

分类号 \_\_\_\_\_  
U D C \_\_\_\_\_

密级 \_\_\_\_\_  
编号 10741 \_\_\_\_\_



## 硕士学位论文

论文题目 混料中心多项式模型的 R-最优与稳健 R-  
最优设计研究

研究生姓名: 郑婷

指导教师姓名、职称: 张崇岐 教授

学科、专业名称: 统计学 数理统计学

研究方向: 复杂数据分析

提交日期: 2022年5月30日

# 独创性声明

本人声明所呈交的论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

学位论文作者签名： 郑婷 签字日期： 2022.5.30

导师签名： 张岩 签字日期： 2022.5.30

# 关于论文使用授权的说明

本人完全了解学校关于保留、使用学位论文的各项规定， 同意（选择“同意” / “不同意”）以下事项：

- 1.学校有权保留本论文的复印件和磁盘，允许论文被查阅和借阅，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文；
- 2.学校有权将本人的学位论文提交至清华大学“中国学术期刊（光盘版）电子杂志社”用于出版和编入CNKI《中国知识资源总库》或其他同类数据库，传播本学位论文的全部或部分内容。

学位论文作者签名： 郑婷 签字日期： 2022.5.30

导师签名： 张岩 签字日期： 2022.5.30

# **R- and Robust R-optimal Design of Central Polynomial Mixture Model**

**Candidate: Zheng Ting**

**Supervisor: Chongqi Zhang**

## 摘要

混料试验设计主要研究的是配方配比中的试验设计问题,它是安排混料试验和分析混料数据的一种数学理论和方法,是数理统计学的重要分支。混料试验设计是约束区域上的优化问题,大多数是以最优设计理论为基础的。它在工农业生产、经营管理和科学研究中有着广泛的应用,给企业和社会带来了极大的经济和社会双重效益。在各种不同的混料模型下,基于不同最优准则的最优设计问题一直是该领域的研究热点,近些年来,相关研究人员将稳健设计与最优设计结合起来研究,探讨混料模型与回归模型的稳健最优设计问题成为了新的研究方向。

首先,本文应用 R-最优准则理论,结合约束条件的限制探讨了二阶中心多项式模型的 R-最优配置问题,并利用 R-准则的等价性定理对所得到的最优配置进行了证明。同时,文章针对三阶的混料中心多项式模型,探讨了三分量三阶中心多项式模型的 R-最优设计问题,并利用 Mathematica 软件给出了三分量三阶混料模型 R-最优设计的数值解。

然后,本文应用稳健 R-最优准则理论,结合约束条件的限制探讨了二阶中心多项式模型的稳健 R-最优配置问题,并计算得到了该最优配置解。对于具体的先验测度,给出了三分量二阶混料模型的稳健 R-最优配置,之后对于所得到的结果利用稳健 R-准则的等价性定理,并结合多元函数的条件极值定理,证明了该稳健最优配置就是稳健 R-最优设计。最后对 R-最优设计与稳健 R-最优设计的效率进行了比较分析。

**关键词:** 中心多项式模型 R-最优设计 稳健 R-最优设计 等价性定理 条件极值



## Abstract

Mixture experiment design mainly studies the experimental design problem in the formula ratio, which is a mathematical theory and method to arrange mixture experiment and analyze mixture data, and is an important branch of mathematical statistics. Mixture experiment design is an optimization problem in the constraint region, most of which is based on optimal design theory. It is widely used in industrial and agricultural production, management and scientific research, and has brought great economic and social benefits to enterprises and society. The optimal design problem based on different optimal criteria has always been a research hotspot in this field under different mixing models. In recent years, relevant researchers combine robust design with optimal design, and it has become a new research direction to discuss the robust optimal design of mixture model and regression model.

Firstly, the R-optimal configuration of the second-degree central polynomial model is discussed by using R-optimal criterion theory, and the obtained optimal configuration is proved by using the equivalence theorem of R-optimal criterion. At the same time, this thesis discusses the R-optimal design problem of the third-degree central polynomial model of the concrete component, and gives the numerical solution of the R-optimal design of the three-component third-degree polynomial model

by using Mathematica software.

Secondly, based on the theory of robust R-optimal criterion, the robust R-optimal configuration of the second-degree central polynomial model is discussed, and the optimal configuration solution is obtained. For the specific prior measure, the robust R-optimal configuration of the three-component second-degree mixture model is given. Then, the robust R-optimal configuration is proved to be the robust R-optimal design by using the equivalence theorem of the robust R-criterion and the conditional extremum theorem of multivariate functions. Finally, the efficiency of R-optimal design and robust R-optimal design is compared and analyzed.

**Keywords:** Central polynomial model; R-optimal design; Robust R-optimal design; Equivalence theorem; Conditional extreme value

# 目 录

<b>1 引言</b>	1
1.1 选题依据	1
1.2 研究的意义与目的	2
1.3 国内外研究现状	3
1.4 主要研究内容及章节安排	5
<b>2 混料试验设计理论知识</b>	7
2.1 混料试验设计概况	7
2.2 最优设计准则及等价性定理	11
2.3 混料试验设计的效率	14
2.4 稳健最优设计相关理论	15
<b>3 混料中心多项式模型的 R-最优设计</b>	18
3.1 模型介绍	18
3.2 二阶模型的 R-最优设计	19
3.3 三阶模型的 R-最优设计	22
<b>4 混料中心多项式模型的稳健 R-最优设计</b>	27
4.1 二阶模型的稳健 R-最优设计	27
4.2 三分量二阶模型的稳健 R-最优设计	29
4.2.1 模型介绍	29
4.2.2 定理证明	30
4.3 效率对比分析	33
<b>5 结论与展望</b>	35
5.1 主要结论	35
5.2 研究不足和有待进一步探讨的问题	35
<b>参考文献</b>	37
<b>攻读硕士学位期间所发表的论文</b>	41

后记.....42

# 1 引言

## 1.1 选题依据

混料试验设计主要研究的是配方配比中的试验设计问题，它在工农业生产、经营管理和科学研究中有着广泛的运用，给企业和社会带来了极大的经济和社会双重效益，它是由 Scheffé 提出来的，距现在有六十多年的发展历史。Scheffé 在 1958 年提出了混料试验设计的概念，给出了试验域的定义和单纯形—格子设计的设计方法，单纯形—格子设计是最基本的方法，至今依旧在很多方面被应用。1963 年，Scheffé 提出了单纯形—中心设计方法，对之前提出的设计方法加以改进。自此之后，相关研究学者对混料试验设计进行了深入的探讨和剖析，提出了各种混料试验设计方法<sup>[1-5]</sup>的新概念，比如 Cox 设计、轴设计、混料均匀设计、最优设计、稳健设计等。在这一发展过程中，各种具有不同实际意义的最优设计准则也被先后提出，运用较广泛的有 A-最优准则、D-最优准则、R-最优准则、I-最优准则等。混料试验中我们感兴趣的指标仅仅与混料分量中各种成分所占的比例或者所含的比例有关系，与混料总的量没有关系，且各混料分量并不可以完全随意变化，需要受到混料基本约束条件的限制。在混料试验设计的发展进程中，研究者最感兴趣的就是最优设计理论和稳健设计理论两方面的研究。

在稳健设计理论方面，稳健性是指影响试验过程的因素发生微小变差时，对试验结果影响的不敏感性，稳健设计是指试验过程在满足稳健性的思想下，对产品的各种性质综合考虑，对此做出最佳设计，使得既能够提高产品的质量，又能够降低生产的成本。在大多数实际情况下，试验者在进行试验之前对其基础模型了解很少，因此只能假定未知模型属于回归模型集，在这种情况下，最优设计问题被称为模型稳健设计，并且得到了广泛的讨论，其中一篇开创性的文章是 1974 年 Läuter 的一类模型的试验设计这篇文章，他通过在有限组可能的模型上平均设计准则函数，引入了 D-最优性准则的模型稳健性版本，基于 Läuter 的研究，国内外相关研究者对此进行了大量的讨论研究，大大促进了稳健最优设计的发展。在关于稳健最优设计的相关文献中，现有工作大多数主要关注的是具体区间上回归模型中的稳健最优设计，对于混料试验设计中相关混料模型的稳健最优设计的

研究则相对较少。

鉴于此，本文从 R-最优准则和稳健 R-最优准则入手，基于混料模型，主要讨论以下内容。第一是讨论了二阶中心多项式模型的 R-最优配置问题、三分量三阶混料中心多项式模型的 R-最优配置问题，并利用等价性定理，证明了二阶混料模型的 R-最优配置在整个单纯形利益区域内是最优的。第二是讨论了二阶中心多项式模型的稳健 R-最优配置问题，给出了三分量二阶混料模型的稳健 R-最优配置，之后对于所得到的结果利用稳健 R-准则的等价性定理并结合多元函数极值定理，证明了得到的该稳健 R-最优配置就是稳健 R-最优设计，最后讨论了 R-最优设计与稳健 R-最优设计的效率。

## 1.2 研究的意义与目的

有关混料模型的稳健最优设计已成为最优混料试验设计的一个重要的研究方向，将稳健 R-最优设计与混料中心多项式模型相结合，研究混料中心多项式模型的稳健 R-最优设计对于提高试验的效率以及产品的质量性能有重要意义。本文是建立  $q$  分量混料中心多项式模型的 R-最优设计和稳健 R-最优设计，整体论文需要覆盖以下目标。

(1) 研究二阶中心多项式模型的 R-最优设计、三阶中心多项式模型的 R-最优设计。文章首先利用 R-最优准则并结合约束条件得到二阶模型的 R-最优配置，然后通过 R-最优准则的等价性进行了证明。另一方面，三阶混料模型不同于二阶，由于三阶自身的复杂性，在实际中并不常用到，但在理论上却有着一定的研究价值，所以很有必要考虑三阶混料中心多项式模型的最优设计，文章探讨三阶混料中心多项式模型的 R-最优配置，对于具体分量的三阶混料中心多项式模型，讨论其 R-最优配置的数值解。

(2) 研究二阶中心多项式模型的稳健 R-最优设计。讨论了二阶中心多项式模型的稳健 R-最优配置问题，给出了三分量二阶混料模型的稳健 R-最优配置，之后对于所得到的结果利用稳健 R-准则的等价性定理并结合多元函数极值定理，证明了得到的该稳健 R-最优配置就是稳健 R-最优设计，并讨论了 R-最优设计与稳健 R-最优设计之间的效率。

### 1.3 国内外研究现状

#### (1) 混料中心多项式模型的研究现状

中心多项式模型最早是由 Scheffé 于 1963 年提出的, 对于中心多项式模型的研究, 1993 年, 关颖男和刘春雨<sup>[6]</sup>给出了  $q$  分量高阶混料中心多项式模型的 A-最优设计的算法研究, 并利用计算机算法举例进行了具体的讨论。1999 年, 佟毅等<sup>[7]</sup>结合 A-最优性准则, 讨论了 A-最优的单纯形-中心设计。2019 年, 冷薇等<sup>[8]</sup>以  $q$  分量中心多项式模型为基础, 研究了高维混料中心多项式模型的 LASSO 变量选择问题, 并对 AIC 准则和 LASSO 在变量选择问题上的优良性进行了比较。

#### (2) R-最优准则的研究现状

1997 年, Dette<sup>[9]</sup>针对给定的线性回归模型, 按照待估参数联合估计的 Bonferroni-t 区间的方法, 构造了一个矩形置信区域, 从而提出了基于该矩形置信区域的一类最优准则——R-最优准则。自 Dette 提出 R-准则以来, 该最优准则的理论研究就受到了许多研究者的关注。2000 年, 赵洪雅等<sup>[10]</sup>介绍了二阶 Scheffé 正则多项式模型参数估计的 R-最优设计问题。进一步, 2001 年, 赵洪雅等<sup>[11]</sup>对于  $q-1$  维的二阶可加混料模型, 介绍了其参数估计的 R-最优设计问题。2012 年, 孙超<sup>[12]</sup>将 R-最优设计的思想推广到随机系数模型的情形中, 在结论中给出了随机系数模型 R-最优设计的简单性质和等价性定理, 并介绍了该模型 R-最优设计的迭代算法。2013 年, Liu 和 Yue<sup>[13]</sup>对于多响应回归模型, 讨论了该模型的最优设计问题, 并将 R-最优准则从单响应模型推广到了多响应模型, 同时针对该多响应模型, 给出了它对应的 R-最优设计的等价性定理。2014 年, Liu 等<sup>[14]</sup>考虑了多因素回归模型的 R-最优设计问题, 结果表明, 对于具有完全交互作用的 Kronecker 乘积型模型, 其乘积型设计是最优的。同年, Liu 等<sup>[15]</sup>讨论了随机系数回归模型的 R-最优近似设计问题, 并给出了随机系数回归模型 R-最优性的等价性定理。2015 年, Liu 等<sup>[16]</sup>在模型稳健框架下扩展了由 Dette 提出的 R-最优性准则, 将 R-最优性推广到模型稳健最优设计, 其中先验概率设置在一类候选线性模型上, 并证明了 Elfving 定理的推广, 给出了模型稳健 R-最优设计的几何刻画。2016 年, Liu 等<sup>[17]</sup>考虑了二阶响应面模型 R-最优设计的构造问题, 并给出了在  $k$  维单位立方体和单位球上二阶响应面模型 R-最优设计的构造算法。2017 年, 李俊鹏等<sup>[18]</sup>对于  $q$  分量二阶混料 K 模型, 讨论了其 R-最优设计的问题。

2018 年, 晋珊<sup>[19]</sup>对于 Logistic 回归模型, 讨论了该模型的 R-最优设计问题。2018 年, 胡小玲<sup>[20]</sup>结合混料最优设计的思想, 对于二阶塌落模型, 讨论了该模型的 R-最优设计问题。2019 年, Liu 和 Yue<sup>[21]</sup>研究了多响应线性模型中 R-最优设计的构造问题, 证明了 Elfving 定理在 R-最优性方面的推广, 并给出了 R-最优设计的几何刻画。2019 年, 贺磊<sup>[22]</sup>讨论了基于 R-准则下最优试验设计的若干问题, 并细化研究了多种不同混料模型所对应的 R-最优问题。2021 年, Hao 等<sup>[23]</sup>对于二阶混料规范多项式模型, 研究了该模型的 R-最优设计问题。

### (3) 稳健最优设计的研究现状

在大多数实际情况下, 试验者在进行试验之前对其基础模型了解很少, 因此只能假定未知模型属于回归模型集  $\mathcal{F}_m$ , 在这种情况下, 最优设计问题被称为模型稳健设计, 并得到了广泛的讨论。其中一篇开创性的文章是 1974 年 Läuter 的一类模型的试验设计这篇文章, 他通过在有限组可能的模型上平均设计准则函数, 引入了 D-最优性准则的模型稳健性版本。基于 Läuter 的研究, 1982 年, Cook 和 Nachtsheim<sup>[24]</sup>考虑了当多项式的阶数未知时的多项式回归模型下的最优设计问题。1993 年, Dette<sup>[25]</sup>将 c-最优性准则推广到了模型的稳健情况, 并得到了 D-最优性的几何特征。1995 年, Dette 和 Studden<sup>[26]</sup>建立了相对于 D-最优设计效率的加权平均值的准则, 并对未知阶数的多项式回归最优设计问题进行了更深入的研究。1997 年, Liu 和 Wiens<sup>[27]</sup>考虑了当真实响应模型与假设回归模型之间存在一个有界偏差函数的近似多项式回归模型的稳健设计。2000 年, Dette 和 Franke<sup>[28]</sup>考虑了多项式回归的约束 D-和  $D_1$ -最优设计。2007 年, 刘欣和岳荣先<sup>[29]</sup>针对多响应近似线性回归模型, 讨论了该模型的 D-最优稳健设计问题。2008 年, 金红娣<sup>[30]</sup>对混料试验设计中的若干问题进行了研究, 其中讨论了当混料模型存在偏差时的最优稳健设计问题。2009 年, Huang 等人<sup>[31]</sup>研究了当不确定一阶或二阶多项式回归模型是否合适时, 得到了相对于某个设计准则的完备设计类, 并在给定的先验测度下, 利用效率的最小最大准则获得了相关的先验测度和设计。2015 年, Liu 等<sup>[16]</sup>对于线性回归模型, 探讨了其稳健 R-最优设计的问题, 将 R-最优性推广到模型稳健最优设计上。2017 年, 李俊鹏等<sup>[32]</sup>运用稳健 D-最优设计准则相关理论知识及其等价性定理和函数极值定理, 探讨了当先验测度已知时可加混料模型的最优稳健设计问题, 并针对前后所得到的结果, 将该混料模型的 D-最



优设计与稳健 D-最优设计的效率进行了比较, 得出后者的效率高于前者。同年, 李俊鹏在其硕士论文<sup>[33]</sup>中, 对于  $q$  分量二阶混料 K 模型, 研究了其稳健 R-最优设计的相关问题, 并结合等价性定理和多元函数极值条件定理证明了所得到的结果就是模型的稳健 R-最优设计。

综上所述, 通过仔细梳理国内外相关研究文献, 发现学者们对稳健最优设计准则方法做了大量研究, 取得了一些有意义的成果, 为论文后续的研究提供了参考。但深入分析发现仍存在问题值得进一步探究。

第一, 对最优设计而言, 高阶混料模型最优设计的研究较少。对于混料模型中最优设计的研究, 相关文献也只讨论了二阶模型的最优设计问题, 对二阶以上的模型的讨论比较少, 因此, 有必要将高阶模型的最优设计理论引入到混料试验设计的研究上来。

第二, 对稳健最优设计而言, 混料模型稳健最优设计的研究较少。目前的大部分工作主要关注的是具体区间上回归模型的相关稳健最优设计问题, 对于混料试验设计中相关混料模型的稳健最优设计的研究则相对较少。

## 1.4 主要研究内容及章节安排

论文的主要内容是利用相应的最优准则对混料中心多项式模型进行研究。运用 R-最优准则、稳健 R-最优准则知识, 获得了相应二阶及三阶混料中心多项式模型 R-最优配置的表达式、二阶混料中心多项式模型的稳健 R-最优配置。同时, 针对具体分量的混料中心多项式模型, 根据稳健 R-最优准则的等价性定理和多元函数条件极值定理, 证明了前面得到的最优配置就是稳健 R-最优设计的。论文总共分为五个章节, 各章节的研究内容设计如下:

第一章, 主要介绍论文的选题依据以及研究目的和意义, 并对国内外的研究文献进行了综述, 给出了文章结构流程图。

第二章, 主要介绍混料试验设计的发展历程, 介绍论文研究所需要的一些理论基础知识, 为后面两章的进一步研究做好铺垫。

第三章, 研究二阶和三阶混料中心多项式模型 R-最优设计的问题。主要给出了二阶中心多项式模型的 R-最优设计, 另一方面, 由于实际中需保持预测值的精度, 需要适当提高模型的阶数, 所以探讨了二阶混料中心多项式模型的 R-

最优设计问题，并对于具体的该混料模型，讨论了模型 R-最优设计所对应的最优配置。

第四章，研究二阶中心多项式模型稳健 R-最优设计的问题。基于 R-最优设计理论知识，利用模型稳健 R-最优设计理论，结合约束条件的限制讨论了二阶中心多项式模型稳健 R-最优设计的问题，并利用稳健 R-最优准则的等价性定理和多元函数极值定理，对其进行了证明，在最后讨论了 R-最优设计与稳健 R-最优设计的效率比较分析。

第五章，归纳整理了论文的研究结果，并指出了研究的不足以及有待进一步探讨的问题。

文章内容结构的流程图框架如下所示。

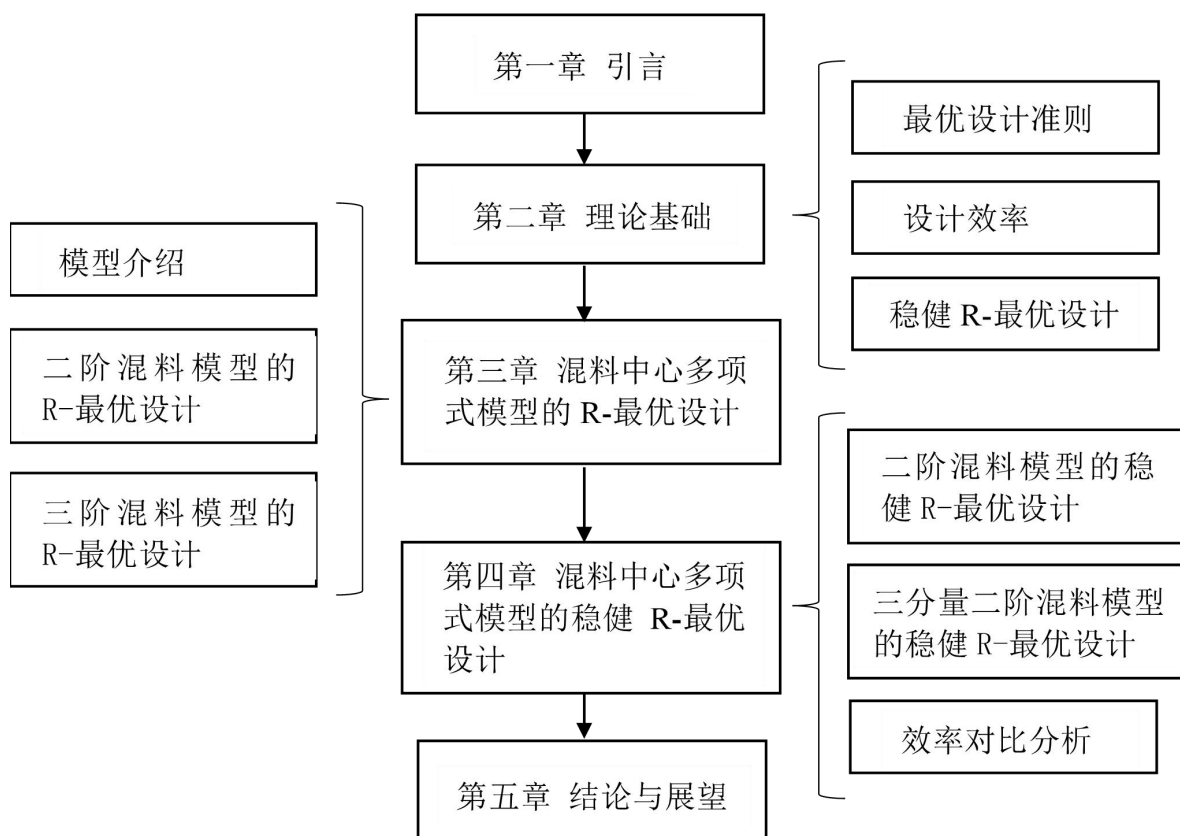


图 1.1 技术路线图

## 2 混料试验设计理论知识

在日常生产及科学研究中,经常会遇到一些配方配比方面的问题,并且绝大多数产品都是由多种成分混合制作出来的,例如不锈钢合金是由铁、镍、铜和铬四种元素组成的。在这个过程中,我们感兴趣的指标是不锈钢合金的强度,该指标是与不锈钢合金中的每种成分含量在试验总量中所占的比例有关。对于我们感兴趣的指标,想办法计算出每种成分在混料总量中占的比例大小,从而使得所感兴趣的指标可以在某一特定的意义下达到最优状态,这是生产及试验过程中需要重点关注的问题。

### 2.1 混料试验设计概况

混料试验设计的应用非常普遍,它与生产生活及科学的关系十分密切,因此近几十年来混料试验设计快速发展。其中发展最为迅速的最优试验设计就是在假设模型形式已知的前提下,对试验域内设计点的选择情况进行讨论,确定出合理的试验点进行试验,并以较少的试验次数,来获得模型最优的参数估计。

在混料试验中,混料总量中的各个分量所占总体的百分比是不可以随便变化的,它们会受到约束条件的限制,并且这些百分比都是大于等于 0 的,而且它们加起来必须为 1。在关于  $q$  分量的混料系统中,各混料成分的占比  $x_i (i = 1, 2, \dots, q)$  需要服从下面的约束条件

$$\begin{cases} x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, q, \\ \sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1. \end{cases} \quad (2-1)$$

从而构成了混料系统中  $q-1$  维正规单纯形

$$S_{q-1} = \left\{ (x_1, x_2, \dots, x_q) \mid \sum_{i=1}^q x_i = 1, x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, q \right\}.$$

把满足式(2-1)的变量  $x_i (i = 1, 2, \dots, q)$  称为混料变量或者称为混料分量。式(2-1)称为混料问题中最基本的约束条件。混料试验中各个变量只受式(2-1)限制的问题称为无附加约束的混料问题。除无附加约束的混料问题之外,还有有约束的

混料问题。例如，在一些受到实际问题限制的混料问题中，除了对各个分量  $x_1, x_2, \dots, x_q$  有式 (2-1) 的约束外，还需要再添加其它的约束条件，比如经常见到的是各个分量或者某几个分量  $x_i$  不是从 0 变化到 1，而是限制在  $[0,1]$  区间中的一个小的子区间内变化，形成如下式所示的混料问题

$$\begin{cases} 0 \leq a_i \leq x_i \leq b_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, q \\ \sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1. \end{cases}$$

其中，参数  $a_i$  表示分量  $x_i$  的下界， $b_i$  表示分量  $x_i$  的上界，这两个参数是根据实际问题取值的。

对于混料问题中各混料分量  $x_i (i = 1, 2, \dots, q)$  受到式 (2-1) 约束的几何阐述就是：混料试验的试验点需要在  $q-1$  维的正规单纯形内安排，其中纯混料问题是指仅由某一种成分组成的混料，完全混料问题是指由试验中全部的分量共同组成的混料。纯混料分量的作用是用来作比较，主要用于与好几种混料成分组成的混料问题相对照。在  $q-1$  维的正规单纯形上，其中一维棱上的点是由两种混料成分组成的，二维面的点是由三种混料成分组成的，……，以此类推， $k$  维边界面上的点是由  $k+1$  种混料成分组成的。由所有的混料成分组成的点称为混料单纯形的内点。接下来简单介绍两种经常用到的混料设计方法。

### (1) 单纯形—格子设计

单纯形—格子设计<sup>[34]</sup>为之后学者提出的各类试验设计方法奠定了基础，现今依旧在许多领域中被应用，它是在 1958 年由 Scheffé 提出的。在单纯形—格子设计中，整个的正规单纯形是它对应的利益区域，而它所对应的数学模型并不是常见到的普通多项式，而是混料规范多项式模型。对于已知的混料规范多项式模型，单纯形—格子设计就是将设计点安排在对阶数的正规单纯形的格子点上。 $q-1$  维正规单纯形  $n$  阶格子点集的表达式可表示为

$$\{q, n\} = \left\{ \left( \frac{\alpha_1}{n}, \frac{\alpha_2}{n}, \dots, \frac{\alpha_q}{n} \right) \mid \sum_{i=1}^q \alpha_i = n, \alpha_i \geq 0, \alpha_i \in \mathbb{Z}, i = 1, 2, \dots, q \right\}.$$

这个格子点集共有  $C_{q+n-1}^n$  个格子点，该格子点的个数与  $q$  分量  $n$  阶混料规范多项式的项数相等，所以单纯形—格子设计是一种饱和最优设计，它在试验中的试验点的个数是最少的。

下面介绍四种在混料试验设计中经常见到的混料规范多项式。

(a)  $q$  分量一阶混料规范多项式为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i.$$

(b)  $q$  分量二阶混料规范多项式为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j.$$

(c)  $q$  分量三阶混料规范多项式为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i < j} \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i < j < k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k.$$

(d)  $q$  分量四阶混料规范多项式为

$$\begin{aligned} \eta = & \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i < j} \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i < j} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 + \\ & \sum_{i < j < k} \beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k + \sum_{i < j < k} \beta_{ijk} x_i x_j^2 x_k + \sum_{i < j < k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k^2 + \sum_{i < j < k} \beta_{jik} x_i x_j x_k^2 + \\ & \sum_{i < j < k < l} \beta_{ijkl} x_i x_j x_k x_l. \end{aligned}$$

表 2.1 给出了常见单纯形一格子设计的试验点个数与所对应的混料规范多项式回归模型阶数之间的关系。

表 2.1 单纯形一格子设计的试验点数

分量 $q$	回归模型的阶数 $n$		
	2	3	4
3	6	10	15
4	10	20	35
5	15	37	70
6	21	56	126
8	36	120	330
10	55	220	715

(2) 单纯形—中心设计

Scheffé在 1963 年提出了单纯形—中心设计<sup>[35]</sup>的设计方法，主要是因为单纯形-格子设计有两个不可避免的缺点，一是运用回归方程的过程中，往往要有  $q$  分量混料响应的预测值，但是平常用到的回归方程是通过拟合单一分量的响应观测值，二分量混料的响应观测值，……， $n$  分量混料的响应观测值而得到的，久而久之人们开始对使用这样的回归方程来预测  $q$  分量混料响应的可靠性产生了怀疑。二是  $q$  分量  $n$  阶单纯形—格子设计共有  $C_{q+n-1}^n$  个试验点，当混料模型从低阶变到高阶时，在试验中所需用到的试验点的个数依旧比较多。针对这些不足之处，单纯形—中心设计的方法被提出，它采用了一种新的混料模型—— $q$  分量中心多项式模型，具体形式为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \cdots + \beta_{12\dots q} x_1 x_2 \cdots x_q. \quad (2-2)$$

$q$  分量单纯形—中心设计的试验点总共有  $2^q - 1$  个，分别是：

$(1, 0, \dots, 0)$  的  $q$  个纯混料，

$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0)$  的  $C_q^2$  个二分量等比例混料，

$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \dots, 0)$  的  $C_q^3$  个三分量等比例混料，

……

$(\frac{1}{q}, \frac{1}{q}, \dots, \frac{1}{q})$  的所有分量的等比例混料。

也就是说， $q$  分量单纯形—中心设计中的设计点是由混料分量的各个非空子集构成的，而且各个试验点的分量值要么相等，要么为 0。有的  $q$  分量混料系统的试验并不需要高阶项，为了进一步减少试验点的个数，可将上式 (2-2) 中的  $m$  阶以上的高阶项删掉，使用  $q$  分量  $m$  阶中心多项式回归模型

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j + \cdots + \sum_{i_1<i_2<\dots<i_m} \beta_{i_1 i_2 \dots i_m} x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_m}. \quad (2-3)$$

对于式 (2-3)， $m$  阶广义单纯形—中心设计的设计方案是：

$C_q^1$  个单纯形顶点，

$C_q^2$  个两顶点中心，

……

$C_q^m$  个  $m$  顶点中心。

广义单纯形—中心设计的设计矩阵如表 2.2 所示。

表 2.2 广义单纯形—中心设计的设计矩阵

试验点	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\cdots$	$x_{q-1}$	$x_q$	$x_1x_2$	$x_1x_3$	$x_{q-1}x_q$	$x_1x_2x_3 \cdots x_{q-2}x_{q-1}x_q$	频数
1	1	0	0	$\cdots$	0	0					
2	0	1	0	$\cdots$	0	0					
$\vdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$					
$q$	0	0	0	$\cdots$	0	1					
$C_q^1 + 1$	1/2	1/2	0	$\cdots$	0	0	1/4	0	$\cdots$	0	
$C_q^1 + 2$	1/2	0	1/2	$\cdots$	0	0	0	1/4	$\cdots$	0	
$\vdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$r_1$
$C_{q+1}^2$	0	0	0	$\cdots$	1/2	1/2	0	0	$\cdots$	1/4	
$C_{q+1}^2 + 1$	1/3	1/3	1/3	$\cdots$	0	0	1/9	1/9	$\cdots$	0	1/27
$\vdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	0
$C_{q+1}^2 + C_q^3$							0	0	$\cdots$	1/9	0
$\vdots$											1/27
$\vdots$											

## 2.2 最优设计准则及等价性定理

最优设计是 Kiefer 在 1959 年提出来的，它是学者非常关注的一类设计。一般情况下，最优设计是在模型给定时，研究它的设计点是怎么选择的，并确定出各设计点所对应的测度，使得给定模型里所需要计算的未知参数能够得到最佳估计。经常使用到的最优设计准则有 D-最优设计、A-最优设计、R-最优设计、 $I_\lambda$ -最优设计等。

对于混料系统中  $q-1$  维正规单纯形  $S_{q-1}$ ，假设我们考虑的一般线性模型的基本形式为

$$y = \beta^T f(\mathbf{x}) + \varepsilon.$$

这里  $y$  为响应变量,  $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_q)^T \in \mathcal{X} \subseteq S_{q-1}$  是试验域内任一点, 函数  $f(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \dots, f_n(\boldsymbol{x}))^T$  是关于混料设计点  $\boldsymbol{x}$  的已知向量, 参数  $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)^T$  表示  $n$  维未知参数向量。参数  $\varepsilon$  表示随机扰动项, 一般假设  $E(\varepsilon) = 0, \text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2$ , 在试验域中, 不相同的试验点处观测值之间是相互独立的。

记  $\boldsymbol{x}_j = (x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jq}) \in \mathcal{X}, j = 1, 2, \dots, N$  是试验域  $\mathcal{X}$  中的  $N$  个试验点, 记  $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$  为  $N$  次试验的结果。若  $N$  次试验共有  $k$  个不同的设计点, 记为  $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_k$ 。

通常假设试验域中试验点  $\boldsymbol{x}_i$  的测度是  $r_i$ , 则任一  $k$  点设计可表示为

$$\xi = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_k \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_k \end{pmatrix}.$$

记  $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_k), r = (r_1, r_2, \dots, r_k)$ , 那么  $\boldsymbol{x}$  是设计  $\xi$  的试验点的集合,  $r$  是与每一个试验点的集合相关的测度向量, 且  $\sum_{i=1}^k r_i = 1$ , 设计  $\xi$  一般简记为  $\xi = (\boldsymbol{x}; r)$ 。

我们称  $\xi \in \Xi$  是具有测度向量的  $k$  点设计,  $\Xi$  代表所有设计的全集, 将  $\Xi$  称之为设计空间。一个设计  $\xi$  所对应的信息矩阵可定义为

$$\boldsymbol{M}(\xi) = \int_{\mathcal{X}} f(\boldsymbol{x}) f^T(\boldsymbol{x}) \xi(d\boldsymbol{x}).$$

最优设计就是确定出设计  $\xi^* \in \Xi$ , 使得在某种意义下达到最优, 也就是找到某一种实泛函  $\Phi(\xi) = \Phi(\boldsymbol{M}(\xi))$ , 并使它达到最大。根据不同的实际应用背景, 学者们创新性地介绍了各种信息矩阵所对应的实泛函, 文章<sup>[36]</sup>中详细介绍了一些比较常使用到的最优设计准则。本文主要介绍以下几种设计准则及其所对应的一般等价性定理。

### (1) D-最优设计准则

D-最优准则的统计意义就是把设计所对应的信息矩阵行列式进行最大化, 从而使得参数向量的置信椭球体的体积达到最小。一个可行设计  $\xi^*$  称为是 D-最优的, 如果存在设计  $\xi^*$  使得信息矩阵  $\boldsymbol{M}(\xi)$  的行列式达到最大化, 即



$$\max |\mathbf{M}(\xi^*)|.$$

D-最优设计的等价定理可以用来判断一个设计是否为 D-最优。对于任意的  $\tau \in \mathcal{X}$ ,  $f^T(\tau)\mathbf{M}^{-1}(\xi)f(\tau)$  称为关于  $\tau$  的方差函数, 令

$$\psi_D(\tau, \xi) = f^T(\tau)\mathbf{M}^{-1}(\xi)f(\tau).$$

设计  $\xi^*$  是 D-最优设计当且仅当

$$\max_{\tau \in \mathcal{X}} \psi_D(\tau, \xi) = n,$$

其中  $n$  为参数个数。该等价性定理也就是使得方差函数的最大值等于回归方程中未知参数的个数。

### (2) A-最优设计准则

A-最优准则的统计意义是将信息矩阵的逆矩阵的迹最小化, 从而使得各未知参数估计的置信区间长度的平方和最小。一个可行设计  $\xi^*$  称为 A-最优的, 如果存在设计  $\xi^*$  使得信息矩阵  $\mathbf{M}(\xi)$  的逆的迹最小, 即

$$\min \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)).$$

A-最优设计的等价定理可以用来判断一个设计是否为 A-最优。若设计  $\xi^*$  是 A-最优设计当且仅当

$$f^T(\tau)\mathbf{M}^{-2}(\xi^*)f(\tau) \leq \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)).$$

### (3) $I_\lambda$ -最优设计准则

$I_\lambda$ -最优准则的统计意义是使得设计的平均预测方差在整个试验区域上达到最小。设计  $\xi^*$  称为  $I_\lambda$ -最优的, 如果该设计  $\xi^*$  所对应的方差函数在试验区域上的平均预测方差最小, 即

$$\min \text{tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)\mathbf{B}).$$

其中,  $\mathbf{B} = \int_{S^{q-1}} f(\tau)f^T(\tau)d\tau$ .

$I_\lambda$ -最优设计的等价定理可以用来判断一个设计是否为  $I_\lambda$ -最优。设计  $\xi^*$  是  $I_\lambda$ -最优设计当且仅当

$$f^T(\tau)\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)f(x) \leq \text{tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)\mathbf{B}).$$

### (4) R-最优设计准则

R-最优准则的统计意义是将信息矩阵的逆矩阵的对角线元素的乘积最小化,从而使得参数的Bonferroni t-置信区间区域的体积最小。设计 $\xi^*$ 称为是 R-最优的,如果存在设计 $\xi^*$ 使得信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 的逆矩阵的主对角线元素的乘积最小,即

$$\min \prod_{i=1}^m (\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii}. \quad (2-4)$$

其中 $(\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii}$ 是信息矩阵的逆矩阵中主对角线上的第  $i$  个元素。

R-最优设计的等价定理可以用来判断一个设计是否为 R-最优。设计 $\xi^*$ 是 R-最优设计当且仅当

$$\sum_{i=1}^n \frac{(e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) f(\mathbf{x}))^2}{e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) e_i} \leq n, \quad (2-5)$$

其中,  $e_i = (0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0)^T$  是  $n$  维单位列向量, 它的第  $i$  个元素是 1, 其余元素都是 0。  $n$  表示参数空间上的维数, 式 (2-5) 中设计点  $\mathbf{x}$  为支撑点时取等号。

所有的最优设计准则都是基于对模型中未知参数估计的优劣情况而提出的, 每个准则的出发点都是一样的, 但是它们的侧重点不一样, 对应的实际意义也不一样。混料试验设计就是在满足这些准则的基础上给出一个设计的具体方案, 而衡量一个设计的效果好坏是利用混料试验设计的效率, 因此, 接下来简单介绍几种常见的混料试验设计的效率。

## 2.3 混料试验设计的效率

张建方<sup>[37]</sup>在《关于试验设计的效率及有关问题》一文中指出效率是用来描述投入方式及过程的有效性的一种度量, 是衡量一个设计最优性的量。效率是试验设计的根本出发点和一直追求的主要目标, 是试验设计方法好坏的重要标志。对于混料试验设计, 可定义不同混料准则下的效率。

(1) D-最优设计准则下的效率为

$$e_D(\xi) = \left( \frac{\det(\mathbf{M}(\xi))}{\det(\mathbf{M}(\xi_D))} \right)^{\frac{1}{n}}.$$

(2) A-最优设计准则下的效率为

$$e_A(\xi) = \frac{Tr(\mathbf{M}^{-1}(\xi_A))}{Tr(\mathbf{M}^{-1}(\xi))}.$$

(3) R-最优设计准则下的效率为

$$e_R(\xi) = \left( \frac{\prod_{i=1}^n (\mathbf{M}^{-1}(\xi_R))_{ii}}{\prod_{i=1}^n (\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii}} \right)^{\frac{1}{n}}.$$

(4)  $I_\lambda$ -最优设计准则下的效率为

$$e_{I_\lambda}(\xi) = \frac{Tr(\mathbf{M}^{-1}(\xi_{I_\lambda})\mathbf{B})}{Tr(\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{B})}.$$

其中,  $\mathbf{B} = \int_{S^{q-1}} f(\boldsymbol{\tau})f^T(\boldsymbol{\tau})d\boldsymbol{\tau}$ .

(5) G-最优设计准则下的效率为

$$e_G(\xi) = \frac{j+1}{\max d(x, \xi)}.$$

(6) E-最优设计准则下的效率为

$$e_E(\xi) = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{M}^{-1}(\xi_{E,i}))}{\lambda(\mathbf{M}^{-1}(\xi))}.$$

其中,  $\xi_D$ 表示模型的 D-最优设计,  $\xi_A$ 表示 A-最优设计,  $\xi_R$ 表示 R-最优设计,  $\xi_{I_\lambda}$ 表示  $I_\lambda$ -最优设计,  $\xi$ 为各准则下的任一设计,  $\det(\mathbf{M}(\xi))$ 表示设计  $\xi$  的信息矩阵的行列式,  $Tr(\mathbf{M}(\xi))$ 表示信息矩阵的迹,  $\lambda(\mathbf{M})$ 表示矩阵  $\mathbf{M}(\xi)$  的特征根,  $d(x, \xi)$ 为模型所对应的离差函数,  $n$ 为模型中未知参数的个数。

## 2.4 稳健最优设计相关理论

稳健设计是当影响期望响应的因素发生微小变化时,对期望响应的影响不敏感。考虑回归模型集

$$\mathcal{F}_m = \left\{ g_l \mid g_l(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_l^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}_l, l = 1, \dots, m \right\}, \quad (2-6)$$

式 (2-6) 中,  $m$  为模型的个数, 参数  $\boldsymbol{\theta}_l = (\theta_{l1}, \dots, \theta_{lk_l})^T$  表示  $k_l$  维的未知向量, 函数  $\mathbf{f}_l(\mathbf{x}) = (f_{l1}, \dots, f_{lk_l})^T$  表示  $k_l$  维的回归向量, 回归函数在设计空间  $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^q$  上连续且线性独立。

在大多数实际情况下, 试验者在进行试验之前对其基础模型了解很少, 因此只能假定未知模型属于回归模型集  $\mathcal{F}_m$ , 在这种情况下, 最优设计问题被称为模型稳健设计, 并得到了广泛的讨论。其中一篇开创性的文章是 Läuter<sup>[5]</sup>研究讨论

的, 他通过在有限组可能的模型上平均设计准则函数, 引入了 D-最优性准则的模型稳健性问题。基于 Läuter, Cook 和 Nachtsheim<sup>[24]</sup>考虑了当多项式模型的阶数未知时的最优设计问题。Dette<sup>[25]</sup>将 c-最优性准则推广到模型的稳健情况, 得到了 D-最优性的几何特征。Dette 和 Studden<sup>[26]</sup>建立了相对于 D-最优设计效率的加权平均值的准则, 并对未知阶数的多项式回归最优设计问题进行了更深入的研究。Dette 和 Franke<sup>[28]</sup>考虑了多项式回归的约束 D-和 D<sub>1</sub>-最优设计。Huang<sup>[31]</sup>等讨论了混料试验中模型稳健 D-和 A-最优设计。

常见的稳健最优设计包括稳健 D-最优设计、稳健 A-最优设计和稳健 R-最优设计, 接下来重点介绍稳健 R-最优设计的概念。

考虑近似设计

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix},$$

其中  $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X} \subseteq S^{q-1}$ ,  $0 < r_i \leq 1$ ,  $\sum_{i=1}^n r_i = 1$ 。在模型集类  $\mathcal{F}_m$  下, 模型  $g_l$  的设计  $\xi$  对应的信息矩阵为  $M_l(\xi) = \int_{\mathcal{X}} f_l(\mathbf{x}) f_l^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x})$ 。设  $w_1, w_2, \dots, w_m$  为正数且  $\sum_{l=1}^m w_l = 1$ , 向量  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_m)^T$  是模型集类  $\mathcal{F}_m$  对应的一组先验向量且  $w_l, l = 1, 2, \dots, m$  反映了试验者对模型  $g_l$  的可信程度。Liu 等<sup>[16]</sup>给出了一个稳健 R-最优性的定义, 对 Läuter 提出的稳健性问题的 R-最优性准则做了推广。

设  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_m)^T$  是类  $\mathcal{F}_m$  的先验测度向量, 满足  $w_l > 0$  且  $\sum_{l=1}^m w_l = 1$ , 设计  $\xi^* \in \Xi$  称为稳健 R-最优的, 如果设计  $\xi^*$  使得下式最小化

$$\begin{aligned} \psi_w^R(\xi) &= \sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \log \left( \prod_{i=1}^{k_l} (M_l^{-1}(\xi))_{ii} \right) \\ &= \sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \log \left( \prod_{i=1}^{k_l} \mathbf{e}_{li}^T M_l^{-1}(\xi) \mathbf{e}_{li} \right). \end{aligned} \quad (2-7)$$

其中,  $\mathbf{e}_{li}$  表示  $\mathbb{R}^{k_l}$  上的第  $i$  个单位向量。

Liu 等<sup>[16]</sup>指出, 一般等价性定理在混料试验设计中有着重要的作用, 于是介绍了模型稳健 R-最优的等价性定理。并且为了比较不同准则下设计的效率, 对于任给的设计  $\xi$ , 定义了该设计的 R-效率和 D-效率。

对于给定的向量  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_m)^T$ ,  $\sum_{l=1}^m w_l = 1$ , 对于类  $\mathcal{F}_m$ , 设计  $\xi^*$  相

对于先验 $\boldsymbol{w}$ 是稳健 R-最优的当且仅当

$$\sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \boldsymbol{f}_l^T(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{M}_l^{-1}(\xi) \sum_{i=1}^{k_l} \frac{\boldsymbol{e}_{li} \boldsymbol{e}_{li}^T}{\boldsymbol{e}_{li}^T \boldsymbol{M}_l^{-1}(\xi) \boldsymbol{e}_{li}} \boldsymbol{M}_l^{-1}(\xi) \boldsymbol{f}_l(\boldsymbol{x}) \leq 1. \quad (2-8)$$

其中 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$ ，当且仅当在 $\xi^*$ 的支撑点上取等号。

设计 $\xi$ 的 R-效率为

$$\text{Eff}_R(\xi) = \frac{\psi_{\boldsymbol{w}}^R(\xi_R^*)}{\psi_{\boldsymbol{w}}^R(\xi)} = \frac{\sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \log \left( \prod_{i=1}^{k_l} (\boldsymbol{M}_l^{-1}(\xi_R^*))_{ii} \right)}{\sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \log \left( \prod_{i=1}^{k_l} (\boldsymbol{M}_l^{-1}(\xi))_{ii} \right)}.$$

设计 $\xi$ 的 D-效率为

$$\text{Eff}_D(\xi) = \frac{\psi_{\boldsymbol{w}}^D(\xi)}{\psi_{\boldsymbol{w}}^D(\xi_D^*)} = \frac{\sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \log |\boldsymbol{M}_l(\xi)|}{\sum_{l=1}^m \frac{w_l}{k_l} \log |\boldsymbol{M}_l(\xi_D^*)|}.$$

### 3 混料中心多项式模型的 R-最优设计

在混料试验设计中, 相关学者对混料模型的 D-最优设计进行了大量的研究, 极大地促进了 D-最优设计的发展。D-最优准则的几何意义是最小化模型参数向量的置信椭球体的体积, 但当模型参数的维数较大时, 该置信椭球体的体积不方便计算, 且对于它的解释也比较复杂。基于此, 为克服 D-最优准则的不足之处, Dette 基于 Bonferroni t-区间法

$$\mathfrak{R} = \left\{ \theta \in \mathbb{R}^k \mid |\vartheta_i - \hat{\vartheta}_i^{(n)}| \leq \hat{s}_n t_{n-k, 1-\frac{\alpha}{2k}} \sqrt{((\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})_{ii}}, i = 1, \dots, k \right\}.$$

其中  $\hat{s}_n^2$  和  $\hat{\vartheta}_i^{(n)}$ ,  $i = 1, \dots, k$  表示  $\sigma^2$  和  $\vartheta_i$  的最大似然估计, 构造了参数联合估计的  $k$  维矩形置信区域。该  $k$  维矩形置信区域的体积与乘积  $\left\{ \prod_{j=1}^k ((\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})_{jj} \right\}^{1/2}$  成比例, 想要使  $\mathfrak{R}$  的体积达到最小, 另一类最优准则即 R-最优准则由此产生。R-最优设计的统计意义是将信息矩阵的逆矩阵的主对角线元素的乘积最小化, 从而使得其 Bonferroni t-置信区域的体积达到最小。

#### 3.1 模型介绍

对于  $q$  分量混料系统来说,  $q-1$  维正规单纯形  $S_{q-1}$  上的  $q$  阶单纯形中心多项式模型为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i < j < k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots + \beta_{12\dots q} x_1 x_2 \dots x_q. \quad (3-1)$$

在关于  $q$  个分量的单纯形—中心设计中, 总共有  $2^q - 1$  个不一样的试验点数, 分别为:

$q$  个纯混料,

$C_q^2$  个二分量等比例混料,

$C_q^3$  个三分量等比例混料,

.....

全部分量的等比例混料。

特别地, 当阶数  $n=2$  时,  $q-1$  维正规单纯形  $S_{q-1}$  上的  $q$  分量二阶中心多项式

模型为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{1 < i < j < q} \beta_{ij} x_i x_j, \quad (3-2)$$

模型 (3-2) 中,  $\beta_i, \beta_{ij}$  是待估计的未知参数, 总共有  $C_q^1 + C_q^2 = \frac{q^2+q}{2}$  个。参数  $\beta_i$  的含义为单一分量  $i$  混料的期望响应值; 参数  $\beta_{ij}$  是分量  $i$  与  $j$  的非可加性混料系数, 它的含义为纯分量  $i$  混料的期望响应、纯分量  $j$  混料的期望响应及分量  $i$  与  $j$  等比例混料的期望响应之线性组合。

当阶数  $n=3$  时,  $q-1$  维正规单纯形  $S_{q-1}$  上的  $q$  分量三阶中心多项式模型为

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 < i < j < k < q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k, \quad (3-3)$$

模型 (3-3) 中,  $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ijk}$  是待估计的未知参数, 总共有  $C_q^1 + C_q^2 + C_q^3 = \frac{q^3+5q}{6}$  个。参数  $\beta_i$ 、参数  $\beta_{ij}$  和模型 (3-2) 中的参数含义相同。参数  $\beta_{ijk}$  是分量  $i$ 、分量  $j$  和分量  $k$  的非可加性混料系数, 它的含义为单一分量  $i$  混料的期望响应、单一分量  $j$  混料的期望响应、单一分量  $k$  混料的期望响应以及分量  $i, j, k$  中二分量等比例混料的期望响应和三分量等比例混料的期望响应的线性组合。

### 3.2 二阶模型的 R-最优设计

本节考察的是在混料系统正规单纯形  $S_{q-1}$  上模型 (3-2) 的 R-最优设计, 通过计算给出了该模型在  $S_{q-1}$  内的 R-最优设计柱点及其测度。

**引理 3.1**<sup>[38]</sup> 对于混料区域  $S_{q-1}$  上的中心多项式模型, 参数估计的最优设计支撑点是  $S_{q-1}$  上每一类的中心点。

假设  $r_1, r_2$  分别代表混料区域  $S_{q-1}$  中每个顶点和两顶点中心的测度, 且满足

$$C_q^1 r_1 + C_q^2 r_2 = 1.$$

则模型 (3-2) 所对应的设计矩阵  $\mathbf{X}$  为

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_q & \mathbf{0} \\ \frac{1}{2}\mathbf{M}_2 & \frac{1}{4}\mathbf{I}_{C_q^2} \end{bmatrix},$$

这里,  $\mathbf{0}$ 表示 $q \times C_q^2$ 阶零矩阵,  $\mathbf{I}_{C_q^2}$ 为 $C_q^2$ 阶单位矩阵,  $\mathbf{M}_2$ 为 $C_q^2 \times q$ 阶的0-1矩阵, 具体形式为

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

记测度矩阵为

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} r_1\mathbf{I}_q & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_2\mathbf{I}_{C_q^2} \end{bmatrix}.$$

则该模型所对应的信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 为

$$\mathbf{M}(\xi) = \mathbf{X}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{X} = \begin{bmatrix} r_1\mathbf{I}_q + \frac{r_2}{4}\mathbf{M}_2^T \mathbf{M}_2 & \frac{r_2}{8}\mathbf{M}_2^T \\ \frac{r_2}{8}\mathbf{M}_2 & \frac{r_2}{16}\mathbf{I}_{C_q^2} \end{bmatrix}.$$

利用矩阵反演公式 (Frobenius 公式), 可得信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 的逆为

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi) = \begin{bmatrix} \frac{1}{r_1}\mathbf{I}_q & -\frac{2}{r_1}\mathbf{M}_2^T \\ -\frac{2}{r_1}\mathbf{M}_2 & \frac{16}{r_2}\mathbf{I}_{C_q^2} + \frac{4}{r_1}\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2^T \end{bmatrix}.$$

由 R-最优准则定义可得如下约束极小值问题

$$\begin{cases} \min \prod_{i=1}^{\frac{q^2+q}{2}} (\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii} = \min \left(\frac{1}{r_1}\right)^q \left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^{C_q^2}, \\ qr_1 + C_q^2 r_2 = 1. \end{cases}$$

利用拉格朗日乘法, 令

$$H(r_1, r_2, \lambda) = \left(\frac{1}{r_1}\right)^q \left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^{C_q^2} + \lambda (qr_1 + C_q^2 r_2 - 1),$$

对 $r_1, r_2, \lambda$ 求偏导, 得



$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial r_1} = -qr_1^{-q-1} \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^{C_q^2} - 8C_q^2 r_1^{-q-2} \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^{C_q^2-1} + \lambda q, \\ \frac{\partial H}{\partial r_2} = -16C_q^2 r_1^{-q} r_2^{-2} \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^{C_q^2-1} + \lambda C_q^2, \\ \frac{\partial H}{\partial \lambda} = qr_1 + C_q^2 r_2 - 1. \end{cases}$$

由  $\frac{\partial H}{\partial r_1} = 0, \frac{\partial H}{\partial r_2} = 0, \frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0$ , 可得  $q$  分量二阶混料中心多项式模型的 R-最优配置为

$$\begin{cases} r_1^* = \frac{(q-1)\sqrt{2q^2+q^3}-2q}{-2q^2-q^3+q^4}, \\ r_2^* = \frac{2(q^2-\sqrt{2q^2+q^3})}{-2q^2-q^3+q^4}. \end{cases}$$

因此, 我们得到如下定理。

**定理 3.1** 对于二阶混料中心多项式模型, 测度设计

$$\xi^* = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} & \dots & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} & \dots & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ r_1^* & r_1^* & & r_1^* & r_2^* & r_2^* & & r_2^* \end{pmatrix}$$

是 R-最优设计。

**证明** 利用 R-最优准则等价性定理证明。针对  $n=2$  的二阶混料中心多项式模型, 要证明该测度设计  $\xi^*$  是 R-最优设计的, 只需证明

$$\sum_{i=1}^{\frac{q^2+q}{2}} \frac{(e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) f(\mathbf{x}))^2}{e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) e_i} \leq \frac{q^2+q}{2}. \quad (3-4)$$

由引理 3.1 知, 可取  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_q)^T = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0)^T$ , 则有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= (x_1, x_2, x_3, \dots, x_q, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{q-1}x_q)^T \\ &= \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0, \frac{1}{4}, 0, \dots, 0 \right)^T. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\frac{q^2+q}{2}} \frac{(e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) f(\mathbf{x}))^2}{e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) e_i} &= \frac{\left(\frac{4}{r_2}\right)^2}{\frac{q}{r_1} + \frac{q(q-1)}{2} \left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)} \\ &= \frac{16r_1}{8(q^2 - q)r_1r_2 + (4q^2 - 3q)r_2^2}. \end{aligned}$$

令

$$G(r_1, r_2, q) = \frac{q^2 + q}{2} - \frac{16r_1}{8(q^2 - q)r_1r_2 + (4q^2 - 3q)r_2^2},$$

将 $r_1^*, r_2^*$ 的值代入, 得到

$$G(q) = \frac{q^2+q}{2} - \frac{(16(q-1)\sqrt{2q^2+q^3-2q})(-2q^2-q^3+q^4)}{8(q^2-q)((2q^3-2q^2+4q)\sqrt{2q^2+q^3-2q^4-6q^3+4q^2})+4(4q^2-3q)(q^2-\sqrt{2q^2+q^3})^2}$$

计算可知, 当 $q \geq 1$ 时,  $G(q) \geq 0$ , 式(3-4)是成立的, 定理 3.1 得到了证明, 所以该测度设计 $\xi^*$ 是二阶混料中心多项式模型的 R-最优设计。

定理 3.1 证毕。

### 3.3 三阶模型的 R-最优设计

在上一节中, 文章详细介绍了二阶混料中心多项式模型的 R-最优配置问题, 并利用一般等价性定理证明了所得到的 R-最优配置在整个混料区域 $S_{q-1}$ 上就是 R-最优的。在实际生产过程中, 二阶混料模型是应用最为普遍的, 三阶混料模型不同于二阶, 由于三阶自身的复杂性, 在实际中并不常用到, 但在理论上却有着一定的研究价值。在有关混料试验设计的研究文献中, 关于高阶混料模型的研究很少, 仅张崇岐<sup>[39]</sup>讨论了  $q$  分量三阶混料可加模型的参数估计的 D-最优设计问题, 关颖男等<sup>[6]</sup>讨论了  $q$  分量高阶混料中心多项式模型的关于 A-最优设计的算法, 并利用计算机算法举例进行了具体的讨论, 以具体的例子进一步论证了该最优算法。佟毅等<sup>[40]</sup>研究了  $q-1$  阶塌落的单纯形-中心设计问题和其模型所对应的 A-最优配置。三阶模型所需估计参数的个数要比二阶模型的多, 但往往效率并不高, 所以在理论上更多的是用来检验二阶模型的有效性, 检验二阶模型的过拟合和欠拟合问题。因此, 对三阶混料中心多项式模型 R-最优设计的研究是很有必要的。本节重点应用 R-最优准则理论, 结合 Mathematica 计算软件探讨具体分量三阶混

料中心多项式模型的 R-最优设计。

本节考察的是在混料系统正规单纯形 $S_{q-1}$ 上当 $q=3$ 时模型(3-3)的 R-最优设计,通过该模型的信息矩阵,利用拉格朗日乘子法并结合软件 Mathematica 计算得到三分量三阶中心多项式模型的 R-最优配置。

为进一步研究三阶混料中心多项式模型的 R-最优设计,假设 $r_1, r_2, r_3$ 分别表示 $S_{q-1}$ 上的每个顶点、两顶点中心及三顶点中心的测度,且满足

$$C_3^1 r_1 + C_3^2 r_2 + C_3^3 r_3 = 1.$$

则模型(3-3)所对应的设计矩阵 $\mathbf{X}$ 为

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_3 & \mathbf{0}_{\alpha_1} & \mathbf{0}_{\alpha_3} \\ \frac{1}{2}\mathbf{M}_2 & \frac{1}{4}\mathbf{I}_3 & \mathbf{0}_{\alpha_3} \\ \frac{1}{3}\mathbf{J}_{\alpha_1} & \frac{1}{9}\mathbf{J}_{\alpha_1} & \frac{1}{27}\mathbf{J}_{\alpha_3} \end{bmatrix},$$

其中, $\mathbf{0}_{\alpha_i}$ 为 $3 \times C_3^i$ 阶零矩阵, $\mathbf{J}_{\alpha_i}$ 为 $1 \times C_3^i$ 阶元素全为 1 的矩阵, $\mathbf{I}_3$ 是三阶单位矩阵。 $\mathbf{M}_2$ 为 $C_3^2 \times 3$ 阶的 0-1 矩阵,具体形式为

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

记测度矩阵为

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} r_1 \mathbf{I}_3 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_2 \mathbf{I}_3 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & r_3 \mathbf{I}_1 \end{bmatrix}.$$

则该模型所对应的信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 为

$$\mathbf{M}(\xi) = \begin{bmatrix} r_1 \mathbf{I}_3 + \frac{r_2}{2^2} \mathbf{M}_2^T \mathbf{M}_2 + \frac{r_3}{3^2} \mathbf{J}_3 & \frac{r_2}{2^3} \mathbf{M}_2^T + \frac{r_3}{3^3} \mathbf{J}_3 & \frac{r_3}{3^4} \mathbf{J}_{\alpha_1}^T \\ \frac{r_2}{2^3} \mathbf{M}_2 + \frac{r_3}{3^3} \mathbf{J}_3 & \frac{r_2}{2^4} \mathbf{I}_3 + \frac{r_3}{3^4} \mathbf{J}_3 & \frac{r_3}{3^5} \mathbf{J}_{\alpha_1}^T \\ \frac{r_3}{3^4} \mathbf{J}_{\alpha_1} & \frac{r_3}{3^5} \mathbf{J}_{\alpha_1} & \frac{r_3}{3^6} \mathbf{J}_{\alpha_3} \end{bmatrix}.$$

其中 $\mathbf{J}_3$ 是三阶方阵,其元素都是 1。

利用文献<sup>[41]</sup>中求 $3 \times 3$ 分块矩阵的逆矩阵的方法,求得信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 的逆为

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi) = \begin{bmatrix} \mathbf{T}^{-1} & \mathbf{T}^{-1}\mathbf{Q} \\ \mathbf{PT}^{-1} & \mathbf{K}^{-1} + \mathbf{PT}^{-1}\mathbf{Q} \end{bmatrix}.$$

其中 $\mathbf{T}^{-1}$ 为

$$\mathbf{T}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r_1}\mathbf{I}_3 & -\frac{2}{r_1}\mathbf{M}_2^T \\ -\frac{2}{r_1}\mathbf{M}_2 & \frac{16}{r_2}\mathbf{I}_3 + \frac{4}{r_1}\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2^T \end{bmatrix},$$

$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{Q}$ 为

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} -\frac{9}{r_1}\mathbf{J}_{\alpha_1}^T + \frac{6}{r_1}\mathbf{M}_2^T\mathbf{J}_{\alpha_1}^T \\ \frac{18}{r_1}\mathbf{M}_2\mathbf{J}_{\alpha_1}^T - \frac{48}{r_2}\mathbf{J}_{\alpha_1}^T - \frac{12}{r_1}\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2^T\mathbf{J}_{\alpha_1}^T \end{bmatrix},$$

$\mathbf{PT}^{-1}$ 为

$$\mathbf{PT}^{-1} = \left[ -\frac{9}{r_1}\mathbf{J}_{\alpha_1} + \frac{6}{r_1}\mathbf{J}_{\alpha_1}\mathbf{M}_2 \quad \frac{18}{r_1}\mathbf{J}_{\alpha_1}\mathbf{M}_2^T - \frac{48}{r_2}\mathbf{J}_{\alpha_1} - \frac{12}{r_1}\mathbf{J}_{\alpha_1}\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2^T \right],$$

$\mathbf{K}^{-1} + \mathbf{PT}^{-1}\mathbf{Q}$ 为

$$\mathbf{K}^{-1} + \mathbf{PT}^{-1}\mathbf{Q} = \left[ \frac{27}{r_1} + \frac{432}{r_2} + \frac{729}{r_3} \right].$$

由 R-最优准则定义可得如下约束极小值问题

$$\begin{cases} \min \prod_{i=1}^7 (\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii} = \min \left( \frac{1}{r_1} \right)^3 \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^3 \left( \frac{27}{r_1} + \frac{432}{r_2} + \frac{729}{r_3} \right), \\ 3r_1 + 3r_2 + r_3 = 1. \end{cases}$$

利用拉格朗日乘法, 令

$$H(r_1, r_2, r_3, \lambda) = \left( \frac{1}{r_1} \right)^3 \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^3 \left( \frac{27}{r_1} + \frac{432}{r_2} + \frac{729}{r_3} \right) + \lambda (3r_1 + 3r_2 + r_3 - 1).$$

对参数 $r_1, r_2, r_3, \lambda$ 求偏导, 得

$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial r_1} = -\frac{27\left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^3}{r_1^5} - \frac{24\left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^2\left(\frac{27}{r_1} + \frac{432}{r_2} + \frac{729}{r_3}\right)}{r_1^5} - \frac{3\left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^3\left(\frac{27}{r_1} + \frac{432}{r_2} + \frac{729}{r_3}\right)}{r_1^4} + 3\lambda, \\ \frac{\partial H}{\partial r_2} = -\frac{432\left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^3}{r_1^3 r_2^2} - \frac{48\left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^2\left(\frac{27}{r_1} + \frac{432}{r_2} + \frac{729}{r_3}\right)}{r_1^3 r_2^2} + 3\lambda, \\ \frac{\partial H}{\partial r_3} = -\frac{729\left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^3}{r_1^3 r_3^2} + \lambda, \\ \frac{\partial H}{\partial \lambda} = 3r_1 + 3r_2 + r_3 - 1. \end{cases}$$

由 $\frac{\partial H}{\partial r_1} = 0, \frac{\partial H}{\partial r_2} = 0, \frac{\partial H}{\partial r_3} = 0, \frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0$ , 可计算得到结果

$$r_1 \rightarrow 0.1796, r_2 \rightarrow 0.1217, r_3 \rightarrow 0.0960$$

因此，三分量三阶中心多项式模型的 R-最优配置为

$$\begin{cases} r_1^* = 0.1796 \\ r_2^* = 0.1217 \\ r_3^* = 0.0960 \end{cases}$$

**定理 3.2** 对于三分量三阶混料中心多项式模型，测度设计

$$\xi^* = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix} \\ 0.1796 & 0.1796 & 0.1796 & 0.1217 & 0.1217 & 0.1217 & 0.0960 \end{pmatrix}$$

是 R-最优设计。

**证明** 利用 R-最优准则等价性定理证明。对于三分量三阶混料中心多项式模型，要证明测度设计  $\xi^*$  是 R-最优设计的，只需证明

$$\sum_{i=1}^7 \frac{(e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) f(\mathbf{x}))^2}{e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) e_i} \leq 7. \tag{3-5}$$

此时信息矩阵的逆  $\mathbf{M}^{-1}(\xi)$  为

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi^*) = \begin{bmatrix} \frac{1}{r_1^*} & 0 & 0 & -\frac{2}{r_1^*} & -\frac{2}{r_1^*} & 0 & \frac{3}{r_1^*} \\ 0 & \frac{1}{r_1^*} & 0 & -\frac{2}{r_1^*} & 0 & -\frac{2}{r_1^*} & \frac{3}{r_1^*} \\ 0 & 0 & \frac{1}{r_1^*} & 0 & -\frac{2}{r_1^*} & -\frac{2}{r_1^*} & \frac{3}{r_1^*} \\ -\frac{2}{r_1^*} & -\frac{2}{r_1^*} & 0 & \frac{16}{r_2^*} + \frac{8}{r_1^*} & \frac{4}{r_1^*} & \frac{4}{r_1^*} & -\frac{12}{r_1^*} - \frac{48}{r_2^*} \\ 0 & -\frac{2}{r_1^*} & -\frac{2}{r_1^*} & \frac{4}{r_1^*} & \frac{16}{r_2^*} + \frac{8}{r_1^*} & \frac{4}{r_1^*} & -\frac{12}{r_1^*} - \frac{48}{r_2^*} \\ 0 & -\frac{2}{r_1^*} & -\frac{2}{r_1^*} & \frac{4}{r_1^*} & \frac{4}{r_1^*} & \frac{16}{r_2^*} + \frac{8}{r_1^*} & -\frac{12}{r_1^*} - \frac{48}{r_2^*} \\ \frac{3}{r_1^*} & \frac{3}{r_1^*} & \frac{3}{r_1^*} & -\frac{12}{r_1^*} - \frac{48}{r_2^*} & -\frac{12}{r_1^*} - \frac{48}{r_2^*} & -\frac{12}{r_1^*} - \frac{48}{r_2^*} & \frac{27}{r_1^*} + \frac{432}{r_2^*} + \frac{729}{r_3^*} \end{bmatrix}.$$

函数向量  $f(\mathbf{x})$  为

$$f(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, x_1x_2x_3)^T.$$

令

$$G(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^7 \frac{(e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) f(\mathbf{x}))^2}{e_i^T \mathbf{M}^{-1}(\xi^*) e_i}$$

将  $\mathbf{M}^{-1}(\xi^*)$ 、 $f(\mathbf{x})$ 、 $r_1^*$ 、 $r_2^*$ 、 $r_3^*$  的值代入到  $G(x_1, x_2, x_3)$  中, 求解得到  $G(x_1, x_2, x_3)$  的具体值, 得到式 (3-5)。

定理 3.2 证毕。

## 4 混料中心多项式模型的稳健 R-最优设计

近些年来, 试验工作者对产品的质量和性能的要求有了一个比较高的标准, 在实际的生产过程中, 相关研究学者日益关注的是产品设计稳健性的问题。所提到的稳健性就是指对试验指标有影响的因素发生细微变化时, 发生的变化对试验结果基本不影响, 而稳健设计是试验的整个过程在满足稳健性的基本要求下, 对产品的各种性质作出比较全面的考虑, 并对此做出了最优的设计, 使得该设计既能够增强产品的品质性能, 又能降低生产过程中的成本。陈立周<sup>[42]</sup>在《现代设计丛书稳健设计》一书中详细的解释了稳健设计的基本概念和相关理论的原理方法, 提出了一种新的试验设计方法——约束多目标试验设计, 扩充了稳健设计的发展。本章重点应用稳健 R-最优设计准则的基础知识, 探讨具体分量的二阶中心多项式模型的稳健 R-最优设计问题。

### 4.1 二阶模型的稳健 R-最优设计

Liu 和 Yue 等<sup>[16]</sup>在模型稳健性框架下扩展了由 Dette 提出的 R-最优性准则, 将 R-最优性推广到模型稳健最优设计, 其中先验概率设置在一类候选线性模型上。

对于二阶混料中心多项式模型 (3-2), 考虑回归模型集类 (2-6), 其中

$$m = 2,$$

$$f_1(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, \dots, x_q)^T,$$

$$f_2(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, \dots, x_q, x_1x_2, \dots, x_{q-1}x_q)^T.$$

记

$$\mathbf{x}_i = (0 \ 0 \ 0 \ \dots \ 1 \ 0 \ 0)^T, i = 1, 2, \dots, q$$

$$\mathbf{x}_{ij} = (0 \ \frac{1}{2} \ 0 \ \dots \ \frac{1}{2} \ 0 \ 0)^T, 1 \leq i < j \leq q.$$

其中 $\mathbf{x}_i$ 表示第 $i$ 个分量取值为1, 其余分量取值为0的纯混料点,  $\mathbf{x}_{ij}$ 表示第 $i$ 和第 $j$ 个分量取值都为 $\frac{1}{2}$ , 其余分量取值为0的二分量混料点。

则二阶混料中心多项式模型所对应的测度设计为

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_q & \mathbf{x}_{12} & \mathbf{x}_{13} & \cdots & \mathbf{x}_{(q-1)q} \\ r_1 & r_1 & \cdots & r_1 & r_2 & r_2 & \cdots & r_2 \end{pmatrix}.$$

回归函数 $f_i(\mathbf{x})$ ,  $i = 1, 2$ 所对应的信息矩阵为

$$\mathbf{M}_i(\xi) = \int_{S^{q-1}} f_i(\mathbf{x}) f_i^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}), i = 1, 2$$

则 $i = 1$ 时,

$$\mathbf{M}_1(\xi) = r_1 \mathbf{I}_q,$$

$i = 2$ 时,

$$\mathbf{M}_2(\xi) = \begin{bmatrix} r_1 \mathbf{I}_q + \frac{r_2}{4} \mathbf{M}_2^T \mathbf{M}_2 & \frac{r_2}{8} \mathbf{M}_2^T \\ \frac{r_2}{8} \mathbf{M}_2 & \frac{r_2}{16} \mathbf{I}_{C_q^2} \end{bmatrix}.$$

其中,  $\mathbf{M}_2$ 矩阵的含义与上文相同。

利用矩阵反演公式, 得到信息矩阵 $\mathbf{M}_i$ ,  $i = 1, 2$ 的逆为

$$\mathbf{M}_1^{-1}(\xi) = \frac{1}{r_1} \mathbf{I}_q,$$

$$\mathbf{M}_2^{-1}(\xi) = \begin{bmatrix} \frac{1}{r_1} \mathbf{I}_q & -\frac{2}{r_1} \mathbf{M}_2^T \\ -\frac{2}{r_1} \mathbf{M}_2 & \frac{16}{r_2} \mathbf{I}_{C_q^2} + \frac{4}{r_1} \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_2^T \end{bmatrix}.$$

根据模型稳健 R-最优准则的定义, 得到二阶混料中心多项式模型稳健 R-最优准则为

$$\psi_w^R(\xi) = \frac{w}{q} \log \left( \left( \frac{1}{r_1} \right)^q \right) + \frac{2(1-w)}{q(q+1)} \log \left( \left( \frac{1}{r_1} \right)^q \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^{C_q^2} \right).$$

又由于该式受混料约束条件 $qr_1 + C_q^2 r_2 = 1$ 的限制, 因此可得如下约束极小值问题, 即

$$\begin{cases} \min \psi_w^R(\xi) = \min \frac{w}{q} \log \left( \left( \frac{1}{r_1} \right)^q \right) + \frac{2(1-w)}{q(q+1)} \log \left( \left( \frac{1}{r_1} \right)^q \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^{C_q^2} \right), \\ qr_1 + C_q^2 r_2 = 1. \end{cases}$$

利用拉格朗日乘法, 令

$$G(r_1, r_2, \lambda) = \frac{w}{q} \log \left( \left( \frac{1}{r_1} \right)^q \right) + \frac{2(1-w)}{q(q+1)} \log \left( \left( \frac{1}{r_1} \right)^q \left( \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \right)^{C_q^2} \right) + \lambda(qr_1 + C_q^2 r_2 - 1).$$

对 $r_1, r_2, \lambda$ 求偏导, 得



$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial r_1} = -\frac{w}{r_1} - \frac{2(1-w)}{(q+1)r_1} - \frac{(1-w)(q-1)r_2}{(q+1)r_1(2r_1+r_2)} + \lambda q, \\ \frac{\partial G}{\partial r_2} = \frac{-2(1-w)(q-1)r_1}{(q+1)r_2(2r_1+r_2)} + \lambda C_q^2, \\ \frac{\partial G}{\partial \lambda} = qr_1 + C_q^2 r_2 - 1. \end{cases}$$

由  $\frac{\partial G}{\partial r_1} = 0$ ,  $\frac{\partial G}{\partial r_2} = 0$ ,  $\frac{\partial G}{\partial \lambda} = 0$ , 可得  $\xi_w^*$  所对应的最优设计测度为

$$\begin{cases} r_1 = \frac{1}{2q} \left( 2 + \frac{2q^3 - 2q^4 + q^2w - 2q^3w + q^4w - (q-q^2)\sqrt{8q^2 + 4q^3 - 8q^2w + q^2w^2 - 2q^3w^2 + q^4w^2}}{-2q^2 - q^3 + q^4} \right) \\ r_2 = \frac{2q^2 + qw - q^2w - \sqrt{8q^2 + 4q^3 - 8q^2w + q^2w^2 - 2q^3w^2 + q^4w^2}}{-2q^2 - q^3 + q^4} \end{cases}$$

## 4.2 三分量二阶模型的稳健 R-最优设计

### 4.2.1 模型介绍

考虑当  $q=3$  时模型的稳健 R-最优设计。三分量二阶混料中心多项式模型的表达式为

$$\begin{aligned} \eta &= \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \beta_{ij} x_i x_j \\ &= \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3. \end{aligned}$$

$q=3$  时, 设计  $\xi_w^*$  所对应的最优设计测度为

$$\begin{cases} r_1 = -\frac{1}{6} + \frac{w}{6} + \frac{\sqrt{180-72w+36w^2}}{36} \\ r_2 = \frac{1}{2} - \frac{w}{6} - \frac{\sqrt{180-72w+36w^2}}{36} \end{cases} \quad (4-1)$$

从式 (4-1) 可以看出, 设计  $\xi_w^*$  所对应的最优设计测度是由混料模型的先验测度  $w$  所决定的, 因此, 想要求得  $\xi_w^*$  对应的最优设计测度, 首先需要得到先验测度  $w$  的值。

文献<sup>[33]</sup>给出了稳健 R-最优设计所对应的最优先验, 即  $w^* = 0.003021$ , 参考这一结论, 将  $w^* = 0.003021$  代入到 (4-1) 式中, 得到如下结果

$$\begin{cases} r_1^* = 0.20629 \\ r_2^* = 0.127043 \end{cases}$$

#### 4.2.2 定理证明

**定理 4.1** 对于三分量二阶混料中心多项式模型，测度设计

$$\xi^* = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ r_1^* & r_1^* & r_1^* & r_2^* & r_2^* & r_2^* \end{pmatrix}$$

是稳健 R-最优设计。

**证明** 利用稳健 R-最优等价性定理 (2-8) 证明。针对三分量二阶混料中心多项式模型，要证明测度设计  $\xi_{w^*}^* \in \Xi$  是稳健 R-最优设计的，只需证明

$$\sum_{l=1}^2 \frac{w_l}{k_l} \mathbf{f}_l^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}_l^{-1}(\xi) \sum_{i=1}^{k_l} \frac{\mathbf{e}_{li} \mathbf{e}_{li}^T}{\mathbf{e}_{li}^T \mathbf{M}_l^{-1}(\xi) \mathbf{e}_{li}} \mathbf{M}_l^{-1}(\xi) \mathbf{f}_l(\mathbf{x}) \leq 1 \quad (4-2)$$

令

$$\begin{aligned} G(x_1, x_2, x_3) &= \frac{w^*}{3} \mathbf{f}_1^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}_1^{-1}(\xi_{w^*}^*) \sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{e}_{1i} \mathbf{e}_{1i}^T}{\mathbf{e}_{1i}^T \mathbf{M}_1^{-1}(\xi_{w^*}^*) \mathbf{e}_{1i}} \mathbf{M}_1^{-1}(\xi_{w^*}^*) \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) + \\ &\quad \frac{1-w^*}{6} \mathbf{f}_2^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}_2^{-1}(\xi_{w^*}^*) \sum_{i=1}^6 \frac{\mathbf{e}_{2i} \mathbf{e}_{2i}^T}{\mathbf{e}_{2i}^T \mathbf{M}_2^{-1}(\xi_{w^*}^*) \mathbf{e}_{2i}} \mathbf{M}_2^{-1}(\xi_{w^*}^*) \mathbf{f}_2(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

其中

$$\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, x_3)^T, \quad \mathbf{f}_2(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3)^T$$

$$\mathbf{M}_1^{-1}(\xi_{w^*}^*) = \begin{pmatrix} \frac{1}{r_1^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r_1^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r_1^*} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_2^{-1}(\xi_{w^*}^*) = \begin{pmatrix} \frac{1}{r_1^*} \mathbf{I}_3 & -\frac{2}{r_1^*} \mathbf{M}_2^T \\ -\frac{2}{r_1^*} \mathbf{M}_2 & \frac{16}{r_2^*} \mathbf{I}_3 + \frac{4}{r_1^*} \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_2^T \end{pmatrix}.$$

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{e}_{1i} \mathbf{e}_{1i}^T}{\mathbf{e}_{1i}^T \mathbf{M}_1^{-1}(\xi_w^*) \mathbf{e}_{1i}} = \begin{pmatrix} r_1^* & 0 & 0 \\ 0 & r_1^* & 0 \\ 0 & 0 & r_1^* \end{pmatrix},$$

$$\sum_{i=1}^6 \frac{\mathbf{e}_{2i} \mathbf{e}_{2i}^T}{\mathbf{e}_{2i}^T \mathbf{M}_2^{-1}(\xi_w^*) \mathbf{e}_{2i}} = \begin{pmatrix} r_1^* \mathbf{I}_3 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{r_1^* r_2^*}{16r_1^* + 8r_2^*} \mathbf{I}_3 \end{pmatrix}.$$

上面矩阵中的  $\mathbf{I}_3$  表示三阶单位矩阵,  $\mathbf{0}$  表示三阶零矩阵,  $\mathbf{M}_2$  为三阶的 0-1 矩阵, 具体形式为

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

将  $r_1^*, r_2^*$  的值代入到函数  $G(x_1, x_2, x_3)$  中, 化简得

$$\begin{aligned} G(x_1, x_2, x_3) = & 0.9999x_1^2 + 0.1896x_1x_2 - 6.8231x_1^2x_2 + 0.9999x_2^2 - 6.8231x_1x_2^2 \\ & + 34.5731x_1^2x_2^2 + 0.1896x_1x_3 - 6.8231x_1^2x_3 + 0.1896x_2x_3 \\ & - 2.2756x_1x_2x_3 + 20.0901x_1^2x_2x_3 - 6.8231x_2^2x_3 + 20.0901x_1x_2^2x_3 \\ & + 0.9999x_3^2 - 6.8231x_1x_3^2 + 34.5731x_1^2x_3^2 - 6.8231x_2x_3^2 \\ & + 20.0901x_1x_2x_3^2 + 34.5731x_2^2x_3^2 \end{aligned}$$

下面求函数  $G(x_1, x_2, x_3)$  的条件极值。

根据多元函数求极值的方法, 令

$$L(x_1, x_2, x_3, \lambda) = G(x_1, x_2, x_3) + \lambda(x_1 + x_2 + x_3 - 1)$$

对  $x_1, x_2, x_3, \lambda$  求偏导, 得

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial x_1} = 1.9999x_1 + 0.1896x_2 - 13.6463x_1x_2 - 6.8231x_2^2 + 69.1463x_1x_2^2 + 0.1896x_3 \\ \quad - 13.6463x_1x_3 - 2.2756x_2x_3 + 40.1803x_1x_2x_3 + 20.0901x_2^2x_3 - 6.8231x_3^2 \\ \quad + 69.1463x_1x_3^2 + 20.0901x_2x_3^2 + \lambda \\ \frac{\partial L}{\partial x_2} = 0.1896x_1 - 6.8231x_1^2 + 1.9999x_2 - 13.6463x_1x_2 + 69.1463x_1^2x_2 + 0.1896x_3 \\ \quad - 2.2756x_1x_3 + 20.0901x_1^2x_3 - 13.6463x_2x_3 + 40.1803x_1x_2x_3 - 6.8231x_3^2 \\ \quad + 20.0901x_1x_3^2 + 69.1463x_2x_3^2 + \lambda \\ \frac{\partial L}{\partial x_3} = 0.1896x_1 - 6.8231x_1^2 + 0.1896x_2 - 2.2756x_1x_2 + 20.0901x_1^2x_2 - 6.8231x_2^2 \\ \quad + 20.0901x_1x_2^2 + 1.9999x_3 - 13.6463x_1x_3 + 69.1463x_1^2x_3 - 13.6463x_2x_3 \\ \quad + 40.1803x_1x_2x_3 + 69.1463x_2^2x_3 + \lambda \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 + x_3 - 1 \end{array} \right.$$

由  $\frac{\partial L}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial L}{\partial x_2} = 0, \frac{\partial L}{\partial x_3} = 0, \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$ , 可得稳定点为

$$x_1 = 0.3333, x_2 = 0.3333, x_3 = 0.3333, \lambda = -4.0897$$

$$x_1 = 0.1632, x_2 = 0.4184, x_3 = 0.4184, \lambda = -3.8758$$

$$x_1 = 0.4184, x_2 = 0.4184, x_3 = 0.1632, \lambda = -3.8758$$

$$x_1 = 0.4184, x_2 = 0.1632, x_3 = 0.4184, \lambda = -3.8757$$

$$x_1 = 0.0995, x_2 = 0.8011, x_3 = 0.0995, \lambda = -0.7617$$

$$x_1 = 0.0995, x_2 = 0.0995, x_3 = 0.8011, \lambda = -0.7617$$

$$x_1 = 0.8011, x_2 = 0.0995, x_3 = 0.0995, \lambda = -0.7617$$

文献<sup>[43]</sup>给出了三元函数条件极值的充分条件, 利用该文献中的方法, 可求得点  $P_1(0.3333, 0.3333, 0.3333)$  为极大值点, 且极大值为  $G(P_1) = 0.8202$ 。

点  $P_2(0.1632, 0.4184, 0.4184)$ ,

点  $P_3(0.4184, 0.4184, 0.1632)$ ,

点  $P_4(0.4184, 0.1632, 0.4184)$ , 不是极值点。

点  $P_5(0.0995, 0.8011, 0.0995)$ ,

点  $P_6(0.0995, 0.0995, 0.8011)$ ,

点  $P_7(0.8011, 0.0995, 0.0995)$ , 是极小值点, 且极小值为 0.2846。

又因为在混料单纯形区域

$$S_{3-1} = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \mid \sum_{i=1}^3 x_i = 1, x_i \geq 0, i = 1, 2, 3 \right\}.$$

中函数  $G(x_1, x_2, x_3)$  的最值一般是在边界的中点和顶点处取到, 所以有

在顶点处, 函数值为 0.9999。

在中点处, 函数值为 1.0000。

从而 (4-2) 式成立, 即

$$\sum_{l=1}^2 \frac{w_l}{k_l} \mathbf{f}_l^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}_l^{-1}(\xi) \sum_{i=1}^{k_l} \frac{\mathbf{e}_{li} \mathbf{e}_{li}^T}{\mathbf{e}_{li}^T \mathbf{M}_l^{-1}(\xi) \mathbf{e}_{li}} \mathbf{M}_l^{-1}(\xi) \mathbf{f}_l(\mathbf{x}) \leq 1.$$

定理 4.1 证毕。

### 4.3 效率对比分析

第二章中提到效率是衡量设计最优性的一个重要的量, 所以本节讨论三分量二阶混料中心多项式模型的 R-最优设计的效率和稳健 R-最优设计的效率以及对两者的效率进行比较分析。

由 2.3 节所介绍的混料试验设计的 R-效率知, R-最优设计准则下的效率为

$$e_R(\xi) = \left( \frac{\prod_{i=1}^n (\mathbf{M}^{-1}(\xi_R))_{ii}}{\prod_{i=1}^n (\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii}} \right)^{\frac{1}{n}}.$$

对于三分量二阶中心多项式模型 R-最优设计和稳健 R-最优设计来说, 未知参数个数都是  $n = C_3^1 + C_3^2 = 6$  个, 所以它们对应的效率为

$$e_R(\xi) = \left( \frac{\prod_{i=1}^6 (\mathbf{M}^{-1}(\xi_R))_{ii}}{\prod_{i=1}^6 (\mathbf{M}^{-1}(\xi))_{ii}} \right)^{\frac{1}{6}}.$$

由 3.2 节知, 当  $q=3$  时, 该模型的 R-最优设计为

$$\xi_1^* = \left\{ r_1^* = \frac{1}{6}(\sqrt{5} - 1), r_2^* = \frac{1}{6}(3 - \sqrt{5}) \right\}.$$

由 4.2.2 节知, 当  $q=3$  时, 该模型的稳健 R-最优设计为

$$\xi_2^* = \left\{ r_1^* = 0.20629, r_2^* = 0.12704 \right\}.$$

因此，三分量二阶混料中心多项式模型 R-最优设计的效率为

$$e_1(\xi) = \left( \frac{5.09111 \times 10^8}{\left(\frac{1}{r_1}\right)^3 \left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^3} \right)^{\frac{1}{6}} .$$

三分量二阶混料中心多项式模型稳健 R-最优设计的效率为

$$e_2(\xi) = \left( \frac{5.09147 \times 10^8}{\left(\frac{1}{r_1}\right)^3 \left(\frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1}\right)^3} \right)^{\frac{1}{6}} .$$

从这两个式子可以看出，无论是 R-最优设计还是稳健 R-最优设计，它们的效率都是由测度 $r_1$ 和 $r_2$ 的取值决定的。为了更加清楚的比较效率 $e_1(\xi)$ 和 $e_2(\xi)$ 之间的关系，下面给出当 $r_1$ 和 $r_2$ 取不同值时效率 $e_1(\xi)$ 和 $e_2(\xi)$ 值的大小，如表 4.1 所示。

表 4.1 效率对比表

$r_1$	$r_2$	$e_1(\xi)$	$e_2(\xi)$
0.03	0.3033	0.273852	0.273855
0.09	0.2433	0.681679	0.681687
0.12	0.2133	0.822383	0.822393
0.15	0.1833	0.922900	0.922911
0.18	0.1533	0.982762	0.982774
0.21	0.1233	0.999474	0.999486
0.24	0.0933	0.967278	0.967290
0.27	0.0333	0.650108	0.650115
0.30	0.0033	0.221667	0.221670

由表 4.1 知，当 $r_1$ 和 $r_2$ 取不同值时，效率 $e_2(\xi)$ 的值总是高于 $e_1(\xi)$ 的值，因此，模型稳健 R-最优设计的效率高于 R-最优设计的效率。

## 5 结论与展望

### 5.1 主要结论

本文运用最优设计准则，主要做了两部分工作，一是讨论了二阶和三阶中心多项式模型的 R-最优设计问题，二是讨论了具体分量的二阶中心多项式模型的稳健 R-最优设计问题。主要有：

(1) 首先引入了文章的选题依据和研究的意义与目的，并介绍了后续研究所需用到的重点理论知识，包括混料试验设计的发展、混料试验最优设计的原理、常见的几种最优设计准则以及最优准则所对应的效率函数，最后，介绍了稳健最优设计的理论知识。

(2) 探讨了二阶混料模型和三阶混料模型的 R-最优设计问题。给出了二阶混料中心多项式模型的 R-最优测度，并利用 R-最优设计的等价性定理证明了所得的最优测度满足等价性定理，是 R-最优的。其次，讨论了三阶混料中心多项式模型的 R-最优设计，结合软件 Mathematica 得到了三分量三阶中心多项式模型的 R-最优配置的数值解。

(3) 进一步将混料中心多项式模型与稳健 R-最优设计理论相结合，讨论了二阶混料模型的稳健 R-最优配置。紧接着就三分量混料中心多项式模型展开了讨论，给出了具体分量混料模型的稳健 R-最优所对应的数值解，结合等价性定理和多元函数条件极值定理证明了所得的结果就是稳健 R-最优设计的，最后对三分量二阶混料模型的 R-最优设计和稳健 R-最优设计的效率进行了研究，发现稳健 R-最优设计的效率高于 R-最优设计的效率。

### 5.2 研究不足和有待进一步探讨的问题

在本文的基础上，对  $q$  分量混料中心多项式模型的最优设计问题还可做进一步的研究：

(1) 对于  $q$  分量混料中心多项式模型，可以探讨其它最优准则下的设计，比如 T-最优设计、V-最优设计、 $D_s$ -最优设计等等。

(2) 本文讨论的是混料中心多项式模型在单一准则下的最优设计，但在实

际运用中单一准则有着比较明显的缺点,它会导致做试验时相关费用的上涨以及一些不必要的浪费,所以可以考虑混合最优准则下的相关设计问题,具体可以参考文献<sup>[44]</sup>。

(3) 在本文的基础上,可以探讨三阶模型检验二阶模型的有效性问题、三阶模型检验二阶模型过拟合和欠拟合的问题。

(4) 除了本文研究的混料中心多项式模型外,也可以研究其它模型的 R-最优设计和稳健 R-最优设计。



## 参考文献

- [1] John A, Cornell, et al. The Mixture Problem for Categorized Components[J]. Journal of the American Statistical Association, 1970, 65(329):339-355.
- [2] Cornell, John A. Some Comments on Designs for Cox's Mixture Polynomial[J]. Technometrics, 1975, 17(1):25-35.
- [3] 方开泰. 正交与均匀试验设计[M]. 北京:科学出版社, 2001.
- [4] Kiefer J. Optimum Experimental Designs[J]. Journal of the Royal Statistical Society, 1959, 21(2):272-319.
- [5] Läuter E. Experimental planning in a class of models[J]. Mathematische Operations for schung und statistik, 1974, 5(4-5):379-398.
- [6] 关颖男, 刘春雨. q-1 阶多重线性多项式模型的 A-最优设计[J]. 东北工学院学报, 1993(2): 198-202.
- [7] 佟毅, 王天辉, 关颖男. 最优的单纯形-中心设计[J]. 东北大学学报, 1999(5): 559-561.
- [8] 冷薇, 李俊鹏, 张崇岐. 高维混料模型的 LASSO 变量选择[J]. 数理统计与管理, 2019, 38(1): 81-86.
- [9] Dette H. Designing Experiments with Respect to 'Standardized' Optimality Criteria[J]. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology), 1997, 59(1):97-110.
- [10] 赵洪雅, 关颖男, 韩大伟. 混料试验的 R-最优设计[J]. 东北大学学报, 2000, 21 (06): 682-684.
- [11] 赵洪雅, 关颖男, 韩大伟. 二阶可加混料模型的 R-最优设计[J]. 东北大学学报, 2001, 22(02): 222-225.
- [12] 孙超. 随机系数回归模型的 I\_L-最优和 R-最优设计[D]. 上海:上海师范大学, 2012.
- [13] Liu X, Yue R X. A note on R-optimal designs for multiresponse models[J]. Metrika, 2013, 76(4):483-493.
- [14] Liu X, Yue R X, Chatterjee K. A note on R-optimal designs for multi-factor

- models[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2014, 146:139-144.
- [15] Liu X, Yue R X, Chatterjee K. R-optimal designs in random coefficient regression models[J]. *Statistics and Probability Letters*, 2014, 88:127-132.
- [16] Liu X, Yue R X, Chatterjee K. Model-robust R-optimal designs in linear regression models[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2015, 167:135-143.
- [17] Liu X, Yue R X, Xu J, et al. Algorithmic construction of R-optimal designs for second-order response surface models[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2016, 178:61-69.
- [18] 李俊鹏, 吴惠彬, 胡小玲等. q 分量二阶混料 K 模型 R-最优设计[J]. *广州大学学报(自然科学版)*, 2017, 16(01): 32-35.
- [19] 晋珊. Logistic 回归模型的 R-最优设计[D]. 上海:上海师范大学, 2018.
- [20] 胡小玲. 二阶塌落模型的最优设计及 Cox 均匀设计研究[D]. 广州:广州大学, 2018.
- [21] Liu X, Yue R X. Elfving's theorem for R-optimality of experimental designs[J]. *Metrika*, 2019, 83(4):1-14.
- [22] 贺磊. 基于 R-准则的最优试验设计若干问题研究[D]. 上海:上海师范大学, 2019.
- [23] Hao H H, Zhu X Y, Zhang X F, et al. R-optimal design of the second-order scheffé mixture model. *Statistics & Probability Letters*, 2021, 173(10): 109069.
- [24] Cook R D, Nachtsheim C J. Model-robust linear optimal designs[J]. *Technometrics*, 1982, 24: 49-54.
- [25] Dette H. Elfving's Theorem for D-Optimality[J]. *The Annals of Statistics*, 1993, 21(2):753-766.
- [26] Dette H, Studden W J. Optimal designs for polynomial regression when the degree is not known[J]. *Statistica Sinica*, 1995, 5(2):459-473.
- [27] Liu S X, Wiens D P. Robust designs for approximately polynomial regression[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1997, 64(2):369-381.
- [28] Dette H, Franke T. Constrained D- and  $D_1$ -optimal designs for polynomial

- regression [J]. *The Annals of Statistics*, 2000, 28(6):1702-1727.
- [29] 刘欣, 岳荣先. 多响应近似线性回归模型 D-最优稳健设计[J]. *上海师范大学学报(自然科学版)*, 2007(4):5-10.
- [30] 金红娣. 混料试验设计若干问题的研究[D]. 上海:上海师范大学,2008.
- [31] Huang L, Hsu H L, Chou C J, et al. Model-robust D- and A-optimal designs for mixture experiments[J]. *Statistica Sinica*, 2009, 19(3):1055-1075.
- [32] 李俊鹏, 张小峰, 张崇岐. 二阶可加混料模型稳健 D-最优设计[J]. *数理统计与管理*, 2017, 36(5): 843-852.
- [33] 李俊鹏. 混料模型稳健 D-,R-最优设计的研究[D]. 广州:广州大学, 2017.
- [34] Scheffé H. Experiments With Mixtures[J]. *Journal of the Royal Statistical Society*, 1958, 20(2):344-360.
- [35] Scheffé H. The Simplex-Centroid Design for Experiments with Mixtures[J]. *Journal of the Royal Statistical Society*, 1963, 25(2):235-263.
- [36] Melas V B. Functional approach to optimal experimental design [M]. Springer, 2006.
- [37] 张建方. 关于试验设计的效率及有关问题[J]. *数理统计与管理*, 2007, 26(05): 792-801.
- [38] Atwood C L. Optimal and Efficient Designs of Experiments[J]. *Annals of Mathematical Statistics*, 1969, 40(5):1570-1602.
- [39] 张崇岐. 三阶可加混料模型参数估计的 D-最优性[J]. *包头钢铁学院学报*, 1993(01): 1-4.
- [40] 佟毅, 侯景臣, 佟晓东.  $q-1$  阶塌落的单纯型-中心设计及 A-最优配置[J]. *石油化工高等学校学报*, 2001, 14(4): 74-77.
- [41] 马骏, 李萌, 靳丹丹等. 几类  $3 \times 3$  分块矩阵的逆矩阵的求法[J]. *曲阜师范大学学报(自然科学版)*, 2016, 42(03): 54-58.
- [42] 陈立周. 稳健设计[M]. 北京:机械工业出版社, 1999.
- [43] 张晓光. 三元函数条件极值的充分条件[J]. *黑龙江科技学院学报*, 2002(03): 49-50.
- [44] 陈博照, 张崇岐. 混料模型的混合最优设计[J]. *数理统计与管理*, 2015, 34

(03): 401-408.

## 攻读硕士学位期间所发表的论文

- [1] 郑婷.  $q$  分量三阶混料中心多项式模型 R-最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版), 2021, 20(1):69-72.

## 后记

时光匆匆而过，至此我的硕士论文也算基本完成，意味着三年的研究生学习历程接近尾声。再回首，非常感谢曾经给予给我指导和鼓励的老师、同学和亲朋好友们，对他们充满了感激之情，在此向他们表达我最诚挚的感谢。

特别感谢我的导师张崇岐教授，感谢张老师的用心引导和教育，尤其是提供了宝贵的研究方向。文章从选题一直到最终的顺利完成，都离不开张老师的悉心指导，对我论文的完成提供了很大的帮助。张老师博览群书，智周万物，时常教导我们要端正学习态度、紧抓专业知识，多读文献，老师严谨的工作态度、广博的学识时刻影响着我，是我永远值得学习的榜样。在张老师的耐心指导下，我的论文才能顺利完成，才能充实度过研究生的学习时光。在此，衷心的向我的导师说声谢谢，惟愿老师身体健康，事业顺利！

大善无言，至爱无声，感谢我最爱的家人们，是他们为我撑起了一片蓝天，在我迷失方向时指引给我方向，在我经受挫折时给予给我力量。感谢家人给予给我的无私的爱，是他们用深沉的爱包容了我所有的好与不好，可以让我伸展开双臂去拥抱我想要的生活，可以让我在求学期间做到心无旁骛、专心学习，他们是我这么多年来求学路上的坚强后盾，希望在不远的将来我可以凭借自身努力去报答他们。

感谢统计学院的各位领导和老师，谆谆教诲如春风，似瑞雨，永铭我心。他们驾驶着智慧的船，载着我们航行在知识的海洋，并邀请相关领域的专家们，向同学们普及学术知识和更深层次的统计学，丰富了我们的见识，谨此向他们表示最诚挚的敬意和感谢！

感谢我的舍友们，我们朝夕相处，互相帮助，在学习和生活中互相给予关心和陪伴，感谢同门师兄师妹，在此向他们表示感谢！

最后，衷心感谢评审我论文的专家学者们，感谢你们利用宝贵的时间审阅并提出意见，谢谢！