

二阶混料指数模型的 D -最优设计

李光辉¹, 冯鑫², 李俊鹏³

(1.凯里学院微电子与人工智能学院, 贵州凯里 556011; 2.吉首大学数学与统计学院, 湖南吉首 416000;

3.凯里学院理学院, 贵州凯里 556011)

摘要:为了得到单纯形域内的二阶混料指数模型下的 D -最优设计, 首先, 使用单纯形格点设计作为支撑点集, 推导出二阶指数混料模型的信息矩阵及相关矩阵; 其次, 得到 3 分量与 4 分量情形下方差函数的具体形式, 计算出 D -最优设计的最优测度; 然后, 证明了在二阶格点支撑点集下的等测度设计是 D -最优的; 最后, 比较 3 分量与 4 分量情形下的效率函数, D -最优设计效率变化相对稳定且效率较高。

关键词:混料指数模型; D -最优设计; 效率函数

中图分类号: O212.6

文献标志码: A

文章编号: 2095-4271(2025)05-0550-10

D -optimal design of second-order mixture exponential model

LI Guanghui¹, FENG Xin², LI Junpeng³

(1.School of Microelectronics and Artificial Intelligence, Kaili University, Kaili 556011, China;

2.School of Mathematics and Statistics, Jishou University, Jishou 416000, China;

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

Abstract: In order to obtain the D -optimal design under the second-order mixture exponential model in the simplex region, firstly, the simplex lattice design was used as the support point set to derive the information matrix and correlation matrix of the second-order exponential mixture model; secondly, the specific form of the variance function under the 3-component and 4-component scenarios was obtained, the optimal measure of the D -optimal design was calculated, and then, it was proved that the equimeasures design under the second-order lattice support point set was D -optimal; finally, the efficiency functions under the 3-component and 4-component scenarios were compared, and the efficiency of the D -optimal design changed relatively stably and relatively high.

Keywords: mixture exponential model; D -optimal design; efficiency function

混料试验设计是统计学中的一个重要的分支, 它广泛地应用于生物、医药、工业等领域中, Cornell^[1]在其著作中详细地讨论了混料试验设计的相关理论. 在很多工程及科学的实际问题中, 假设影响试验结果的因子有 q 个, 设为 x_1, x_2, \dots, x_q , 它们满足 $0 \leq x_i \leq 1, \sum_{i=1}^q x_i = 1$, 这一条件称为混料试验的基本约束条件, 由基本约束条件构成的试验可行域是 $q-1$ 维正规单纯形

$$S^{q-1} = \left\{ \tau = (x_1, x_2, \dots, x_q) : \sum_{i=1}^q x_i = 1, x_i \geq 0 \right\}.$$

收稿日期: 2024-03-18

作者简介: 李光辉(1985-), 男, 教授, 博士, 研究方向: 试验设计与抽样技术. E-mail: liguanghui1985@126.com

基金项目: 国家自然科学基金青年项目(11901260); 贵州省科学技术基金(黔科合基础[2020]1Y010); 凯里学院博士专项课题(BS201807)

由于混料试验的各个分量变化都在单纯形 S^{q-1} 上取值,一般含有常数项的回归模型不能直接应用到混料设计中,因为这样一来会使得模型为退化的.Scheffé^[2-3]根据混料试验的特点,提出了规范多项式模型与中心多项式模型.越来越多的专家及学者在该模型的基础上进行了大量的关于最优试验设计的研究.例如,Becker 提出了三种不同类型的齐次混料模型^[4],Darroch 等提出了三分量二阶可加混料模型和 K 模型^[5-6].绝大多数的混料模型都可以转换为线性模型,且通过转化后,可用 q 分量 m 阶完全型多项式回归模型进行表示:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i f(x_i) + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} g(x_i, x_j) + \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk} h(x_i, x_j, x_k) + \dots$$

函数 $f(\cdot), g(\cdot), h(\cdot)$ 是试验者根据不同的实际背景而提出的,且这些函数大多是非线性的,常见的广义非线性模型有指数型非线性混料模型,含有倒数项的混料模型,对数比的混料模型等^[7-8],在因子筛选以及试验初期统计分析时常用到 Scheffé 二阶混料模型为

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i f(x_i) + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} f(x_i, x_j).$$

在这类模型中,指数模型是一类特殊的模型,即令 $f(x) = e^x$.一方面,这类模型将各个分量的值域由 $[0, 1]$ 映射到 $[1, e]$,由此构造的模型在单纯形域内更为稳健;另一方面,二阶指数模型能够很好地描述混料因子之间的交互效应.李俊鹏和张崇岐^[9]研究了这类二阶混料指数模型的 A -最优设计.文献^[10-11]中都研究了 2 分量情形下混料指数模型的 D -最优设计.

本文在此基础上,研究二阶混料指数模型的 D -最优设计,在单纯形 S^{q-1} 内使用二阶格子点集作为最优支撑点集,进一步求出两类点的最优测度,并计算出 $q = 3, 4$ 情形下的最优测度和最优效率.

1 二阶指数混料模型的信息矩阵

首先,使用文献^[12]中给出的定义和记号.

定义 1^[12] 设 $i_1, i_2 \dots i_q$ 是 $1, 2 \dots q$ 的一个置换排列,对于单纯形内任意点 $x = (x_1, x_2 \dots x_q)^T \in S^{q-1}$,由 x 生成的置换点集记为

$$H(x) = \{x, x_{i_1}, x_{i_2} \dots x_{i_p}\},$$

其中 $x_i = (x_{i_1}, x_{i_2} \dots x_{i_q})$, $i = 1, 2 \dots p$.并记 $H(x) = (x, x_{i_1}, x_{i_2} \dots x_{i_p})$ 表示由置换这 $p+1$ 个点排列而成的矩阵.

例如,由两个试验点 $x_1 = (1, 0 \dots 0)^T, x_2 = (1/2, 1/2, 0 \dots 0)^T$ 生成的置换点集可以表示为

$$H(x_1) = \{e_q(1), e_q(2) \dots e_q(q)\}, H(x_2) = \left\{x = \frac{1}{2}e_q(i) + \frac{1}{2}e_q(j) : 1 \leq i < j \leq q\right\},$$

其中 $e_q(i)$ 表示第 i 个元素为 1,其余元素皆为 0 的 q 维向量.

设计 $\xi \in \Xi$ 的信息矩阵为

$$M(\xi) = \int_{S^{q-1}} f(x) f^T(x) d\xi(x),$$

其中 $x \in S^{q-1}$.若一个设计 $\xi^* \in \Xi$ 是 D -最优的,则满足

$$\xi^* = \arg \max_{\xi \in \Xi} \det(M(\xi)),$$

且 ξ^* 是 D -最优设计的充分必要条件为

$$d(x, \xi^*) = f^T(x) M^{-1}(\xi^*) f(x) \leq m. \tag{1}$$

本文所讨论的 q 分量二阶指数混料模型的最优设计,一般形式如下

$$\eta = \beta^T f(x) + \gamma^T h(x) + \varepsilon. \tag{2}$$

其中 $\beta = (\beta_1, \beta_2 \cdots \beta_q)^T$, $\gamma = (\beta_{12}, \beta_{13} \cdots \beta_{(q-1)q})^T$ 分别为 q 维, C_q^2 维待估参数向量, $f(x) = (e^{x_1}, e^{x_2} \cdots e^{x_q})^T$, $h(x) = (e^{x_1 x_2}, e^{x_1 x_3} \cdots e^{x_{q-1} x_q})^T$ 为混料指数模型向量.

很多时候, 试验者希望构造出单纯形上的饱和设计, 即试验的支撑点数与模型的待估参数的个数相同. 由式 (2) 可得, q 分量二阶指数混料模型的待估参数为 $q + C_q^2$ 个, 因此, 选取单纯形中各类中心点作为设计的支撑点集, 假设第一类点的测度为 r_1 , 第二类点对应的测度为 r_2 , 则模型所对应的设计为

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_q & x_{12} & x_{13} & \cdots & x_{(q-1)q} \\ r_1 & r_1 & \cdots & r_1 & r_2 & r_2 & \cdots & r_2 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

其中 $x_i = e_q(i)$, $x_{ij} = \frac{1}{2}e_q(i) + \frac{1}{2}e_q(j)$, 且测度满足 $qr_1 + Qr_2 = 1$, $Q = C_q^2$.

为方便记, 令 I_q 表示 q 阶单位阵, $\mathbf{1}_q = (1, 1, \cdots, 1)^T$ 是元素全为 1 的 q 维列向量. $J_q = \mathbf{1}_q \mathbf{1}_q^T$, $J_{q \times Q} = \mathbf{1}_q \mathbf{1}_Q^T$.

将 q 分量二阶指数混料模型所对应的设计矩阵记为以下分块形式

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{pmatrix}.$$

其中 $X_{11} = (e-1)I_q + J_q$, $X_{12} = J_{q \times Q}$, $X_{22} = (e^{1/4} - 1)I_{Q \times Q} + J_{Q \times Q}$, X_{21} 为 $Q \times q$ 阶, 第一行前两个元素为 \sqrt{e} , 其余元素都是 1, 其他行的元素是第一行元素的字典排序.

同时, 可得可行设计 ξ 所对应的测度阵位

$$\Lambda = \begin{pmatrix} r_1 M_1 & O \\ O^T & r_2 M_2 \end{pmatrix}.$$

其中 M_1 为 $q \times q$ 阶单位矩阵, M_2 为 $Q \times Q$ 阶单位矩阵, O 为适当阶的零矩阵. 于是可行设计 ξ 所对应的信息矩阵为

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} r_1(e-1)^2 I_q + r_1(q+2(e-1))J_q + r_2 N & (r_1(e-1) + r_1 q)J_{q \times Q} + r_2 H^T \\ (r_1(e-1) + r_1 q)J_{Q \times q} + r_2 H & r_2(e^{1/4} - 1)^2 I_{Q \times Q} + (r_1 q + r_2(Q+2(e^{1/4} - 1)))J_{Q \times Q} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

其中 N 是第 1 行第 1 个元素为 $(q-1)e + Q - (q-1)$, 其余元素均为

$$e + 2(q-2)e^{1/2} + Q - (q-1) - (q-2),$$

且其余行为第一行元素的字典排序的 $q \times q$ 阶矩阵, 即

$$N = (q-2)((e+1) - 2e^{1/2})I_q + (e + 2(q-2)e^{1/2} + Q - (q-1) - (q-2))J_q.$$

H 是第一行前两个元素为

$$e^{3/4} + (q-2)e^{1/2} + Q - (q-1),$$

其余元素均为 $e^{1/4} + (q-1)e^{1/2} + Q - q$, 且其余行为第一行元素的字典排序的 $Q \times q$ 阶矩阵. 这里的 H 称为置换矩阵, 具体形式可见文献 [13].

下面讨论 $q=3$ 时, 二阶指数混料模型的最优设计. 由式 (3) 可得, 模型所对应的信息矩阵为

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} (r_1(e-1)^2 + r_2(e+1-2e^{1/2}))I_3 + (r_1(3+2(e-1)) + r_2(e+2e^{1/2}))J_3 & r_1(e-1)I_3 + 3r_1 J_3 + r_2 H_3^T \\ r_1(e-1)I_3 + 3r_1 J_3 + r_2 H_3 & r_2(e^{1/4} - 1)^2 I_3 + (3r_1 + r_2(3+2(e^{1/4} - 1)))J_3 \end{pmatrix}.$$

其中 H_3 为 3 分量混料置换矩阵, 如文献 [13] 定义.

根据设计测度 r_1, r_2 满足 $3r_1 + 3r_2 = 1$, 于是 $M(\xi)$ 等价于

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} (a_1 - b_1) \cdot I_3 + b_1 J_3 & D_{21} \\ D_{21}^T & (e_1 - f_1)I_3 + f_1 J_3 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

其中 D_2 第一行前两个元素均为 c_1 , 其余元素为 d_1 的 3×3 阶矩阵, 且有

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{3}(1+2e) + (e^2 - 2e + 1)r_1; b_1 = \left(\frac{1}{3} - r_1\right)(2e^{1/2} + e) + (2e + 1)r_1; \\ c_1 &= \frac{1}{3} + (e^{1/2} + e^{3/4})\left(\frac{1}{3} - r_1\right) + (e + 1)r_1; d_1 = \left(\frac{1}{3} - r_1\right)(e^{1/4} + 2e^{1/2}) + (2 + e)r_1; \\ e_1 &= \left(\frac{2}{3} + r_1\right) + e^{1/2}\left(\frac{1}{3} - r_1\right); f_1 = \left(\frac{1}{3} + 2r_1\right) + 2e^{1/4}\left(\frac{1}{3} - r_1\right). \end{aligned}$$

2 3 分量二阶指数混料模型 D -最优设计

根据上述式(4)结果及混料试验设计 D -最优准则, 可得信息矩阵的行列式为

$$|M(\xi)| = -\frac{1}{27}(-1 + e^{1/4})^{10}(1 + e^{1/4} + e^{1/2} + e^{3/4})^4(-1 - 3e^{1/4} + 3e^{1/2} + 3e^{3/4} + e)^2 r_1^3(-1 + 3r_1)^3. \quad (6)$$

由上式可知, $|M(\xi)|$ 是关于 r_1 的一元函数, 根据 D -最优准则, 要使得 $|M(\xi)|$ 最大, 因此令 $L_D(r_1) = |M(\xi)|$, 对 r_1 求导可得

$$\frac{d}{dr_1} L_D(r_1) = -\frac{1}{9} r_1^2 (3r_1 - 1)(6r_1 - 1)(-1 + e^{1/4})^{10}(1 + e^{1/4} + e^{1/2} + e^{3/4})^4(-1 - 3e^{1/4} + 3e^{1/2} + 3e^{3/4} + e)^2. \quad (7)$$

令式(7)等于 0, 可得其极值点为 $r_1 = 0, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$, 根据函数极值的判别条件可得 $r_1 = \frac{1}{6}$ 为极大值点, 如图 1. 于是,

可得 3 分量二阶指数混料模型的 D -最优配置为 $r_1^* = \frac{1}{6}, r_2^* = \frac{1}{6}$. 因此, 根据 D -最优等价性定理, 可得定理 1.

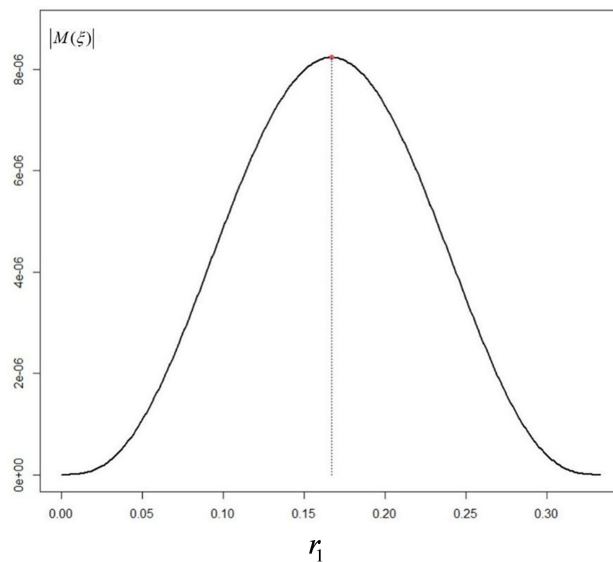


图 1 $|M(\xi)|$ 随测度 r_1 变化图

Fig.1 Variation of $|M(\xi)|$ with Measure r_1

定理 1 对于三分量二阶混料指数模型(2), 测度设计

$$\xi_D^* = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_{12} & x_{13} & x_{23} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

是 D -最优设计.

证明 根据 D -最优设计的等价性定理及式(1), 记设计 ξ^* 所对应的方差函数为

$$d(x, \xi_D^*) = F^T(x)M^{-1}(\xi_D^*)F(x),$$

其中 $F(x) = (f(x), h(x))^T, x = (x_1, x_2, x_3) \in S^{3-1}$. 因此, 对于三分量二阶混料指数模型, 要证明

$$d(x, \xi_D^*) = F^T(x)M^{-1}(\xi_D^*)F(x) \leq 6.$$

由式(3), (4) 及式(8) 计算可得

$$M^{-1}(\xi_D^*) = \begin{pmatrix} 7.19646242 & 5.16428102 & 5.16428102 & -9.89353368 & -9.89353368 & -5.25197974 \\ 5.16428102 & 7.19646242 & 5.16428102 & -9.89353368 & -5.25197974 & -9.89353368 \\ 5.16428102 & 5.16428102 & 7.19646242 & -5.25197974 & -9.89353368 & -9.89353368 \\ -9.89353368 & -9.89353368 & -5.25197974 & 68.6780924 & -16.3000252 & -16.3000252 \\ -9.89353368 & -5.25197974 & -9.89353368 & -16.3000252 & 68.6780924 & -16.3000252 \\ -5.25197974 & -9.89353368 & -9.89353368 & -16.3000252 & -16.3000252 & 68.6780924 \end{pmatrix}.$$

于是可得, 设计 ξ_D^* 的方差函数如下:

$$\begin{aligned} d(x, \xi_D^*) &= (e^{x_1}, e^{x_2}, e^{x_3}, e^{x_1x_2}, e^{x_1x_3}, e^{x_2x_3})M^{-1}(\xi_D^*)(e^{x_1}, e^{x_2}, e^{x_3}, e^{x_1x_2}, e^{x_1x_3}, e^{x_2x_3})^T = \\ &= -19.7870674(e^{x_2(1+x_1)} + e^{x_1(1+x_2)} + e^{x_3(1+x_1)} + e^{x_3(1+x_2)} + e^{x_1(1+x_3)} + e^{x_2(1+x_3)}) + \\ &= 10.328562(e^{x_1x_2} + e^{x_1x_3} + e^{x_2x_3}) - 10.5039595(e^{x_1x_2x_3} + e^{x_2x_1x_3} + e^{x_3x_2x_1}) - \\ &= 32.6000504(e^{(x_1+x_2)x_3} + e^{x_1(x_2+x_3)} + e^{(x_1+x_3)x_2}) + 7.19646242(e^{2x_1} + e^{2x_2} + e^{2x_3}) + \\ &= 68.6780924(e^{2x_1x_2} + e^{2x_1x_3} + e^{2x_2x_3}). \end{aligned}$$

在混料试验设计中, 各因子 $x_i, i = 1, 2, 3$ 满足基本混料条件, 即

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1, x_i \geq 0, i = 1, 2, 3.$$

因此利用 Lagrange 乘子法, 令

$$l_D(x_1, x_2, x_3, \lambda) = d(x, \xi_D^*) + \lambda(x_1 + x_2 + x_3 - 1),$$

于是, 上式关于 x_1, x_2, x_3, λ 的偏导分别为

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_1} &= 14.3929248e^{2x_1} + 10.328562(e^{x_1+x_2} + e^{x_1+x_3}) + \lambda + 68.6780924(2x_2e^{2x_1x_2} + 2x_3e^{2x_1x_3}) - \\ &= 10.5039595(e^{x_1x_2x_3} + x_2e^{x_3+x_1x_2} + x_3e^{x_2+x_1x_3}) - 19.7870674(x_2e^{(1+x_1)x_2} + (1+x_2)e^{x_1(1+x_2)} + \\ &= x_3e^{(1+x_1)x_3} + (1+x_3)e^{x_1(1+x_3)}) - 32.6000504(e^{x_2(x_1+x_3)}x_2 + x_3e^{(x_1+x_2)x_3} + (x_2+x_3)e^{x_1(x_2+x_3)}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_2} &= 14.3929248e^{2x_2} + 10.328562(e^{x_1+x_2} + e^{x_2+x_3}) + \lambda + 68.6780924(2x_1e^{2x_1x_2} + 2x_3e^{2x_2x_3}) - \\ &= 10.5039595(e^{x_2+x_1x_3} + x_1e^{x_3+x_1x_2} + x_3e^{x_1+x_2x_3}) - 19.7870674(x_1e^{(1+x_2)x_1} + (1+x_1)e^{x_2(1+x_1)} + \\ &= x_3e^{(1+x_2)x_3} + (1+x_3)e^{x_2(1+x_3)}) - 32.6000504(e^{x_1(x_2+x_3)}x_2 + x_3e^{(x_1+x_2)x_3} + (x_1+x_3)e^{x_2(x_1+x_3)}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_3} &= 14.3929248e^{2x_3} + 10.328562(e^{x_1+x_3} + e^{x_2+x_3}) + \lambda + 68.6780924(2x_1e^{2x_1x_2} + 2x_2e^{2x_2x_3}) - \\ &= 10.5039595(e^{x_3+x_1x_2} + x_1e^{x_2+x_1x_3} + x_2e^{x_1+x_2x_3}) - 19.7870674(x_1e^{(1+x_3)x_1} + (1+x_1)e^{x_3(1+x_1)} + \\ &= x_2e^{(1+x_3)x_2} + (1+x_2)e^{x_3(1+x_3)}) - 32.6000504(e^{x_1(x_2+x_3)}x_1 + x_2e^{(x_1+x_3)x_2} + (x_1+x_2)e^{x_3(x_1+x_2)}), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial l_D}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 + x_3 - 1.$$

令 $\frac{\partial l_D}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial x_2} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial x_3} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial \lambda} = 0$, 可得极值点为

$$x_{d1} = (0.12643, 0.12643, 0.74714)^T, x_{d2} = (0.12643, 0.74714, 0.12643)^T,$$

$$\mathbf{x}_{d3} = (0.74714, 0.12643, 0.12643)^T, \mathbf{x}_{123} = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})^T.$$

将 $\mathbf{x}_3 = 1 - \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ 代入方差函数 $d(x, \xi_D^*)$, 此时, 目标函数就转化为 $\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 的形式, 根据二元连续函数极值存在的充分必要条件^[14], 计算可得到

$$\begin{aligned} A &= \varphi_{x_1 x_1}(0.12643, 0.12643) = 106.611 > 0, \\ B &= \varphi_{x_1 x_2}(0.12643, 0.12643), \\ C &= \varphi_{x_2 x_2}(0.12643, 0.12643) = 106.611, \end{aligned}$$

且有 $AC - B^2 = 11\,337.5 > 0$.

则 \mathbf{x}_{d1} 为极小值点, 且 $\varphi(0.12643, 0.12643) = 2.486\,36$. 同理, 经计算可知其余 3 个点 $\mathbf{x}_{d2}, \mathbf{x}_{d3}, \mathbf{x}_{123}$ 均为极小值点, 且 $\varphi(0.12643, 0.74714) = \varphi(0.74714, 0.12643) = 2.486\,36, \varphi(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}) = 3.261\,41$.

又根据文献[15]知, 模型(2)的最优设计的支撑点为 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_{12}, \mathbf{x}_{13}, \mathbf{x}_{23}$, 于是有

$$d(\mathbf{x}_1, \xi_D^*) = d(\mathbf{x}_2, \xi_D^*) = d(\mathbf{x}_3, \xi_D^*) = d(\mathbf{x}_{12}, \xi_D^*) = d(\mathbf{x}_{13}, \xi_D^*) = d(\mathbf{x}_{23}, \xi_D^*) = 6,$$

于是有 $d(x, \xi_D^*) \leq 6$ 成立. 为了能直观地反映出方差函数 $d(x, \xi_D^*)$ 的变化情况, 图 2 给出了 3 分量方差函数的等高线图.

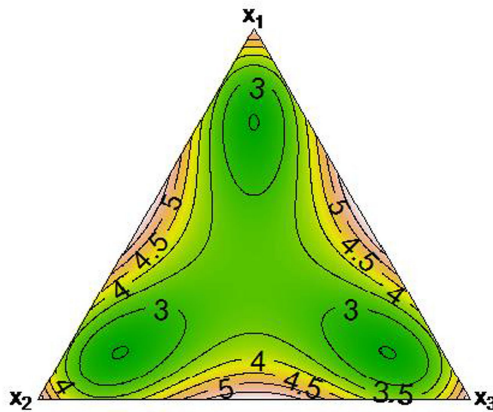


图 2 3 分量二阶混料指数模型的方差函数等高线图

Fig.2 Contour of variance function of 3-components second-order mixture exponential model

定理证毕, 于是 ξ_D^* 是三分量二阶指数混料模型的 D -最优设计.

3 4 分量二阶指数混料模型 D -最优设计

q 分量二阶指数模型的信息矩阵, 于是可得当 $q = 4$ 时的信息矩阵为

$$M(\xi_D) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \tag{9}$$

其中 $A = (r_1(e-1)^2 + 2r_2(e+1-2e^{1/2}))I_4 + (r_1(4+2(e-1)) + r_2(e+4e^{1/2}+1))J_4$,

$B = r_1(e+3)J_{4 \times 6} + r_2 H_4^T, C = B^T, D = r_2(e^{1/4}-1)^2 I_6 + (r_1 q + r_2(Q+2(e^{1/4}-1)))J_6$.

H_4 为 $q = 4$ 时 H 所对应的 6×4 阶矩阵, 其形式如文献[11]中给出的置换矩阵.

于是, 根据分块矩阵行列式的结果, 可得

$$|M(\xi_D)| = |A| |D - CA^{-1}B| = (-1+e^{1/4})^{12} (-1+e)^6 (-3-6e^{1/4}+6e^{1/2}+6e^{3/4}+e)^2 r_1^4 r_2^6. \tag{10}$$

在混料试验设计中, 对于 4 分量二阶混料指数模型, 设计测度 r_1, r_2 满足 $4r_1 + 6r_2 = 1$, 于是式(10)可简化为

$$|M(\xi_D)| = (-1 + e^{1/4})^{12} (-1 + e)^6 (-3 - 6e^{1/4} + 6e^{1/2} + 6e^{3/4} + e)^2 r_1^4 \left(\frac{1}{6} - \frac{2r_1}{3}\right)^6$$

由上式可知, $|M(\xi_D)|$ 是关于 r_1 的一元函数, 根据 D -最优设计准则, 要使得 $|M(\xi_D)|$ 最大, 因此令 $l_D(r_1) = |M(\xi_D)|$, 对 r_1 求导并令导数为 0, 可得

$$\frac{d(l_D(r_1))}{dr_1} = 4(-1 + e^{1/4})^{12} (-1 + e)^6 (-3 - 6e^{1/4} + 6e^{1/2} + 6e^{3/4} + e)^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{2r_1}{3}\right)^5 r_1^3 \left(\frac{1}{6} - \frac{5r_1}{3}\right) = 0$$

可得极值点为 $r_1 = 0, \frac{1}{10}, \frac{1}{4}$, 经验证 $r_1 = \frac{1}{10}$ 为极大值点, 于是可得 4 分量二阶指数混料模型的 D -最优配置为 $r_1^* = \frac{1}{10}, r_2^* = \frac{1}{10}$. 因此, 根据 D -最优设计等价性定理, 可得定理 2.

定理 2 对于 4 分量二阶混料指数模型(2), 测度设计

$$\xi_D^* = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_{12} & x_{13} & x_{14} & x_{23} & x_{24} & x_{34} \\ \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

是 D -最优设计.

证明 根据 D -最优设计的等价性定理, 若一个设计 ξ^* 是 D -最优的, 根据式(1), 当且仅当方差函数满足下面不等式

$$d(x, \xi_D^*) = F^T(x)M^{-1}(\xi_D^*)F(x) \leq 10$$

由式(2), (4) 及式(11) 可得

$$M^{-1}(\xi_D^*) = \begin{pmatrix} 11.75989 & 8.372925 & 8.372925 & 8.372925 & -12.02369 & -12.02369 & -12.02369 & -4.287762 & -4.287762 & -4.287762 \\ 8.372925 & 11.75989 & 8.372925 & 8.372925 & -12.02369 & -4.287762 & -4.287762 & -12.02369 & -12.02369 & -4.287762 \\ 8.372925 & 8.372925 & 11.75989 & 8.372925 & -4.287762 & -12.02369 & -4.287762 & -12.02369 & -4.287762 & -12.02369 \\ 8.372925 & 8.372925 & 8.372925 & 11.75989 & -4.287762 & -4.287762 & -12.02369 & -4.287762 & -12.02369 & -12.02369 \\ -12.02369 & -12.02369 & -4.287762 & -4.287762 & 128.2108 & -13.41938 & -13.41938 & -13.41938 & -13.41938 & -31.08843 \\ -12.02369 & -4.287762 & -12.02369 & -4.287762 & -13.41938 & 128.2108 & -13.41938 & -13.41938 & -31.08843 & -13.41938 \\ -12.02369 & -4.287762 & -4.287762 & -12.02369 & -13.41938 & -13.41938 & 128.2108 & -31.08843 & -13.41938 & -13.41938 \\ -4.287762 & -12.02369 & -12.02369 & -4.287762 & -13.41938 & -13.41938 & -31.08843 & 128.2108 & -13.41938 & -13.41938 \\ -4.287762 & -12.02369 & -4.287762 & -12.02369 & -13.41938 & -31.08843 & -13.41938 & -13.41938 & 128.2108 & -13.41938 \\ -4.287762 & -4.287762 & -12.02369 & -12.02369 & -31.08843 & -13.41938 & -13.41938 & -13.41938 & -13.41938 & 128.2108 \end{pmatrix}$$

于是可得, 设计 ξ^* 的方差函数如下:

$$\begin{aligned} d(x, \xi_D^*) = & 11.75989(e^{2x_1} + e^{2x_2} + e^{2x_3} + e^{2x_4}) + 128.21081(e^{2x_1x_2} + e^{2x_1x_3} + e^{2x_2x_3} + e^{2x_3x_4} + e^{2x_1x_4} + e^{2x_2x_4}) - \\ & 24.04737(e^{(1+x_1)x_2} + e^{x_1(1+x_2)} + e^{(1+x_1)x_3} + e^{(1+x_2)x_3} + e^{x_1(1+x_3)} + e^{x_2(1+x_3)} + e^{(1+x_1)x_4} + e^{(1+x_2)x_4} + e^{(1+x_3)x_4} + \\ & e^{x_1(1+x_4)} + e^{x_2(1+x_4)} + e^{x_3(1+x_4)}) + 16.74585(e^{x_1+x_2} + e^{x_1+x_3} + e^{x_2+x_3} + e^{x_1+x_4} + e^{x_2+x_4} + e^{x_3+x_4}) - \\ & 26.83876(e^{(x_1+x_2)x_3} + e^{x_2(x_1+x_3)} + e^{x_1(x_2+x_3)} + e^{(x_1+x_2)x_4} + e^{(x_1+x_3)x_4} + e^{(x_2+x_3)x_4} + e^{x_2(x_1+x_4)} + e^{x_3(x_1+x_4)} + e^{x_1(x_2+x_4)} + \\ & e^{x_3(x_2+x_4)} + e^{x_1(x_3+x_4)} + e^{x_2(x_3+x_4)}) - 8.575524(e^{x_1x_2+x_3} + e^{x_2+x_1x_3} + e^{x_1+x_2x_3} + e^{x_1x_2+x_4} + e^{x_1x_3+x_4} + e^{x_2x_3+x_4} + e^{x_2+x_1x_4} + \\ & e^{x_3+x_1x_4} + e^{x_1+x_2x_4} + e^{x_3+x_2x_4} + e^{x_1+x_3x_4} + e^{x_2+x_3x_4}) - 62.17685(e^{x_2x_3+x_1x_4} + e^{x_1x_3+x_2x_4} + e^{x_1x_2+x_3x_4}) \end{aligned}$$

与 3 分量情形类似, 利用 Lagrange 乘子法, 令

$$l_D(x_1, x_2, x_3, x_4, \lambda) = d(x, \xi_D^*) + \lambda(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 - 1)$$

于是, 上式关于 $x_1, x_2, x_3, x_4, \lambda$ 的偏导分别为

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_1} = & 16.74585(e^{x_1+x_2} + e^{x_1+x_3} + e^{x_1+x_4}) - 8.57552(e^{x_1+x_2x_3} + e^{x_1+x_2x_4} + e^{x_1+x_4x_3} + x_2e^{x_1x_2+x_3} + x_2e^{x_1x_2+x_4} + \\ & x_3e^{x_1x_3+x_2} + x_3e^{x_1x_3+x_4} + x_4e^{x_1x_4+x_2} + x_4e^{x_1x_4+x_3}) - 24.0437(x_2e^{(x_1+1)x_2} + (x_2+1)e^{(x_2+1)x_1} + (x_3+1)e^{(x_3+1)x_1} + \\ & (x_4+1)e^{(x_4+1)x_1} + x_4e^{(x_1+1)x_4} + x_3e^{(x_1+1)x_3}) - 26.83876(x_2e^{(x_1+x_3)x_2} + x_2e^{(x_1+x_4)x_2} + (x_2+x_3)e^{x_1(x_2+x_3)} + \\ & x_3e^{(x_1+x_2)x_3} + x_3e^{x_3(x_1+x_4)} + (x_2+x_4)e^{x_1(x_2+x_4)} + (x_3+x_4)e^{x_1(x_3+x_4)} + x_4e^{(x_1+x_2)x_4} + x_4e^{(x_1+x_3)x_4}) + \lambda + \\ & 256.4216(x_2e^{2x_1x_2} + x_3e^{2x_1x_3} + x_4e^{2x_1x_4}) - 62.1769(x_2e^{x_1x_2+x_3x_4} + x_3e^{x_1x_3+x_2x_4} + x_4e^{x_2x_3+x_1x_4}) + 23.51979e^{2x_1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_2} = & 16.74585(e^{x_1+x_2} + e^{x_2+x_3} + e^{x_2+x_4}) - 8.57552(e^{x_2+x_1x_3} + e^{x_2+x_1x_4} + e^{x_2+x_4x_3} + x_1e^{x_1x_2+x_3} + x_1e^{x_1x_2+x_4} + \\ & x_3e^{x_2x_3+x_1} + x_3e^{x_2x_3+x_4} + x_4e^{x_2x_4+x_1} + x_4e^{x_2x_4+x_3}) - 24.0437(x_1e^{(x_2+1)x_1} + (x_1+1)e^{(x_1+1)x_2} + (x_3+1)e^{(x_3+1)x_2} + \\ & (x_4+1)e^{(x_4+1)x_2} + x_4e^{(x_2+1)x_4} + x_3e^{(x_2+1)x_3}) - 26.83876(x_1e^{(x_2+x_3)x_1} + x_1e^{(x_2+x_4)x_1} + (x_1+x_3)e^{x_2(x_1+x_3)} + \\ & x_3e^{(x_1+x_2)x_3} + x_3e^{x_3(x_2+x_4)} + (x_1+x_4)e^{x_2(x_1+x_4)} + (x_3+x_4)e^{x_2(x_3+x_4)} + x_4e^{(x_1+x_2)x_4} + x_4e^{(x_2+x_3)x_4}) + \lambda + \\ & 256.4216(x_1e^{2x_1x_2} + x_3e^{2x_2x_3} + x_4e^{2x_2x_4}) - 62.1769(x_1e^{x_1x_2+x_3x_4} + x_4e^{x_1x_3+x_2x_4} + x_3e^{x_2x_3+x_1x_4}) + 23.51979e^{2x_2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_3} = & 16.74585(e^{x_3+x_2} + e^{x_4+x_3} + e^{x_1+x_3}) - 8.57552(e^{x_3+x_2x_1} + e^{x_3+x_1x_4} + e^{x_3+x_4x_2} + x_1e^{x_1x_3+x_2} + x_1e^{x_1x_3+x_4} + \\ & x_2e^{x_2x_3+x_1} + x_2e^{x_2x_3+x_4} + x_4e^{x_3x_4+x_2} + x_4e^{x_3x_4+x_1}) - 24.0437(x_1e^{(x_3+1)x_1} + (x_1+1)e^{(x_1+1)x_3} + (x_2+1)e^{(x_2+1)x_3} + \\ & (x_4+1)e^{(x_4+1)x_3} + x_4e^{(x_3+1)x_4} + x_2e^{(x_3+1)x_2}) - 26.83876(x_1e^{(x_2+x_3)x_1} + x_1e^{(x_3+x_4)x_1} + (x_2+x_1)e^{x_3(x_2+x_1)} + \\ & x_2e^{(x_1+x_3)x_2} + x_2e^{x_2(x_3+x_4)} + (x_1+x_4)e^{x_3(x_1+x_4)} + (x_2+x_1)e^{x_3(x_2+x_4)} + x_4e^{(x_1+x_3)x_4} + x_4e^{(x_2+x_3)x_4}) + \lambda + \\ & 256.4216(x_1e^{2x_1x_3} + x_2e^{2x_2x_3} + x_4e^{2x_3x_4}) - 62.1769(x_4e^{x_1x_2+x_3x_4} + x_1e^{x_1x_3+x_2x_4} + x_2e^{x_2x_3+x_1x_4}) + 23.51979e^{2x_3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial l_D}{\partial x_4} = & 16.74585(e^{x_1+x_4} + e^{x_2+x_4} + e^{x_3+x_4}) - 8.57552(e^{x_4+x_2x_1} + e^{x_4+x_1x_3} + e^{x_4+x_3x_2} + x_1e^{x_1x_4+x_2} + x_1e^{x_1x_4+x_3} + \\ & x_2e^{x_2x_4+x_1} + x_2e^{x_2x_4+x_3} + x_3e^{x_3x_4+x_2} + x_3e^{x_3x_4+x_1}) - 24.0437(x_1e^{(x_4+1)x_1} + (x_1+1)e^{(x_1+1)x_4} + (x_2+1)e^{(x_2+1)x_4} + \\ & (x_3+1)e^{(x_3+1)x_4} + x_3e^{(x_4+1)x_3} + x_2e^{(x_4+1)x_2}) - 26.83876(x_1e^{(x_2+x_4)x_1} + x_1e^{(x_3+x_4)x_1} + (x_2+x_1)e^{x_4(x_2+x_1)} + \\ & x_2e^{(x_1+x_4)x_2} + x_2e^{x_2(x_3+x_4)} + (x_1+x_3)e^{x_4(x_1+x_3)} + (x_2+x_3)e^{x_4(x_2+x_3)} + x_3e^{(x_1+x_4)x_3} + x_3e^{(x_2+x_4)x_3}) + \lambda + \\ & 256.4216(x_1e^{2x_1x_4} + x_2e^{2x_2x_4} + x_3e^{2x_3x_4}) - 62.1769(x_3e^{x_1x_2+x_3x_4} + x_2e^{x_1x_3+x_2x_4} + x_1e^{x_2x_3+x_1x_4}) + 23.51979e^{2x_4}, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial l_D}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 - 1.$$

令 $\frac{\partial l_D}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial x_2} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial x_3} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial x_4} = 0, \frac{\partial l_D}{\partial \lambda} = 0$, 则极值点为

$$\begin{aligned} x_{p1} = & (0.10784, 0.10784, 0.10784, 0.67648)^T, x_{p2} = (0.10784, 0.10784, 0.67648, 0.10784)^T, \\ x_{p3} = & (0.10784, 0.67648, 0.10784, 0.10784)^T, x_{p4} = (0.67648, 0.10784, 0.10784, 0.10784)^T, \\ x_{1234} = & (0.25, 0.25, 0.25, 0.25, 0.25)^T. \end{aligned}$$

将 $x_4 = 1 - x_1 - x_2 - x_3$ 代入方差函数 $d(x, \xi_D^*)$, 则目标函数转化为 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$, 由三元连续函数极值存在的充分条件^[16]可知, 函数 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ 在点 x_{1234} 处的 Hesse 矩阵为

$$H = \begin{pmatrix} 29.7284 & 14.8642 & 14.8642 \\ 14.8642 & 29.7284 & 14.8642 \\ 14.8642 & 14.8642 & 29.7284 \end{pmatrix},$$

计算得到 Hesse 矩阵的特征值分别为 59.456 8, 14.864 2, 14.864 2, 故 H 为正定矩阵. 于是 x_{1234} 为极小值点, 且 $\varphi(x_{1234}) = 3.504 91$. 同理可得 $x_{p1}, x_{p2}, x_{p3}, x_{p4}$ 均为极小值点, 且有

$$\varphi(x_{p1}) = \varphi(x_{p2}) = \varphi(x_{p3}) = \varphi(x_{p4}) = 3.08177.$$

方差函数 $d(x, \xi_D^*)$ 在试验域 S^{4-1} 的支撑点 $P_1(1, 0, 0, 0), P_2(0, 1, 0, 0), P_3(0, 0, 1, 0), P_4(0, 0, 0, 1), P_5(0.5, 0.5, 0, 0), P_6(0.5, 0, 0.5, 0), P_7(0.5, 0, 0, 0.5), P_8(0, 0.5, 0.5, 0), P_9(0, 0.5, 0, 0.5), P_{10}(0, 0, 0.5, 0.5)$, 在这些支撑点处的方差函数值均为 10. 于是有 $d(x, \xi_D^*) \leq 10, x \in S^{4-1}$ 成立, 定理证毕.

4 混料模型最优设计效率比较

除了验证设计的最优性, 很多时候由于无法得到等价性定理条件下的最优设计, 这时需要考虑研究设计的效率问题, 于是基于 D -最优准则下的试验设计的效率函数被给出. D -最优设计效率

$$\text{eff}_D(\xi) = \left(\frac{|M(\xi_D^*)|}{|M(\xi)|} \right)^{\frac{1}{p}}.$$

其中 ξ 和 ξ_D^* 分别表示二阶指数混料模型 (2) 下的任意设计与 D -最优设计, p 为待估参数的个数. 于是, 根据第 2 节的讨论, 可以得到的 $q = 3, 4$ 时, D -最优设计准则下测度设计所对应的效率函数分别为

$$\text{eff}_{D_3}(\xi) = 3.4641016(-r_1^3(3r_1-1)^3)^{1/6}.$$

$$\text{eff}_{D_4}(\xi) = 10\left(\frac{1}{6} - \frac{2r_1}{3}\right)^6 r_1^4)^{1/10}.$$

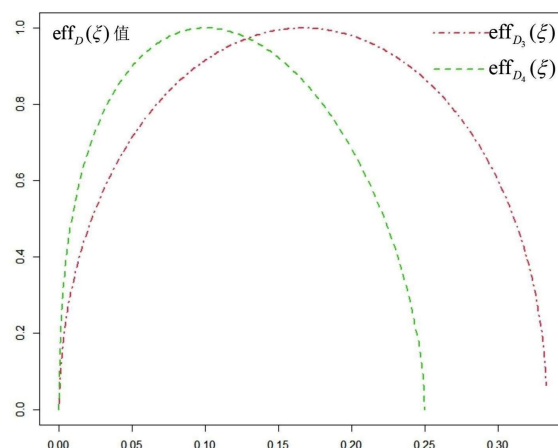


图 3 $q = 3, 4$ 情形下二阶混料指数模型效率函数

Fig.3 Efficiency function of second-order mixture exponential model ($q = 3, 4$)

由图 3 可见, 当 $q = 3, 4$ 时, 设计的效率 $\text{eff}_{D_3}(\xi)$ 和 $\text{eff}_{D_4}(\xi)$ 都随着第一类混料点的测度 w_1 的增加, 出现先增而后减的状态, 并分别在 $r_1 = \frac{1}{6}$ 和 $r_1 = \frac{1}{10}$ 处取到最大值. 效率函数是连续的, 整体具有极大值点, 即任意的一个设计只有在对应的最优权重 r_1^* 处才能以最少的试验次数获得关于试验的最大信息. 同时, 从图 3 中可以发现, 当 $r_1^* = 0.12845$ 时, 设计效率 $\text{eff}_{D_3}(\xi)$ 与 $\text{eff}_{D_4}(\xi)$ 相同, 即两个设计获得相同的试验信息.

5 总结

本文主要以二阶指数混料模型为基础, 研究该混料模型下的 D -最优设计. 并利用饱和设计及混料试验设计基本理论, 得到了 q 分量二阶指数混料模型所对应的信息矩阵, 并给出了 $q = 3$ 时的最优测度配置 ξ_D^* , 同时根据不同最优准则下的最优设计等价性定理, 证明了最优测度配置 ξ_D^* 是最优设计. 最后本文通过比较了不同最优准则下最优设计的效率以及在给定某种最优准则下, 其他最优测度设计在该准则的效率, 从结果中发现, D -最优设

计效率变化相对稳定,并且设计的效率较高.这也与通常情况下,试验者更多的选择 D -最优设计是一致的.

D -最优设计在实际中应用广泛,在单纯形域内构造 D -最优设计,其方差函数可以导出具体的解析形式,而在有附加约束的试验域内,方差函数的形式很难求出,并且难以证明最优性等价定理,此时可以考虑使用优化算法在约束区域内进行搜索,关于混料试验域内的搜索算法可以参阅文献[17-20].对于高阶混料型指数模型在复杂约束域内的最优设计问题仍然是研究的难点,有待进一步研究.

参考文献

- [1] CORNELL J A. Experiments with mixtures: designs, models, and the analysis of mixture data[M]. 3rd ed. New York: John Wiley and Sons, 2002.
- [2] SCHEFFÉ H. Experiments with mixture[J]. Journal of Royal Statistical Society, 1958, 20B: 334-360.
- [3] SCHEFFÉ H. The simplex-centroid design for experiments with mixtures[J]. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological), 1963, 25(2): 235-251.
- [4] BECKER N G. Models for the response of a mixture[J]. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological), 1968, 30(2): 349-358.
- [5] DARROCH J N, WALLER J. Additivity and interaction in three-component experiments with mixtures[J]. Biometrika, 1985, 72(1): 153.
- [6] DRAPER R, PUKELSHEIM F. Mixture models based on homogeneous polynomials[J]. Journal of Statistical Planning and Inference, 1998, 71(1-2): 303-311.
- [7] MELAS V B. Functional approach to optimal experimental design[M]. New York: Springer, 2006.
- [8] SINHAB K, MANDAL P M, PAL M, et al. Optimal mixture experiments[M]. New Delhi: Springer, 2014.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 李光辉, 朱志彬, 李俊鹏等. 混料试验的格点填充设计[J]. 应用数学学报, 2022, 45(4): 607-623.
- [13] 李俊鹏, 李光辉, 张崇岐. 混料试验设计中置换阵的性质及其应用[J]. 工程数学学报, 2023, 40(1): 123-134.
- [14] 华东师范大学数学系. 数学分析-下册[M]. 4版. 北京: 高等教育出版社, 2010.
- [15] ATWOOD C L. Optimal and efficient designs of experiments[J]. The Annals of Mathematical Statistics, 1969, 40(5): 1570-1602.
- [16] 陈宝林. 最优化理论与算法[M]. 2版. 北京: 清华大学出版社, 2005.
- [17] 燕飞, 李光辉, 张崇岐. 异方差可加混料模型的直和及其 D -最优性[J]. 高校应用数学学报A辑, 2023, 38(2): 127-136.
- [18] 李光辉, 张崇岐. 具有复杂约束混料试验的渐进 D -最优设计[J]. 应用概率统计, 2017, 33(2): 203-220.
- [19] 罗嘉成, 张崇岐. 混料试验渐进 D -最优设计的聚类算法[J]. 数理统计与管理, 2022, 41(3): 402-412.
- [20] 李光辉, 李俊鹏, 张崇岐. 复杂约束域内混料最优设计的格点评价[J]. 应用概率统计, 2022, 38(2): 253-266.

(责任编辑:张阳,殷锋,付强,和力新,肖丽;英文编辑:周序林,郑玉才)