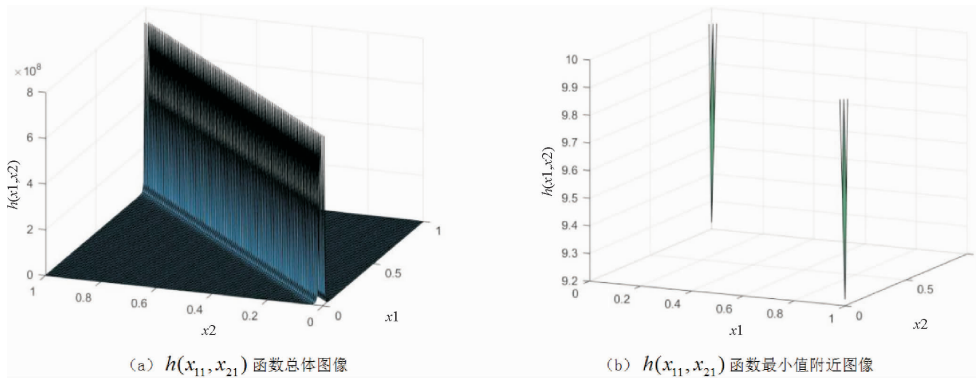


图 1  $h(x_{11}, x_{21})$  函数的总体与最小值附近的图像

Fig. 1 The image of the whole function  $h(x_{11}, x_{21})$  and the function  $h(x_{11}, x_{21})$  near the minimum value

下面利用等价性定理来证明设计  $\xi_2^*$  是模型(5)在  $c_1 = c_2 = c$  时的 R-最优设计。从式(6)~式

(12)可知, 模型(5)在设计  $\xi_2^*$  下的信息矩阵的伴随矩阵为

$$M^*(\xi_2^*) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-2c} + \frac{1}{2} & -e^{-c} \\ -e^{-c} & \frac{1}{2}e^{-2c} + \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

其行列式

$$\det M(\xi_2^*) = \frac{1}{4}(1 - e^{-2c})^2,$$

从而判定函数

$$\phi(X, \xi_2^*) = \frac{1}{\det M(\xi_2^*)} \sum_{i=1}^2 \frac{(M^*(\xi_2^*)f(X)f'(X)M^*(\xi_2^*))_{ii}}{(M^*(\xi_2^*))_{ii}} = \frac{2(e^{-2cx_1} + e^{-2cx_1-4c} + 6e^{2cx_1-4c} + 6e^{-2cx_1-2c} - 8e^{-2c} - 8e^{-4c} + e^{2cx_1-2c} + e^{2cx_1-6c})}{(1 - e^{-2c})^2(1 + e^{-2c})}.$$

令

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \phi(X, \xi_2^*) = \frac{4ce^{-2cx_1}(e^{4cx_1} - e^{2c})(e^{-2c} + 6e^{-4c} + e^{-6c})}{(1 - e^{-2c})^2(1 + e^{-2c})} = 0.$$

由闭区间连续函数的性质得到,当  $x_1 = 0.5$  时,  $\phi(X, \xi_2^*)$  取得极小值;当  $x_1 = 1$  或  $x_1 = 0$  时,  $\phi(X, \xi_2^*) = 2$  取得最大值。由等价性定理可以证得,设计  $\xi_2^*$  是模型(5)的  $R$ -最优设计。图 2 是取  $c = 1$  时通过 MATLAB 画出的判定函数的图像,可以看到  $\phi(X, \xi_2) \leq p = 2$ , 当且仅当  $X = (0, 1)$  和  $X = (1, 0)$  时等号成立。

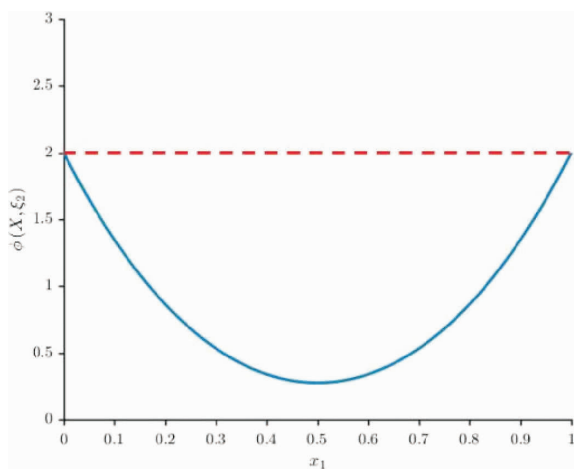


图 2  $\phi(X, \xi_2)$  的曲线图

Fig. 2 The graph for  $\phi(X, \xi_2)$

## 2.2 两衰减参数 $c_1 \neq c_2$

类似  $c_1 = c_2 = c$  的情况,可以推导出  $c_1 \neq c_2$  时的情况:

$$M(\xi_2) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2c_1 x_{i1}} & \sum_{i=1}^2 w_i e^{-c_1 x_{i1} - c_2 x_{i2}} \\ \sum_{i=1}^2 w_i e^{-c_1 x_{i1} - c_2 x_{i2}} & \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2c_2 x_{i2}} \end{pmatrix},$$

$$\det M(\xi_2) = w_1 w_2 (e^{-c_1 x_{11} - c_2 x_{22}} - e^{-c_1 x_{21} - c_2 x_{12}})^2 = w_1 w_2 b,$$

$$M^*(\xi_2) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2c_2 x_{i2}} & -\sum_{i=1}^2 w_i e^{-c_1 x_{i1} - c_2 x_{i2}} \\ -\sum_{i=1}^2 w_i e^{-c_1 x_{i1} - c_2 x_{i2}} & \sum_{i=1}^2 w_i e^{-2c_1 x_{i1}} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_R(\xi_2) = \frac{w_1 w_2 (b + 2dl) + w_1^2 d^2 + w_2^2 l^2}{w_1^2 w_2^2 b^2}, \quad (15)$$

其中,

$$b = (e^{-c_1 x_{11} - c_2 x_{22}} - e^{-c_1 x_{21} - c_2 x_{12}})^2, \quad (16)$$

$$d = e^{-c_1 x_{11} - c_2 x_{12}}, \quad (17)$$

$$l = e^{-c_1 x_{21} - c_2 x_{22}}. \quad (18)$$

与  $c_1 = c_2 = c$  类似,通过盛金公式可以得到模型(5)的  $R$ -最优设计权重  $w_1$  和  $w_2$ ,再使用 MATLAB 中 fmincon 函数默认的内点法可以导出相应的设计点,表 2 列出了该算法导出部分设计的计算结果,算法描述如下:

输入:已知参数  $c_1, c_2$ 。

过程:

- 1:在试验域上随机生成  $x_{11}$  及  $x_{21}$ ;
- 2:根据式(4)、(16)~(18)计算  $b, d, l$ ;
- 3:计算  $a_0 = d^2 + l^2 - b - 2dl, b_0 = b + 2dl - 2l^2$ ;
- 4:计算  $A = -2a_0, B = -3b_0, C = b_0 - 4d^2, D = 2d^2$ ;
- 5:采用盛金公式求解一元三次方程

$$Aw_1^3 + Bw_1^2 + Cw_1 + D = 0,$$

得到  $w_1$  的 3 个解,并将 0 到 1 之间的解作为  $w_1$  的值。

若 0 到 1 之间无解,则返回过程 1;

6:根据式(3)~(4)及(15)计算  $\Phi_R(\xi_2)$ ;

7:采用内点法计算使得  $\Phi_R(\xi_2)$  最小的  $x_{11}, x_{21}$ ;

8:将过程 1~7 重复 100 次,令

$$(x_{11}, x_{21}, w_1) = \arg \min_{x_{11}, x_{21}, w_1 \in [0, 1]} \Phi_R(\xi_2).$$

输出: $x_{11}, x_{21}$  及  $w_1$ 。

表2  $h(x_{11}, x_{21})$  函数的不同参数值计算结果  
Table 2 Calculation results of different parameter values of function  $h(x_{11}, x_{21})$

$(c_1, c_2)$	$h(x_{11}, x_{21})$	平均迭代次数	最终值 $(x_{11}, x_{21}, w_1, w_2)$	$\phi(X, \xi_2^*)$
(0.1, 0.1)	12 256	4.66	(0,1,0.50,0.50)	2
(0.1, 0.3)	949.50	4.83	(0,1,0.53,0.47)	2
(0.1, 1)	39.12	4.95	(0,1,0.60,0.40)	2
(0.1, 5)	6.49	5.70	(0,1,0.65,0.35)	2
(0.1, 10)	6.34	5.66	(0,1,0.66,0.34)	2
(0.3, 0.3)	231.54	4.89	(0,1,0.50,0.50)	2
(0.3, 1)	24.31	4.94	(0,1,0.58,0.42)	2
(0.3, 5)	5.79	5.41	(0,1,0.62,0.38)	2
(0.3, 10)	5.67	5.55	(0,1,0.62,0.38)	2
(1, 1)	9.22	5.07	(0,1,0.50,0.50)	2
(1, 5)	4.53	5.30	(0,1,0.55,0.45)	2
(1, 10)	4.49	5.71	(0,1,0.55,0.45)	2
(5, 5)	4.01	5.40	(0,1,0.52,0.48)	2
(5,10)	4.00	5.82	(0,1,0.49,0.51)	2
(10,10)	4.00	7.45	(0,1,0.49,0.51)	2

从表2中可以看出,  $c_1 = c_2$  时的结果与表1中的结果差别不大, 可认为该算法导出的结果较为可靠。随着  $c_1$  及  $c_2$  值的增加, 函数值  $h(x_{11}, x_{21})$  逐渐减小,  $c_1, c_2$  均大于5之后函数值变化幅度不大, 在4附近。该方法的迭代次数在10左右, 最后导出的设计点均为(0,1)和(1,0),  $c_1$  和  $c_2$  相差越小, 权重越接近(0.5, 0.5), 判定函数  $\phi(X, \xi_2^*)$

的值均约为2, 满足等价性定理, 可认为这些设计是  $R$ -最优设计。

### 3 结论

本文基于2分量一阶混料指数衰减模型, 通过  $R$ -最优设计的定义, 运用导数求极值、盛金公式以及内点法等, 推导出参数  $\lambda_1 = \lambda_2 = c$  时的局部  $R$ -最优设计, 以及参数  $\lambda_1 = c_1 \neq \lambda_2 = c_2$  时的局部  $R$ -最优设计的计算方法, 并通过等价性定理证明了导出的设计是  $R$ -最优设计。

目前的工作可以在3个方向上加以扩展: ①在第2节只推导了两衰减参数已知的情形, 实际中可能存在需要处理衰减参数未知的问题。为解决这个问题, 可以考虑先从参数已知时的情形入手, 即适当地列出参数的可能取值, 通过本文的结论求出各参数取值下的设计, 比较得到衰减参数未知时的  $R$ -最优设计。②文中模型条件设定比较特殊, 在实际应用中可能受到诸多限制, 未来的研究中可以考虑将模型条件设定为更一般的情况。③本文只讨论了混料指数衰减模型为2分量一阶的情况, 对于分量数更多、阶数更大的模型, 如何导出其  $R$ -最优设计或是如何导出其他最优设计, 这些都是值得进一步研究的课题。

#### 参考文献:

- [1] 关颖男. 混料试验设计 [M]. 上海: 上海科学出版社, 1990.
- [2] Dette H. Designing experiments with respect to 'standardized' optimality criteria [J]. Journal of Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodological, 1997, 59(1): 97-110.
- [3] 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.
- [4] 陈博照, 闫湛. 广义线性指数混料模型的  $A$ -最优设计 [J]. 科技视界, 2020(31): 86-87.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 李俊鹏, 张崇岐. 基于二阶指数混料模型的  $A$ -最优设计 [J]. 数理统计与管理, 2023, 42(3): 472-482.
- [8] 李光辉, 杨晓珍. 指数回归模型下的渐近局部  $D$ -最优设计 [J]. 凯里学院学报, 2020, 38(6): 1-4.
- [9] Dette H, Melas V B, Pepelyshev A. Local  $c$ - and  $E$ -optimal designs for exponential regression models [J]. Annals of the Institute of Statistical Mathematics, 2006, 58(2): 407-426.
- [10] Han C, Chaloner K.  $D$ - and  $c$ -optimal designs for exponential regression models used in viral dynamics and other applications [J]. Journal of Statistical Planning and Inference, 2003, 115(2): 585-601.
- [11] Dette H, Melas V B, Wong W K. Locally  $D$ -optimal designs for exponential regression models [J]. Statistica Sinica, 2006, 16(3): 789-803.
- [12] Fedorov V V. Theory of optimal experiments [M]. New York: Academic Press, 1972.
- [13] He L, Yue R X.  $R$ -optimal designs for multi-factor models with heteroscedastic errors [J]. Metrika, 2017, 80(6): 717-732.
- [14] 范盛金. 一元三次方程的新求根公式与新判别法 [J]. 海南师范学院学报(自然科学版), 1989, 2(2): 91-98.

【责任编辑: 卓祯雨】