

分类号 \_\_\_\_\_  
U D C \_\_\_\_\_

密级 公开  
编号 10741



## 硕士学位论文

论文题目 混料试验的 V-和 R-最优设计研究

研究生姓名: 马景文

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: 2023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：马景文 签字日期：2023.5.30

导师签名：张敬文 签字日期：2023.5.30

## 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：马景文 签字日期：2023.5.30

导师签名：张敬文 签字日期：2023.5.30

# **V- and R- Optimal designs of mixture experiments**

**Candidate: Jingwen Ma**

**Supervisor: Chongqi Zhang**

## 摘 要

混料试验设计是一种重要的试验设计方法,也是数理统计学的一个重要研究领域,在生物化学、工程、材料和农学等学科领域有广泛的应用。它是通过混料函数来求解的。在实际生产中,许多因素和条件都是不确定的,为满足产品质量和生产效率的要求,往往需要进行多次试验。混料试验设计就是在满足产品质量要求和生产效率要求的前提下,以最小化试验次数为目标,通过对混料函数进行优化来确定最佳混料方案的一种方法。其目的即是在一定的约束条件下,以最小的费用和最大的收益为目标函数,在试验过程中对各个因素进行调整,得到最优的试验设计。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试验设计的一个重要研究课题。

第一,本文应用混料试验的思想,推导讨论了两类常见混料模型:低阶 Scheffé 中心多项式模型和混料 K 模型的 V-最优配置问题。在约束条件的限制下,基于 V-最优准则理论,计算得到了两类模型的 V-最优观测的一般解析表达式,同时利用 V-准则的等价性定理对三分量二阶混料中心多项式模型、二分量二阶混料 K 模型所得到的最优配置进行了证明。最后对具体分量的两类低阶混料模型的 V-最优设计的效率进行了对比分析。

第二,本文应用 R-最优准则理论,结合约束条件的限制探讨了多响应多项式模型的 R-最优配置问题。计算得到了由两个 Scheffé 二阶混料模型构成的多响应模型的 R-最优配置,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。最后利用 R-准则的等价性定理及乘积设计的理论,证明了由 Scheffé 一阶和二阶混料模型构成的多响应混料模型的 R-最优配置就是 R-最优设计。

**关键词:** 混料模型 多响应模型 最优设计 信息矩阵 等价性定理 条件极值

## Abstract

Designs of mixture experiments is an important experimental designs methods, and also an important research field of mathematical statistics. It has been widely used in biochemistry, engineering, materials and agronomy. It is solved by the mixing function. In the actual production, many factors and conditions are uncertain, in order to meet the requirements of product quality and production efficiency, often need to carry out multiple tests. Experimental designs methods is a method to determine the best mixing scheme by optimizing the mixing function on the premise of meeting the requirements of product quality and production efficiency, aiming at minimizing the number of tests. Its purpose is to adjust various factors in the process of the test under certain constraints, with the minimum cost and maximum income as the objective function, and get the optimal experiment designs. Optimal designs problems based on different optimality criteria have been an important area of research in experimental designs under different mixture models.

Firstly, using the idea of mixture experiments, two kinds of common mixing models are derived and discussed: the low-order Scheffe central polynomial model and the second-order K model. Under the constraint conditions, based on the theory of V-optimal criterion, the general analytical expressions of V-optimal observations for two types of models

are obtained. Meanwhile, the equivalence theorem of V-criterion is used to prove the optimal configurations of the three-component second-order central polynomial model and the two-component second-order K model. Finally, the efficiency of V-optimal design of two types of low-order mixture models with specific components is compared and analyzed.

Then, This article applies the R-optimality criterion theory and explores the R-optimal allocation problem of a multi-response polynomial model with constraints. The R-optimal allocation of a multi-response model composed of two Scheffé second-order mixed models is computed, and the optimality of the obtained allocation is proved using the equivalence theorem of the R-criterion. Finally, the equivalence theorem of R-criterion is used to prove that the R-optimal configuration of the multi-response mixing model composed of Scheffé's first-order and second-order mixing models is the R-optimal design.

**Keywords :** Mixture model; Multiple response model; Optimal design; Information matrix; Equivalence theorem; Conditional extremum

# 目 录

<b>1 引 言</b> .....	<b>8</b>
1.1 选题背景及研究意义 .....	8
1.2 国内外研究现状 .....	10
1.3 研究内容、研究思路及可能的创新点 .....	13
1.3.1 研究内容 .....	13
1.3.2 研究思路 .....	13
1.3.3 可能的创新点 .....	14
<b>2 混料试验设计</b> .....	<b>16</b>
2.1 混料问题 .....	16
2.2 最优设计 .....	20
2.2.1 信息矩阵 .....	21
2.2.2 最优设计准则及等价性定理 .....	22
2.3 混料试验设计的效率 .....	25
2.4 乘积设计 .....	26
<b>3 混料模型的 V-最优设计</b> .....	<b>28</b>
3.1 模型介绍 .....	28
3.2 $q$ 分量二阶混料中心多项式模型 V-最优设计 .....	29
3.3 $q$ 分量二阶混料 K 模型的 V-最优设计 .....	35
3.4 效率对比分析 .....	38
<b>4 多响应混料模型的 R-最优设计</b> .....	<b>40</b>
4.1 模型介绍 .....	40
4.1.1 多响应 Scheffé 二阶混料模型 .....	40
4.1.2 Scheffé 一阶和二阶构成的多响应混料模型 .....	41
4.2 多响应 Scheffé 二阶混料模型的 R-最优设计 .....	41
4.3 Scheffé 一阶和二阶构成的多响应混料模型的 R-最优设计 .....	46
<b>5 结论与展望</b> .....	<b>49</b>

---

5.1 主要结论 .....	49
5.2 研究不足和有待进一步探讨的问题 .....	49
<b>参考文献 .....</b>	<b>51</b>
<b>攻读硕士学位期间所发表的论文 .....</b>	<b>54</b>
<b>致 谢 .....</b>	<b>55</b>



# 1 引言

## 1.1 选题背景及研究意义

在材料工程、材料科学等领域中，如何在有限的资源下最大限度地提高材料的性能一直是科学家们所关注的问题。在有限的资源条件下，如何实现材料的最优化设计，使其性能达到或超过期望值，成为一个十分重要和有意义的研究课题。因此，试验设计是解决这一问题的主要途径之一。而混料试验设计是一种用于优化材料性能或工艺过程中原材料用量的试验设计方法，它通过同时测试多个不同参数(如材料成分、配比和加工工艺)，来探索最佳性能和改进工艺。在混料试验中，首先要确定待优化对象和要求，然后把它划分为若干个子问题，每一个子问题都有其特定的目标函数和约束条件。在每一个子问题中，为了得到最优解集，必须在各种可能的条件下进行试验设计。因此，混料试验设计就是要在有限资源下找到各子问题的最优解集。

试验设计的基本思想和方法是英国统计学家、工程师费歇尔于二十世纪二十年代创立的。推广试验设计的意义十分重大。自费歇尔创立了“试验设计”后，许多试验设计的研究工作一直在进行。最优设计理论的传统主题是对试验进行设计，以取得最可能的准确统计推断。Smith 是最早提出回归问题准则并找到最佳试验设计的先驱之一。Kiefer 和 Wolfowitz<sup>[1]</sup>在回归设计理论方面做出了巨大贡献，将 Smith 在 1918 年提出的准则和 Wald 在 1943 年提出的准则分别称为 G-最优性和 D-最优性<sup>[2,3]</sup>，并证明了它们之间的等价性。现在，最优设计的影响已经扩大到几乎所有的试验设计的领域。近年来，由于混料试验在生产实际中有非常广泛的应用，而日益受到人们的重视。

随着科技的发展，混料试验设计方法在不断改进。现在，混料试验设计方法已经发展得非常成熟，可以用于研究多种因素对产品性能的影响。此外，混料试验设计还可以用于研究复杂系统中的性能问题，从而更好地了解系统的运行机制和特性。总之，混料试验设计是一种非常有效的试验设计方法，可以用于研究多种因素对产品性能的影响。随着科技的不断发展，混料试验设计将继续得到改进和发展，为人类提供更多有用的信息。它是由 Scheffé 提出来的，距现在有六十多年的发展历史。Scheffé<sup>[4]</sup>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一格子设计的设计方法，单纯形一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<sup>[5]</sup>提出了单纯形一中心设计方法，对之前提出的设计方法加以改进。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,它将统计学和计算机科学的理论与方法应用到混料试验设计中,从理论上解决了混料试验设计中的复杂问题。从混料试验设计的发展进程来看,研究者们逐渐开始关注混料试验设计中的最优设计理论,并将其应用于解决复杂问题。其中,A-最优准则、R-最优准则和 V-最优准则等最为常见。这些准则的提出原理都是基于模型中未知参数估计的优劣情况,即各准则的出发点是相同的,但它们所考虑的侧重点有所不同。此外,研究者们还将这些准则应用于解决复杂问题中,如寻找最小投资比、提高混料成本等。

从那以后,有关的研究学者们对混料试验设计的讨论和分析越来越多,并且越来越深入,逐渐发展成混料试验设计这个体系,囊括了许多新的小部分:比如 Cox 设计、轴设计、混料均匀设计、最优设计、稳健设计等。在此期间,又相继出现了多种有不同实用价值的最优设计准则,受到各位学者广泛运用的有 A-最优准则、D-最优准则、R-最优准则、V-最优准则等,这些准则的提出原理都是基于模型中未知参数估计的优劣情况,即各准则的出发点是相同的,但它们所考虑的侧重点有所不同。生产者或试验者常对产品的几种感兴趣的特性展开研究,这些特性往往与产品成份所占总量的比例之间存在函数关系,而不受混料总量的影响。混料问题的可控变量,即每种成份在混料总量中所占的百分比,是不能任意变化的,要受某些约束的限制。这些百分比必须都是非负的,而且相加之和必须是 1。混料试验设计随着科技的迅速发展,最优设计理论一直是研究者们关注的重点。

如今,许多产品都是由两种以上的成分组合而成的,其原因在于,使用单一的某一种物质所耗费的经济成本,所产生的效应,经过试验的检验,往往要大于使用与多种物质组合使用所耗费的经济成本,其效应也大不相同。因此,怎样在不同的试验中进行合理的分配,以达到最好的效果和经济效益呢?这正是混料试验设计需要解决的问题。例如,面包是由面粉、水、糖、酵母、盐这五种材料做成的,那么面包的酥脆程度就取决于面粉、水、糖、酵母、盐所占的比例。往往研究者所感兴趣的某个特性指标(面包的酥脆程度)与可控制变量(面粉,水等所占的比例)之间存在着函数关系,即当可控制变量(各成分所占的比例)发生变化时,研究者们所关注的特性指标也会发生相应的变化。为了达到试验目的,使其特性指标(面包的酥脆程度)达到研究者的预期,更进一步研究产品的特性指标与可控变量之间的函数关系就变得尤为重要,这样一来,研究者就可以通过所得到的函数关系确定出某种准则下的最优成分组合,以便更好满足生产需求。然而,在理论研究上,特性指标与可控变量所占比例之间的函数关系仍没有定论,

无法得到相应的解析表达。这时候，就可以通过一种广泛应用于试验设计中的技术“响应曲面法”，确定试验因素与试验结果之间的关系，得到两者之间的近似表达式，来确定最优的试验设计方案。它能够有效地模拟实际情况，从而获得更加准确的试验结果。在这当中，响应变量是衡量试验结果的量化指标。此外，在实际的生活和使用过程中，我们不但会解决上述诸如面包酥脆程度的单响应的实际课题，更多的将面临解决大量含有多个响应变量的实际问题。近年来，随着人们生活水平的不断提升，人们有了更多的经济能力，可以更好地选择高品质、高智能的商品，这既给企业带来了巨大的机遇，也给企业带来了巨大的挑战。企业要想增强其市场竞争能力，就必须提供高品质、少瑕疵的产品。现如今，衡量质量好坏通常具有多个指标，这是由于在实际工作中，随着客户需求的多元化、产品工艺的精细化、产品间的相关性越来越强、系统统计理论的飞速发展等一系列的需要，过去只采用一个质量指标进行的产品设计，已无法满足时代的需要。为了对多响应的实际问题有一个更加直观的认识，本文以缝隙障板为例，进行一个简单的介绍。智能电视的一个关键组成部分是彩色显像管，而彩色显像管离不开的一个东西是缝隙障板，其质量至关重要，决定着显像管能否正常运行。红、绿、蓝 3 种不同的电子束穿缝隙障板上的条孔，并分别击中相应的粉条（红、绿、蓝）上：64 厘米彩色管遮光板大约有 50 万个条孔，这意味着荧光屏上大约有 150 万个荧光粉条。电视生产商通常通过调整缝隙障板上的条孔的大小和个数来进一步优化彩色管的质量。缝隙障板上的条孔的半径越大，孔的个数越多，缝隙障板的质量就更好。研究就会发现条孔的半径和条孔的个数都会随着缝隙障板上条孔与条孔之间的距离变化，所以，就可以通过控制条孔与条孔之间的距离，得到一个距离的最优配置，进而使条孔的半径和个数也达到理想中的目标。

在此基础上，在混料试验设计的大框架下，不管是研究单个响应还是多响应问题，都将能够有效地揭示出它们的特性及其规律，从而展现出其重要的理论意义和应用价值。这种研究也将有助于我们更好地理解 and 利用不同材料之间的性能差异，为改善产品质量提供科学依据。

## 1.2 国内外研究现状

### (1) V-和 R-最优设计研究现状

关于 Scheffé 模型 V-最优混料设计的发表的结果可以在 Lambrakis<sup>[6]</sup>、Laake<sup>[7]</sup>、Liu

和 Neudecker<sup>[8]</sup>中找到。Liu 和 Neudecker<sup>[9]</sup>讨论了 Becker(1968)模型的 V-最优设计。刘双喆<sup>[10]</sup>证明了单纯形 Scheffé 中心设计 V-最优观测频数实际上是整体利益区域上的 V-最优设计。关颖男和张崇岐<sup>[11]</sup>运用 CAD 算法得到二阶可加模型的 V-最优设计。Legesse 和 Linda<sup>[12]</sup>研究随机截距项的简单线性回归模型的 V-和 D-最优化人口设计,用几何方法来确认全局最优获得 V-最优设计并扩展至 D-最优情况。Goos 和 Syafitri<sup>[13]</sup>提出重新寻找连续的  $q$  维混料模型 V-最优设计的问题。Jones 和 Goos<sup>[14]</sup>讨论了 V-和 D-最优的响应曲面设计。Wiens 和 Li<sup>[15]</sup>研究了 V-最优的异方差情况,应用了静态设计,给出一个完全自适应序列估计方法,产生一致的方差估计和渐近 V-最优设计。在本文中,我们主要关注最常用的 Scheffé 模型以及 K 模型。和 Scheffé (1958, 1963)一样,我们也专注于简单形状的试验区域。

Dette<sup>[16]</sup>利用 Bonferroni-t 区间的方法(待估参数联合估计),构造了一个矩形置信区域,并在这个区域内基于特定的线性回归模型推得一类最优准则—R-最优准则。自 1997 年 Dette 提出 R-准则之后,许多研究者都开始投入该准则的理论研究,受到了广泛关注。赵洪雅等<sup>[17]</sup>于 2000 年在 R-准则的基础上给出了二阶 Scheffé 正则多项式模型的 R-最优问题,讨论了它的参数估计的 R-最优设计。2001 年,赵洪雅等<sup>[18]</sup>进一步介绍了  $q-1$  维的二阶可加混料模型参数估计的 R-最优设计问题。孙超<sup>[19]</sup>将 R-最优设计的思想由混料模型推广到随机系数模型中,借助随机系数模型 R-最优设计的迭代算法给出了该模型 R-最优设计的简单性质和等价性定理。2016 年, Liu 等<sup>[20]</sup>在  $k$  维单位立方体和单位球上,创新地研究了二阶响应曲面模型 R-最优设计的构造问题,并给出了构造算法。李俊鹏等<sup>[21]</sup>借助矩阵理论讨论了 R-最优设计问题,又将问题拉回到常见的混料模型:  $q$  分量二阶混料 K 模型。近年来, R-准则与线性模型、回归模型的结合也成为了研究者的研究热点。晋珊<sup>[22]</sup>将其与 Logistic 回归模型结合,给出了该模型在试验区域内的 R-最优设计。Liu 和 Yue<sup>[24]</sup>则继 2016 年之后基于该准则,通过证明在 R-最优性方面 Elfving 定理的适用性,又探索了多响应情况下 R-最优设计的构造问题,并给出了其几何刻画。胡小玲<sup>[23]</sup>则是在李俊鹏 K 模型的基础上讨论了二阶塌落模型的 R-最优设计问题,充分展示了混料最优设计的思想。贺磊<sup>[25]</sup>于 2019 年,基于现有的文献对混料试验设计的若干问题进行了梳理,并通过推导计算详细给出了多种不同的混料模型的 R-最优问题。2021 年, Hao 等<sup>[26]</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。

## (2) 混料中心多项式模型、混料 K 模型

1963年, Scheffé基于混料规范多项式首次提出了改进的 Scheffé中心多项式模型。该模型的提出为研究者也提供了新的方向: 佟毅等<sup>[27]</sup>基于 A-准则, 讨论了单纯形区域内中心多项式模型的 A-最优设计。冷薇等<sup>[28]</sup>则选择该模型作为研究对象, 验证了 LASSO 变量选择在高维混料中心多项式模型的可行性, 并比较分析了 AIC 准则和 LASSO 在进行变量筛选时所展现出的不同与相同点。

Draper<sup>[29]</sup>对于混料试验中单个成分对于试验结果的权重强于交互效应的情况, 利用向量与矩阵的 Kronecker 代数, 提出了混料试验的二阶 K 模型, 它不同于其他混料模型, 是一类齐次模型, 它是将混料分量的基本约束条件代入, 从而将整个多项式中的一次项剔除, 只保留二次项。这样就方便研究时不用分开讨论, 而是将线性转为二次项进行研究。基于 K 模型展开的研究分布广泛, Manisha 和 Pal<sup>[30,31]</sup>是基于 K 模型, 利用了矩阵理论进行了最优设计的研究。龚政等<sup>[32]</sup>展开研究了含过程变量的 K 模型, 并求出其 q 分量下满足 D-最优准则的正交区组设计。张小峰<sup>[33]</sup>讨论了二阶二变量的混料随机变系数 K 模型的 V-最优。

### (3) 多响应混料问题的发展

由于混料试验所用的因素较多, 每一因素对混料后产品质量的影响效果较复杂, 因此, 要对这些因素进行全面分析是困难的。为了避免这种情况的出现, 在进行混料试验时, 可以采用多响应混料试验方法。在实际生活中, 由于客户需求日益多元化、生产工艺日趋复杂、以及对于试验设计所达效果的更高要求, 品质特征的评价指标常常是多个, 基于此研究多响应混料问题具有重要的理论意义和实际意义。与单响应混料模型下的最优设计理论的快速发展相比, 多响应混料模型的最优设计理论发展相对迟缓, Draper 和 Hunter<sup>[34]</sup>是最早研究多响应模型最优设计的, 他们探讨的是在多响应模型下基于参数估计的试验设计问题。Fedorov<sup>[35]</sup>则是建立了多响应模型最优设计的理论基础, 同时给出一种构造 D-最优近似设计的迭代算法。ROY<sup>[36]</sup>等将单一响应模型下的经典最优设计准则推广到了多响应模型的情况。Wijesinh<sup>[37]</sup>等给出了多响应模型协方差未知情况下 D-最优设计的迭代算法。Chang<sup>[38]</sup>等得到了由一个 r 次多项式和 m 次多项式所构成的双响应回归模型的 D-和 D<sub>s</sub>-最优设计。JIN<sup>[39]</sup>等提出了由 Scheffé一阶和二阶所组成的多响应混料模型并进行了讨论。顾原<sup>[40]</sup>讨论了多响应线性模型的复合最优设计。乐锐<sup>[41]</sup>将多响应混料模型推广到由两个 Scheffé q 分量二阶可加混料模型所构成的多响应混料模型。

## 1.3 研究内容、研究思路及可能的创新点

### 1.3.1 研究内容

本文的重点是在混料试验设计的大框架下，基于两种常见的最优准则，通过计算推导分析了混料单响应问题 and 多响应问题，增加了单响应和多响应问题的理论研究。基于低阶混料中心多项式模型、混料 K 模型以及二阶多响应模型，嵌套 V-最优准则、R-最优准则理论，获得了两类低阶单响应模型的 V-最优配置，以及二阶多响应模型的 R-最优配置。论文布局有五章，各个章节的具体研究将按照以下思路展开：

第一章，首先重点阐述了选题背景、研究意义，并对国内外的研究文献展开了回顾，最后给出了本文的整体结构流程图。

第二章，重点对本论文所需的相关理论进行了阐述，主要包括混料问题、最优设计准则和设计效率等方面的基本理论，以及如何使用这些理论来指导后面论文的展开，为后续两章的研究提供坚实的基础，有助于我们更好地理解研究过程中所涉及的各种问题。

第三章，基于 V-最优准则，讨论分析了低阶 Scheffé 多项式模型的 V-最优设计的理论论证。除此之外，在具体的生产生活中需要结合具体的实际问题选取不同的混料模型，所以探讨了二阶混料 K 模型的 V-最优设计问题，并对二者进行了最优设计效率对比分析。

第四章，展开讨论了多响应混料模型 R-最优设计的相关内容。本章以 R-最优设计理论为基础，在混料试验的基本约束条件的限制下，针对由 Scheffé 二阶混料模型构成的多响应混料模型的 R-最优设计问题进行了深入的探讨，并运用 R-准则的等价性定理、多变量函数极值定理等方法证明 R-最优设计问题。最后，运用乘积设计理论进一步证明了由 Scheffé 一阶和二阶混料模型构成的多响应混料模型的 R-最优设计。

第五章，经过对论文的讨论结果进行总结，发现了研究的不足，并提出了一些有待进一步探讨的问题，以便能够更好地改善现有的研究。

### 1.3.2 研究思路

文章内容结构的流程图框架如下图 1.1 所示。

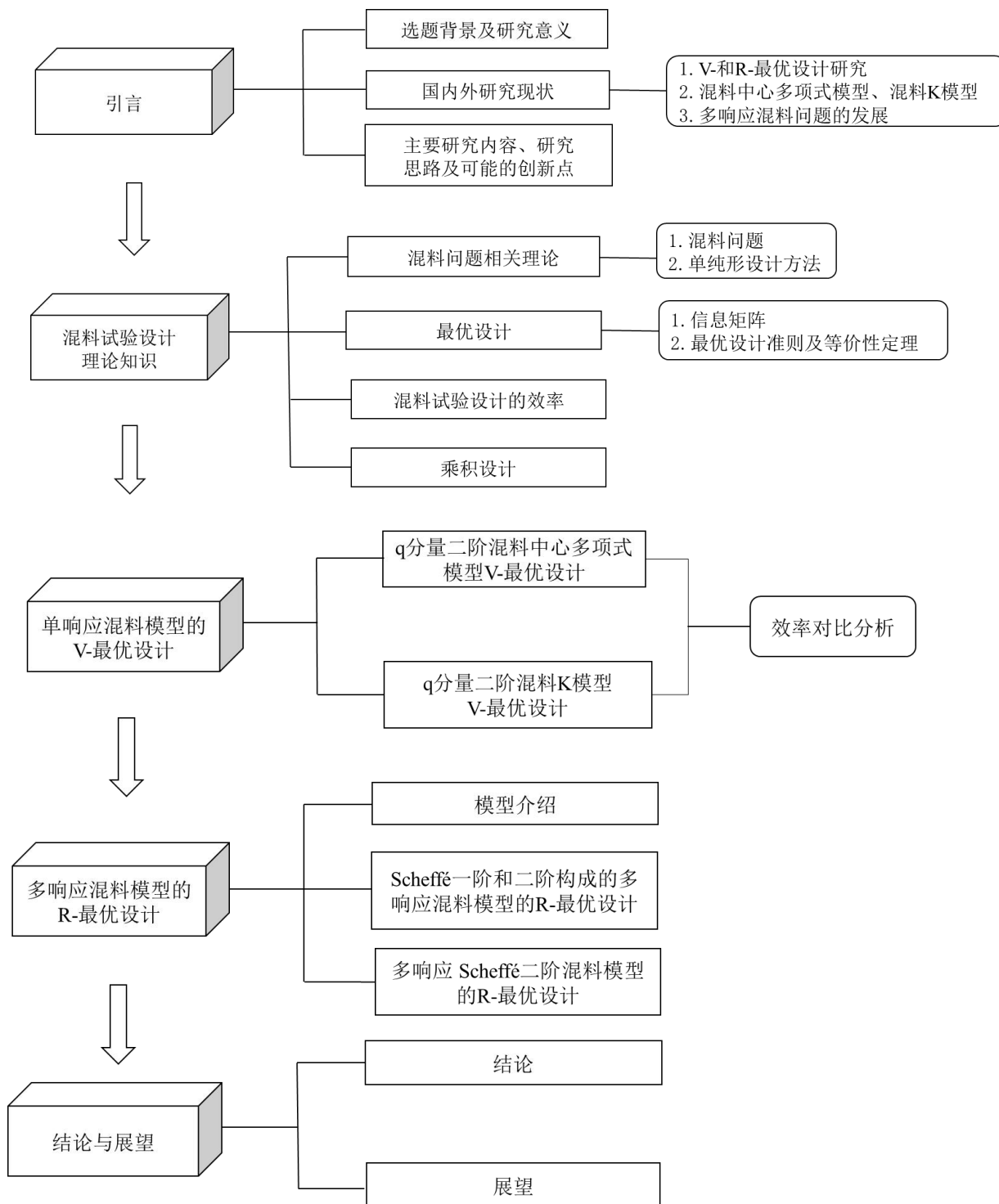


图 1.1 技术路线图

### 1.3.3 可能的创新点

- (1) 针对 V-最优设计相关理论知识，探讨了单响应混料模型的 V-最优设计。
- (2) 以具体分量为例，对不同混料模型的 V-效率进行了对比分析。

(3) 将 R-最优设计与多响应混料模型结合起来, 并分别利用矩阵运算以及乘积设计理论, 讨论了多响应混料模型的 R-最优设计问题。



## 2 混料试验设计

无论是当今还是未来人们的日常生活、工农业生产和科学研究中,为了得到在某个指标或多个指标满意的成品,通常将原材料按不同比例进行混合,即混料问题。例如盖房子所需的混凝土是由水、碎石、不同类型的水泥和沙子组成的混合物。在这个过程中,人们关注的指标是混凝土的强度,它的性能取决于混凝土中每种成分占测试总量的比例。随着混凝土中不同成分比例的变化,混凝土的强度也随之变化。从实际考虑出发,通过试验设计获得一批数据,进而得到我们所关注的指标与可控变量之间的函数关系,这将帮助我们筛选出产品制作时的最佳配比,这也是生产及试验过程重点关注的问题。

### 2.1 混料问题

混料试验设计是因为它是在一定的约束条件下进行的,这些约束条件是:试验次数,试验质量要求(即精度),成本约束条件(即效率)。在上述约束条件下,进行混料试验的目的是确定出一组或几组产品的最优成分组合,进而可以确定出在该最优成分组合下产品的特性指标或响应变量(如混凝土的强度)。与传统的均匀设计不同,混料试验的结果是在一定的约束条件下确定出的。在设计混料试验时,首先要建立试验点,根据给定的可控变量选择一个或几个试验点。当然,对混料产品的特性指标或响应(如混凝土强度)而言,选取的试验点一般是具有代表性的点。该代表性值应满足这些点的分布要均匀,即要将所有可能影响产品特性指标或响应变量的可控变量都考虑进去;而且每个试验点的取值应能代表产品的特性指标或响应变量(如混凝土强度)。为此,在设计混料试验时,应根据对产品特性指标或响应变量的影响程度选择几个试验点,并尽量使这几个试验点分布均匀。

在  $q$  分量混料试验模型中,用  $E(Y)$  表示试验指标或响应值,  $x_1, x_2, \dots, x_q$  表示混料系统中  $q$  种成分各占的百分比,则混料试验设计就是要在满足约束条件

$$\begin{cases} 0 \leq x_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, q \\ \sum_{i=1}^q x_i = 1, i = 1, 2, \dots, q \end{cases} \quad (2-1)$$

的限制下进行试验,并由此定义了一个  $q - 1$  维正规单纯形试验区域

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

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。

混料问题明确后,还需要选择恰当的试验设计,应用试验设计方法获取试验点。混料试验设计是一种特殊的回归设计,即是在给定的某些约束条件下,适当地选取试验点进行试验,并探求响应观测值  $y$  关于各分量比例  $x$  的函数关系的一种回归设计方法,其中每种设计方法的试验利益区域及其回归模型都是相应的,下面介绍几种常用的试验设计方法:

### (1) 单纯形格子设计

在回归设计中,每种设计方法是与一定的试验利益区域及数学模型相适应的。单纯形格子设计的利益区域是整个的正规单纯形,其数学模型不是一般的多项式。我们所要拟合的数学表达式在整个单纯形区域上表示响应曲面。为了能够做到这样,很自然的选择这样的设计:设计的试验点均匀的分布在整个单纯形因子空间中。我们知道,正规单纯形的格子点均匀而且有规律的分布在正规单纯形因子空间中,故针对给定的混料规范多项式模型,将试验点取在相应阶数的正规单纯形格子点上,这样的试验设计称为单纯形格子设计。其  $q-1$  维  $m$  阶的混料单纯形格子设计中有  $C_{q+m-1}^m$  个格子点,全部格子点构成  $q-1$  维  $m$  阶格子点集,记为  $\{q,m\}$ 。

当  $q=3$  时,单纯形格子设计的试验利益区域可以发现是一个等边三角形,三角形的三条边相交形成的三个交点,以及三条边的二等分点构成的整个点集称为三分量二阶格子点集,记为  $\{3,2\}$ ,如图 2.1(a)所示;三阶格子点集可以表示为  $\{3,3\}$ ,它是将等边三角形的三条边平分成三个相等的小线段,然后将相邻边上的相对应的点连接起来,这样就形成与第三条边平行的线段,而由此形成的所有交点的集合即是所要求的点集,如图 2.1(b)所示;三分量的试验利益区域里加起来有 15 个点,记为  $\{3,4\}$ ,如图 2.1(c)所示。同样的,  $q=4$ ,它的试验区域可以表示为一个正四面体,这个四面体的所有交点和每条边上的二等分点所构成的集合就可以称为四分量二阶的格子点集  $\{4,2\}$ ,如图 2.1(d)所示;同理,这个四面体的所有边的交点和每条边上的三等分点,还有每个面上的重点所构成的大集合则称为四分量三阶的格子点集  $\{4,3\}$ ,如图 2.1(e)所示。

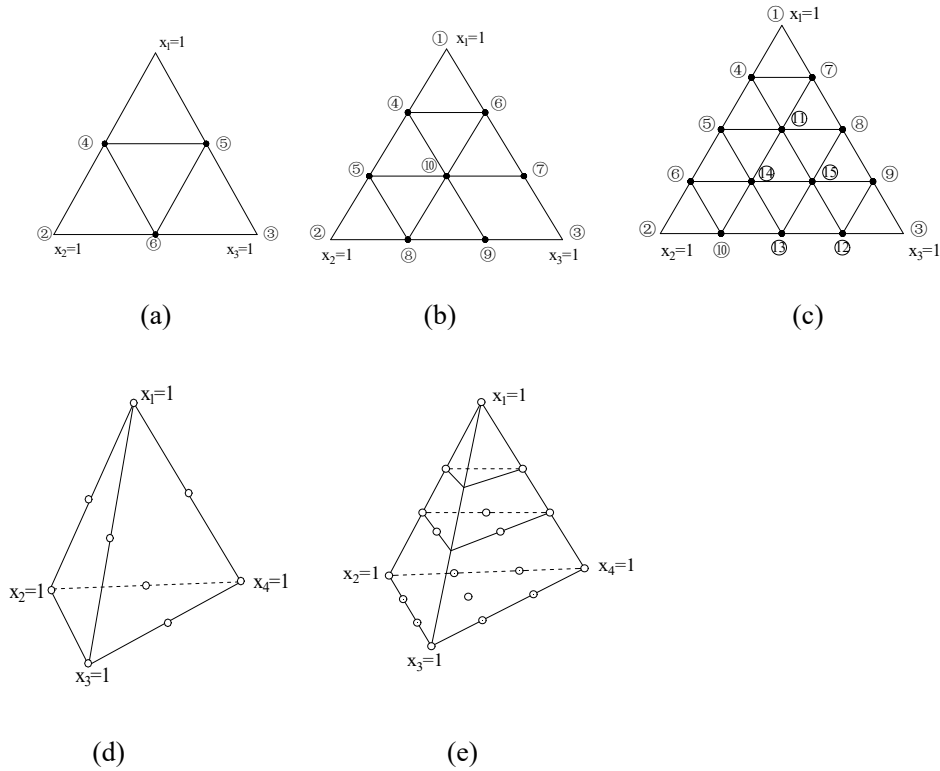


图 2.1 二维与三维单纯形格子点集

试验设计的相关研究中，整个试验利益区域上的点集会利用坐标系来标记，比如说某个  $q-1$  维  $m$  阶的单纯形-格子点集  $\{q, m\}$  中，就能将每个交点分别标记为  $r_1 = (1, 0, \dots, 0)$ ， $r_2 = (0, 1, \dots, 0)$ ， $\dots$ ， $r_q = (0, 0, \dots, 1)$ ，那么试验区域上的随便一个点都可

以标记为  $R(\frac{r_1}{m}, \frac{r_2}{m}, \dots, \frac{r_q}{m})$ ，并且单纯形格子设计的试验点的集合可以用

$$\{q, m\} = \left\{ \left( \frac{r_1}{m}, \frac{r_2}{m}, \dots, \frac{r_q}{m} \right) \mid r_1 + r_2 + \dots + r_q = m, r_i \geq 0 (i=1, 2, \dots, q), r_i \in Z \right\}$$

来表示，上式也可以用来计算  $\{q, m\}$  中每一个点的单纯形坐标。下面以  $n=4$  为例，算出  $\{4, 2\}$  和  $\{4, 3\}$  各点的坐标。即  $q=4, m=2$  时， $r_1, r_2, r_3$  和  $r_4$  有两种取法：某个  $r$  为 2，其余者为零，有  $C_4^1 = 4$  个点；某两个  $r$  为 1，其余者为零，有  $C_4^2 = 6$  个点。 $\{4, 2\}$  的 10 个点如表 2.1 所示。

$\{q, m\}$  表示一个混料试验，混料规范多项式模型也就是  $q$  分量  $m$  阶的混料试验通过拟合想要呈现的效果，这类模型也可以标记为多项式。

表 2.1  $\{4,2\}$  各点坐标

点号/坐标	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
1	1	0	0	0
2	0	1	0	0
3	0	0	1	0
4	0	0	0	1
5	1/2	1/2	0	0
6	1/2	0	1/2	0
7	1/2	0	0	1/2
8	0	1/2	1/2	0
9	0	1/2	0	1/2
10	0	0	1/2	1/2

为了方便论文的展开，接下来阐述三种在混料试验设计的理论研究中被广泛应用的混料规范多项式。

(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

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

(2) 单纯形中心设计

1963年, Scheffé首次通过一系列研究定义了一种优势相比单纯形格子设计更突出的设计方法。单纯性中心设计方法主要有以下两方面的改进:一方面它是在对数据进行回归拟合时,一次性囊括了所有分量的混料响应预测值,这样一来就改进了单纯形格子设计仅仅用 $q$ 个分量的片面性,相比起来,这种预测更可靠,更符合实际情况,包含了多

种可能。另一方面，单纯形中心设计当模型由低阶变到高阶时，它会剔除掉一些项，既使得多项式的内部结构保持对称，也不至于让在进行试验时需要的试验点过多。由此产生了如下这样的  $q$  分量中心多项式，

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \cdots + \beta_{123 \dots q} x_1 x_2 \cdots x_q \quad (2-2)$$

对于  $q$  分量中心多项式，采用单纯形中心设计方法，恰好整个试验区域内的试验点都落在试验区域内的每个处在中心的点上。分别是：

$(1, 0, \dots, 0)$  的  $C_n^1$  个排列，表示纯混料；

$(1/2, 1/2, 0, \dots, 0)$  的  $C_n^2$  个排列，表示两种成分等比例混合；

$(1/3, 1/3, 1/3, 0, \dots, 0)$  的  $C_n^3$  个排列，表示三种成分等比例混合；

$(1/n, 1/n, 1/n, \dots, 1/n)$  的  $C_n^n$  个排列，表示所有成分等比例混合。

经过计算可以看到，当试验区域内的所有试验点，它的分量等于零，或者各个分量赋予相等的值时，记起来有  $C_n^1 + C_n^2 + \cdots + C_n^n = 2^n - 1$  个试验点，因此，单纯形-中心设计在试验利益区域内也是一种饱和设计。

## 2.2 最优设计

最先讨论最优设计这一新的概念的是 Kiefer，随着试验设计理论框架越来越明晰，最优设计也在试验设计大框架中扮演越来越重要的角色，将其与混料试验设计结合起来的研究者也水涨船高。这种设计是预先给定特性指标与各控制变量之间的关系是符合某类函数模型所描述的关系的，研究怎么样选择试验点和用何种方法来得到问题获得最优解时试验点所对应的测度。从而使得在混料试验的几类最优设计准则下，预先设定的函数模型中未知参数可以获得最优估计的一种设计方法。最优设计，得到的结果也就是最优方案。为了验证最优方案，可以将其推广到更一般的形式。例如，如果试验中引入了一个随机因素，该因素对混料试验的结果影响不大时，则可以将最优方案推广到任意数量的随机因素（即最优准则）。

### 2.2.1 信息矩阵

设计的信息矩阵不仅与试验设计方案所安排的试验点，与试验采用的方法也有关，还与假设的回归模型息息相关。一般设定响应变量与控制变量之间存在以下的回归模型：

$$y(x) = f(x)^T \beta + \varepsilon$$

这里， $\varepsilon$  表示为随机误差，满足假设： $E(\varepsilon) = 0$ ， $\text{var}(\varepsilon) = \delta^2 I$ ， $\beta$  代表的是未知的参数向量， $\delta^2$  则代表未知方差， $f(x)$  是回归函数向量。若设总试验次数为  $N$ ， $x_1, \dots, x_N$  为试验点，并记  $F = (f(x_1)^T, \dots, f(x_N)^T)^T$ ，则上述模型还可以写为  $E(y) = F^T \beta$ 。未知参数  $\beta$  的最小二乘估计为  $\hat{\beta} = (F^T F)^{-1} F^T y$ ，最小二乘估计的方差为  $\text{var}(\hat{\beta}) = (F^T F)^{-1}$ 。信息矩阵则可以表示为试验设计中，计算得到模型中未知参数的最小二乘估计，由此便可以知道其协方差矩阵，进而计算得到逆矩阵，即  $M = F^T F$ 。在该模型下，设计  $\xi$  所对应的信息矩阵为  $M(\xi_n) = \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) f(x_i)^T$ 。然而实际所遇到的问题往往很复杂，要满足方差相等的设定更是难上加难，因此，我们也要关注方差不相等的情况。设定响应变量与可控变量之间同样是符合上面所阐述的回归模型，而且各个可控变量的观测值互相也是完全独立的，误差期望还是为 0，知识各个观测点  $x_i$  之间的方差有了变化

$$\text{var}(y_i | x_i) = \frac{\delta^2}{w(x_i)}, i = 1, \dots, N。记$$

$$W = \begin{pmatrix} w(x_1) & & & \\ & w(x_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & w(x_n) \end{pmatrix},$$

则未知参数向量  $\beta$  的加权最小二乘估计为  $\hat{\beta} = (F^T W F)^{-1} F^T W y$ ，方差为  $\text{var}(\hat{\beta}) = \delta^2 (F^T W F)^{-1}$ 。该模型的信息矩阵为加权最小二乘估计的协方差矩阵的逆矩阵，即  $M = F^T W F$ 。

上面的理论是在模型为线性模型的基础上所研究的，众所周知，日常实际的生产生

活有很多问题所涉及到的数据是不符合线性模型所表达的特点的，因此就要采用非线性模型，尤其是广义线性模型。广义线性模型在生物医学，经济社会等各个领域的数据研究中扮演着重要的角色，它从最初讨论的正态理论回归模型，逐渐发展到单参数指数分布族中的任意分布，这样一来，也让广义线性模型的应用更广泛，适用于各行各业的数据资料。

设响应变量  $y$  的均值为  $\mu$ ，即  $E(y) = \mu$ ， $x$  表示的是控制变量， $f(x)$  称为回归函数变量， $\beta$  被标记为回归参数向量，称  $\eta = f(x)^T \beta$  为线性预测项，针对广义线性模型，它满足严格单调且充分光滑的函数  $g(\cdot)$ ，即  $g(\mu) = \eta$ ，称函数  $g(\cdot)$  为连结函数，响应变量  $y$  服从的分布为指数族分布，这样就意味着响应变量的均值和期望暗含着某种函数关系，这值得思考。当然可以试着假设  $\text{var}(y) = \phi V(\mu)$ ，这里  $\mu$  为分散度函数，称  $V(\mu)$  为方差函数。由参数的极大似然估计的方差可以得到：在广义线性模型的大框架下，可以推导出它的设计  $\xi$  的信息矩阵为  $M(\omega, \xi) = \int \omega(x) f(x) f(x)^T$ ，其中  $w(x) = V^{-1}(x) \left( \frac{d\mu}{d\eta} \right)^2$ 。可知广义线性模型的信息矩阵与响应变量服从的分布、连续函数的选取有关，也就是说广义线性模型的信息矩阵的计算是会涉及到模型中的未知参数，这对于我们的研究分析无疑是非常不利的。研究人员只能另辟蹊径，往往通过设定一定参数的先验信息，从而应用局部最优、贝叶斯最优，极大极小最优等方法去达到预期设定的最优目标。在本篇文章的讨论中主要采用极大极小来寻找最优设计。

### 2.2.2 最优设计准则及等价性定理

最优设计是一种相对高级的试验设计方法，旨在通过最少的试验次数找到最佳的参数组合，以实现特定的目标。最优设计可以应用于各种领域，包括工程、医学、农业等。最优设计往往与一个目标函数有关，通常都是先建立一个目标函数，也就是最优准则函数，使得这个函数在混料试验的基本约束下达到最优。设定就采用常见的混料模型或是其他回归模型的条件下，因此得到的准则函数一般都是试验所选定的设计所对应的信息矩阵的一个凸可微函数，记作  $\Phi(M(\xi))$ 。

**定义 2.1** 设实验的设计区域为  $\chi$ ， $\Xi = \{\xi: \xi \text{ 是 } \chi \text{ 上的概率分布}\}$  为  $\chi$  上所有设计的

集合,  $M(\Xi) = \{M(\xi) : \xi \in \Xi\}$  为  $\chi$  上所有设计的信息矩阵的全体,  $\Phi(\cdot)$  是定义在  $M(\Xi)$  上的一个准则函数, 若设计  $\xi^* \in \Xi$  满足

$$\Phi(M(\xi^*)) = \inf_{\xi \in \Xi} \Phi(M(\xi))$$

则称设计  $\xi^*$  为  $\Phi$ -最优设计。

如果准则函数是确定的, 那么最优设计的准则函数的计算将离不开模型的信息矩阵。常见的最优准则有 D-最优、A-最优、G-最优、V-最优等。下面介绍几种常见的最优设计的准则及其判定定理。

(1) D-最优设计准则

若设计  $\xi^* \in \Xi$  满足

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

则称设计  $\xi^*$  为 D-最优设计。D-最优设计的理论阐述为: 使得由设计矩阵所得到的信息矩阵进行行列式计算, 然后使得这个式子取到最大值。

D-最优设计的等价定理: 一个设计为 D-最优设计, 当且仅当

$$\varphi_D(\tau, \xi) = f^T(\tau)M(\xi)f(\tau) \leq m$$

且在驻点处等号成立。其中,  $m$  是参数个数。也就是方差函数的最大值要小于等于未知参数的个数。

(2) A-最优设计准则

若设计  $\xi^* \in \Xi$  满足

$$\Phi(M(\xi^*)) = \min_{\xi \in \Xi} \text{tr}(M^{-1}(\xi))$$

则称设计  $\xi^*$  为 A-最优设计。即 A-最优设计通过求得信息矩阵的逆, 继而计算得到信息矩阵逆的迹值。  $\text{tr}(M^{-1}(\xi))$  所表达的是先计算得到参数向量的每一个分量的最小二乘估计的方差, 再对其进行加和。因此, A-最优设计是所加和的方差取得最小值。A-最优设计的等价定理, 若一个设计为 A-最优设计, 当且仅当

$$\varphi_A(\tau, \xi) = f^T(\tau)M^{-1}(\xi)M^{-1}(\xi)f^T(\tau) \leq \text{tr}(M^{-1}(\xi)),$$

且在驻点处等号成立。



## (3) G-最优准则

若设计  $\xi^* \in \Xi$  满足

$$\Phi(M(\xi^*)) = \min_{\xi \in \Xi} \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \xi)$$

则称设计  $\xi^*$  为 G-最优设计。其中  $d(x, \xi)$  表示设计  $\xi$  的标准化方差函数。在信息矩阵的逆不等于 0 的条件下，在点  $x$  处的预测值  $\hat{y}(x)$  的方差  $\text{var}(\hat{y}(x)) = d(x, \xi)$ 。G-最优设计即可以描述为在整个试验利益区域内，去求得预测方差最大值最小时的最优设计。又因为其与博弈论 (Game) 中的极大极小化是相似的，故称为 G-最优。G-最优设计的等价定理：若一个设计为 G-最优设计，当且仅当：集合  $Z(\xi) = \left\{ a \in \mathcal{X} \mid d(a, \xi) = \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \xi) \right\}$  中

存在一个测度  $\mu$ ，有

$$\varphi_G(x, \xi) = \int [f^T(x)M^{-1}(\xi)f(a)]^2 \mu d(a) \leq d(a, \xi),$$

且在驻点处等号成立。

## (4) V-最优设计准则

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

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

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

$$W = \int \cdots \int \text{var}(\hat{y}(x)) dx_1 \cdots dx_{q-1}$$

为整个单纯形区域上响应估计的积分方差。

对于模型(2-2)，则

$$\begin{aligned} W &= \int_{S_{q-1}} f^T(x)M^{-1}f(x)dx_1 \cdots dx_{q-1} \\ &= \int_{S_{q-1}} f^T(x)(X^{-1}\Lambda X)f(x)dx_1 \cdots dx_{q-1} \\ &= \text{tr}[(X^{-1}\Lambda X)^{-1}L] \end{aligned}$$

这里，信息矩阵  $M = X^T\Lambda X$ ，设计矩阵  $X = [f_1(x), f_2(x), \cdots, f_q(x)]^T$ ，测度矩阵

$\Lambda = \text{diag}(r_1 I_{11}, r_1 I_{22}, \dots, r_q I_{qq})$ ,  $I_{kk}$  为  $C_q^k \times C_q^k$  阶单位阵,  $f^T(x)M^{-1}f(x)$  为给定点  $x$

的响应估计的方差:  $L = \int_{S_{q-1}} f^T(x)f(x)dx_1 \cdots dx_{q-1}$ 。使  $W$  在  $q-1$  维正规单纯形试验区

域  $S_{q-1}$  的平均值达极小值的设计称为 V-最优设计。即

$$\text{AVE}(\text{var}(\hat{y})) = \frac{\int_{S_{q-1}} f^T(x)M^{-1}f(x)dx_1 \cdots dx_{q-1}}{\int_{S_{q-1}} dx} = \frac{\text{tr}[(X^T \Lambda X)^{-1}L]}{\int_{S_{q-1}} dx} = \frac{\text{tr}[M^{-1}L]}{\int_{S_{q-1}} dx}$$

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

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

其中,  $B = L \cdot \Gamma(q)$ 。

### (5) R-最优设计准则

若设计  $\xi^* \in \Xi$  满足

$$\Phi(M(\xi^*)) = \min_{\xi \in \Xi} \prod_{i=1}^m (M^{-1}(\xi))_{ii}$$

则称设计  $\xi^*$  为 R-最优设计。其中  $(M^{-1}(\xi))_{ii}$  是矩阵  $M^{-1}(\xi)$  主对角线上的元素。R-最优设计可以描述为: 求得信息矩阵的逆之后, 进一步得到逆矩阵主对角线上元素的乘积, 使得这个值取得最小值。R-最优设计的等价定理: 若一个设计为 R-最优设计, 当且仅当

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

这里,  $e_i = (0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0)^T$  表示的是  $n$  维单位列向量, 它只有第  $i$  个元素取值为 1, 其它元素都取值为 0。  $N$  代表的是参数空间上的维数, 并且在设计点  $x$  为支撑点时取等号。

## 2.3 混料试验设计的效率

在《关于试验设计的效率及有关问题》一书中, 张建方认为, “效率”是一种用于表示投入方式和输出结果效果的量度, 是一种用于评价一项设计最佳效果的量度。人们一开始进行试验设计的目的, 以及最终想取得的结果都是提高效率, 提高生产生活的效率, 效率也成为人们衡量一次试验是否成功的重要指标。在混料试验的大框架下, 基于

不同最优准则的效率也因此被定义。

(1) D-最优设计准则下的效率为

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

(2) A-最优设计准则下的效率为

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

(3) R-最优设计准则下的效率为

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

(4) V-最优设计准则下的效率为

$$e_V(\xi) = \frac{\text{tr}(M^{-1}(\xi_A)B)}{\text{tr}(M^{-1}(\xi)B)}$$

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

(5) G-最优设计准则下的效率为

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

其中,  $\xi_D$  代表的是混料模型的 D-最优设计,  $\xi_A$  则代表混料模型的 A-最优设计,  $\xi_R$  代表混料模型的 R-最优设计,  $\xi_V$  代表混料模型的 V-最优设计,  $\xi$  表示的是在随便一种最优准则下的任何一种可能的设计,  $\det(M(\xi))$  代表的是设计  $\xi$  的信息矩阵的行列式,  $\text{Tr}(M(\xi))$  表示信息矩阵的迹,  $d(x, \xi)$  为由混料模型所计算得到的离差函数,  $n$  表示模型中未知参数的数量。

## 2.4 乘积设计

**定义 2.4** 所谓两个设计的乘积设计, 是指两个设计所对应的概率测度的 Kronecker

乘积，即新的设计点为原有设计的设计点的所有组合，而对应的概率为原对应概率的乘积<sup>[42]</sup>。

如：设计  $\xi = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ p_1 & p_2 \end{pmatrix}$  与  $\eta = \begin{pmatrix} t_1 & t_2 \\ p_1 & p_2 \end{pmatrix}$  的乘积设计为

$$\xi \otimes \eta = \begin{pmatrix} (X_1, t_1) & (X_1, t_2) & (X_2, t_1) & (X_2, t_2) \\ p_1 \times w_1 & p_1 \times w_2 & p_2 \times w_1 & p_2 \times w_2 \end{pmatrix}.$$

### 3 混料模型的 V-最优设计

#### 3.1 模型介绍

混料系统中，当有  $q$  个不同成分时，我们可以使用维数为  $q$  的正规单纯形来表示混料的各个成分。在这个正规单纯形的每个顶点上，我们可以计算出一个多项式模型，称为  $q$  阶单纯形中心多项式模型：

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \cdots + \beta_{123 \dots q} x_1 x_2 \cdots x_q \quad (3-1)$$

该多项式模型可以用来描述不同成分在混料中的相互作用和混料特性，从而帮助我们更好地理解和控制混料系统的行为。具体而言，该模型可以根据混料的各个分量的浓度向量，预测混料的物理、化学性质等各种特性。因此，在混料系统中， $q$  阶单纯形中心多项式模型是非常重要的工具和模型。当模型中有  $q$  个分量时，采用单纯形中心设计的方法，根据试验点的数量等于单纯形上的顶点数加 1，可以得到有  $2^q - 1$  个不尽相同的试验点数。特别地，当阶数  $n = 2$  时， $q - 1$  维正规单纯形  $S_{q-1}$  上的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， $\beta_i$ ， $\beta_{ij}$  是模型中要求取的参数，加起来有  $C_q^1 + C_q^2 = \frac{q^2 + q}{2}$  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  $j$  的非可加性混料系统，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。上面涉及到混料系统中的两个参数：单一分量  $i$  混料的期望响应值  $\beta_i$  和分量  $i$  与  $j$  的非可加性混料系统的代表  $\beta_{ij}$ 。首先，单一分量  $i$  混料的期望响应值指的是只加入分量  $i$  的情况下，混料系统的期望响应值。可以理解为单独加入分量  $i$  后，混料系统的表现。这个参数通常用于评估某种成分在混料系统中的贡献程度。其次，分量  $i$  与  $j$  的

非可加性混料系统的参数，是指在混料系统中，分量  $i$  和分量  $j$  之间存在非线性关系，无法简单地将各个分量的响应值直接加起来得到混料系统的总体响应值。这时，需要通过这个参数来描述混料系统的性质。具体地，这个参数可以拆解为三个部分：纯分量  $i$  混料的期望响应、纯分量  $j$  混料的期望响应以及分量  $i$  与  $j$  等比例混料的期望响应之线性组合。这些信息可以帮助我们更好地理解混料系统中各个成分之间的相互作用和影响。

二阶二变量的 K 模型

$$y = \beta_{11}x_1^2 + \beta_{22}x_2^2 + \beta_{12}x_1x_2 \tag{3-3}$$

K 模型与 Scheffé 模型很相似，主要的不同在于 K 模型含有  $x_i^2$  项，而 Scheffé 模型却没有。

### 3.2 q 分量二阶混料中心多项式模型 V-最优设计

引理 3.1<sup>[43]</sup> 对于混料试验区域  $S_{q-1}$  上的二阶中心多项式模型(3-2)，响应估计的最优设计驻点是  $S_{q-1}$  上的各类中心点（顶点、中点和重心）。

假设在模型(3-2)中，我们有若干个测度，分别用来衡量每个顶点和两个顶点中心，并且这些指标满足一些特定的条件： $C_q^1 r_1 + C_q^2 r_2 = 1$ 。为了设计这个模型的试验，我们采用了单纯形中心设计方法，并根据这种方法得到了对应的设计矩阵，该矩阵的具体数值可见于表 3.1。

表 3.1 单纯形中心设计的设计矩阵  $X$

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

...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$C_q^2+1$	0	0	0	...	1/2	1/2	0	0	...	1/4

它可分块为  $X = \begin{bmatrix} I_q & 0_{\alpha_{12}} \\ \frac{1}{2}M_{\alpha_{21}} & \frac{1}{4}I_m \end{bmatrix}$ , 这里  $I_q$  表示的是  $q$  阶单位矩阵,  $0_{\alpha_{ij}}$  表示的是  $C_q^i \times C_q^j$  阶

零矩阵,  $M_{\alpha_{ij}}$  即  $C_q^i \times C_q^j$  阶的  $0-1$  矩阵。它的排在第一行前面的第  $i$  个元素为 1, 对于第一行中的每个位置, 其他行的元素在该位置的取值都按照第一行对应位置的元素值在字典序中的排列顺序排列。  $I_m$  是  $C_q^2$  阶单位阵. 测度矩阵表示为:  $D(\xi) = \begin{bmatrix} r_1 I_q & 0 \\ 0 & r_2 I_m \end{bmatrix}$ , 则该

模型所对应的信息矩阵  $M(\xi)$  为:

模型所对应的信息矩阵  $M(\xi)$  为:

$$M(\xi) = X^T D(\xi) X = \begin{bmatrix} r_1 I_q + \frac{r_2}{4} M_{\alpha_{21}}^T M_{\alpha_{21}} & \frac{r_2}{8} M_{\alpha_{21}}^T \\ \frac{r_2}{8} M_{\alpha_{21}} & \frac{r_2}{16} I_m \end{bmatrix}$$

利用矩阵反演公式, 求出信息矩阵  $M(\xi)$  的逆为:

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

又可知

$$f(x)f(x)^T =$$

$$\begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 x_2 & x_1 x_3 & \cdots & x_1 x_q & x_1^2 x_2 & x_1^2 x_3 & \cdots & x_1 x_{q-1} x_q \\ x_2 x_1 & x_2^2 & x_2 x_3 & \cdots & x_2 x_q & x_2^2 x_1 & x_2 x_1 x_3 & \cdots & x_2 x_{q-1} x_q \\ x_3 x_1 & x_3 x_2 & x_3^2 & \cdots & x_3 x_q & x_3 x_1 x_2 & x_3^2 x_1 & \cdots & x_3 x_{q-1} x_q \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_q x_1 & x_q x_2 & x_q x_3 & \cdots & x_q^2 & x_q x_1 x_2 & x_q x_1 x_3 & \cdots & x_q^2 x_{q-1} \\ x_1^2 x_2 & x_2^2 x_1 & x_3 x_1 x_2 & \cdots & x_q x_1 x_2 & x_1^2 x_2^2 & x_1^2 x_2 x_3 & \cdots & x_1 x_2 x_{q-1} x_q \\ x_1^2 x_3 & x_2 x_1 x_3 & x_3^2 x_1 & \cdots & x_q x_1 x_3 & x_1^2 x_2 x_3 & x_1^2 x_3^2 & \cdots & x_1 x_3 x_{q-1} x_q \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_1 x_{q-1} x_q x_2 x_{q-1} x_q x_3 x_{q-1} x_q \cdots x_q^2 x_{q-1} x_1 x_2 x_{q-1} x_q x_1 x_3 x_{q-1} x_q \cdots x_q^2 x_{q-1}^2 \end{bmatrix}$$

由

$$\int x_1^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \int x_2^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \cdots = \int x_{q-1}^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \frac{2}{(q+1)!}$$

$$\int x_1 x_2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \cdots = \int x_q x_{q-1} dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \frac{1}{(q+1)!}$$

$$\int x_1^2 x_2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \cdots = \int x_{q-1}^2 x_q dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \frac{2}{(q+2)!}$$

$$\int x_1 x_2 x_3 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \cdots = \int x_{q-2} x_{q-1} x_q dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \frac{1}{(q+2)!}$$

$$\int x_1^2 x_2^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \cdots = \int x_{q-1}^2 x_q^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \frac{4}{(q+3)!}$$

$$\int x_1 x_2 x_{q-1} x_q dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \cdots = \int x_{q-3} x_{q-2} x_{q-1} x_q dx_1 dx_2 \cdots dx_{q-1} = \frac{1}{(q+3)!}$$

可以得到矩阵 L 为:

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

其可分块为

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

这里,  $J_{\alpha_{ij}}$  为  $C_q^i \times C_q^j$  阶元素全为 1 的矩阵,  $M_{\alpha_{ij}}$  为  $C_q^i \times C_q^j$  阶 0-1 矩阵, 它的首行的排在前面的两个元素为 1, 对于第一行中的每个位置, 其他行的元素在该位置的取值都按照第一行对应位置的元素值在字典序中的排列顺序排列。



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

其中

$$A = 3(2-q)I_q + qJ_{\alpha_{11}} - 2M_{\alpha_{21}}^T J_{\alpha_{11}}, B = (q-1)M_{\alpha_{12}} + (q+3)J_{\alpha_{12}} - 2M_{\alpha_{21}}^T M_{\alpha_{22}} - 2M_{\alpha_{21}}^T J_{\alpha_{22}},$$

$$C_1 = 2(q-6)M_{\alpha_{21}} + 4(q-2)J_{\alpha_{21}} + 4J_{\alpha_{11}} M_{\alpha_{21}}^T + 4J_{\alpha_{11}} J_{\alpha_{21}}^T - 2(q+2)M_{\alpha_{21}} J_{\alpha_{21}}, C_2 = M_{\alpha_{21}} + J_{\alpha_{21}},$$

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

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

则矩阵  $M^{-1}(\xi)L$  的迹为:

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

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

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

的解。利用拉格朗日乘子法, 令

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

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

$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial r_1} = -\frac{1}{r_1^2} \frac{2q}{(q+2)!} (4q^2 - 7q - 14) + q\lambda = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial r_2} = -\frac{1}{r_1^2} \frac{64q}{(q+3)!} + \frac{q(q-1)}{2} \lambda = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial \lambda} = qr_1 + C_q^2 r_2 - 1 = 0 \end{cases} \quad (3-5)$$

结合 Mathematica 软件解方程组(3-5), 可得模型(3-2)的 V-最优观测频数的一般表达式为:

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

因此, 得到如下定理。

**定理 3.1** 对于三分量二阶混料中心多项式模型, 测度设计

$$\xi^* = \left( \begin{array}{c|c|c|c|c|c} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ r_1^* \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ r_1^* \end{pmatrix} & \dots & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ r_1^* \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ r_2^* \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ \vdots \\ 0 \\ r_2^* \end{pmatrix} & \dots & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ r_2^* \end{pmatrix} \end{array} \right)$$

是 V-最优设计. 这里  $r_1^* = 0.100723159654081750$ ,  $r_2^* = 0.232610173582679252$ .

**证明** 首先, 我们将使用单纯形算法找到一个最优解, 即 V-最优配置。接着, 我们将证明该解在整个单纯形利益区域内的任何其他解都不会比我们找到的最优解更优。

当  $q = 3$  对应设计矩阵为:  $X = \begin{bmatrix} I_3 & 0_{12} \\ \frac{1}{2} M_0 & \frac{1}{4} I_3 \end{bmatrix}$ , 其中  $M_0 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ , 对应测度矩阵为

$diag(\xi) = \begin{pmatrix} r_1 I_3 & 0 \\ 0 & r_2 I_3 \end{pmatrix}$ , 其中  $r_1, r_2$ , 满足  $3r_1 + 3r_2 = 1$ 。信息矩阵

$M(\xi) = \begin{bmatrix} r_1 I_3 & \frac{r_2}{4} M_0^T M_0 \\ \frac{r_2}{8} M_0 & \frac{r_2}{16} I_3 \end{bmatrix}$ , 则易求得信息矩阵的逆  $M^{-1}(\xi)$  以及该模型所对应的矩阵 L:

$$M^{-1}(\xi) = \begin{bmatrix} \frac{1}{r_1} & 0 & 0 & -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} \\ 0 & 0 & \frac{1}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} \\ -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} & 0 & \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{4}{r_1} \\ -\frac{2}{r_1} & 0 & -\frac{2}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} & \frac{4}{r_1} \\ 0 & -\frac{2}{r_1} & -\frac{2}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{4}{r_1} & \frac{16}{r_2} + \frac{8}{r_1} \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} \frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{180} & \frac{1}{360} & \frac{1}{360} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{360} & \frac{1}{180} & \frac{1}{360} \\ \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{360} & \frac{1}{360} & \frac{1}{180} \end{bmatrix}$$

则矩阵 $M^{-1}(\xi)L$ 为:

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

这样由 V-最优设计准则就可得如下条件极小值问题:

$$\begin{cases} \min_{\hat{S}_{q-1}} tr(M^{-1}(\xi)L) = \min \frac{1}{20r_1} + \frac{4}{15r_2} \\ 3r_1 + 3r_2 = 1 \end{cases}$$

结合 Mathematica 软件利用拉格朗日乘子法可得到结果:

$$r_1 \rightarrow 0.100\ 723\ 159\ 750\ 654\ 081$$

$$r_2 \rightarrow 0.232\ 610\ 173\ 582\ 679\ 252$$

因此, 三分量二阶中心多项式模型的 V-最优配置为

$$\begin{cases} r_1^* = 0.100\ 723\ 159\ 654\ 081750 \\ r_2^* = 0.232\ 610\ 173\ 582\ 679\ 252 \end{cases}$$

再证明该配置是整个单纯形利益区域最优的, 运用 V-最优等价定理, 由引理 3.1 可知,

$$\text{可取 } f(x) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}, 0, 0\right)^T,$$

$$\text{因此 } f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x) \leq \text{tr}(M^{-1}(\xi)L) = 0.61105117766515301。$$

定理 3.1 证毕。

### 3.3 q 分量二阶混料 K 模型的 V-最优设计

本节讨论的是如何在正规单纯形  $S_{q-1}$  上进行二阶 K 模型的 V-最优设计问题。该模型涉及到未知参数的估计, 需要进行试验来获取相关数据。在正规单纯形上, 可以实现饱和的 V-最优设计, 这意味着试验点的数量达到了最小化参数估计误差的极限, 从而最大程度地提高了试验效率。我们可以通过以下引理来确定试验点集。试验点集的确定是通过引理得出的。这里需要注明的是,  $\beta_{ii}$ 、 $\beta_{ij}$  为需要求取的参数, 加起来有  $k = q + \binom{q}{2}$  个。

**引理 3.2** 对于混料试验区域  $S_{q-1}$  上的二阶 K 模型(3-3), 响应估计的最优设计驻点是  $S_{q-1}$  上的各类中心点 (顶点、中点和重心) <sup>[43]</sup>。

假设  $r_1$ ,  $r_2$  分别表示  $S_{q-1}$  上的每个顶点及两顶点重心的测度, 且满足  $qr_1 + \binom{q}{2}r_2 = 1$ ,

则模型(3-3)所对应的设计矩阵  $X$  为:  $X = \begin{pmatrix} I_q & 0 \\ \frac{1}{4}M_2 & \frac{1}{4}I_m \end{pmatrix}$ , 测度矩阵为  $\Lambda = \begin{pmatrix} r_1I_q & 0 \\ 0 & r_2I_m \end{pmatrix}$ 。

则该模型所对应的信息矩阵  $M(\xi)$  为

$$M(\xi) = X^T \Lambda X = \begin{pmatrix} r_1I_q + \frac{r_2}{16}M_2^T M_2 & \frac{r_2}{16}M_2^T \\ \frac{r_2}{16}M_2 & \frac{r_2}{16}I_m \end{pmatrix}$$

求出信息矩阵的逆为:

$$M^{-1}(\xi) = \begin{pmatrix} \frac{1}{r_1} I_q & -\frac{1}{r_1} M_2^T \\ -\frac{1}{r_1} M_2 & \frac{16}{r_2} I_m + \frac{1}{r_1} M_2 M_2^T \end{pmatrix}$$

其中,  $\mathbf{0}$  为  $q \times \binom{q}{2}$  阶零矩阵,  $M_2$  为第一行前两个元素是 1, 其余行为第一行字母的字典

排序的  $\binom{q}{2} \times q$  阶矩阵, 令  $m = \binom{q}{2}$ , 记  $I_m$  和  $I_q$  分别为  $m$  阶和  $q$  阶单位矩阵。

可计算得分块矩阵  $L$  为:

$$L = \begin{bmatrix} \frac{4}{(q+3)!} (5I_q + J_{\delta_{11}}) & \frac{2}{(q+3)!} (2M_{\delta_{12}} + J_{\delta_{12}}) \\ \frac{2}{(q+3)!} (2M_{\delta_{21}} + J_{\delta_{21}}) & \frac{1}{(q+3)!} (2I_m + M_{\delta_{22}} + J_{\delta_{22}}) \end{bmatrix}$$

$$M^{-1}(\xi) L = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

其中,

$$A = \frac{16(q-1)}{(q+3)! r_1} I_q - \frac{2}{(q+3)! r_1} M_{\delta_{21}} J_{\delta_{12}}$$

$$D = \left[ \frac{-3(q-2)}{(q+3)! r_1} + \frac{32}{(q+3)! r_2} \right] I_m + \left[ \frac{-3}{(q+3)! r_1} + \frac{q-2}{r_1} + \frac{16}{(q+3)! r_2} \right] J_{\delta_{22}}$$

$$+ \left[ \frac{1}{(q+3)! r_1} (J_{\delta_{22}} M_{\delta_{22}} - 2M_{\delta_{21}} J_{\delta_{12}}) \right] + \left[ \frac{q-2}{(q+3)! r_1} + \frac{16}{(q+3)! r_2} \right] M_{\delta_{22}} + \frac{1}{r_1} J_{\delta_{22}} J_{\delta_{22}}$$

这里,  $J_{\delta_{ij}}$  为  $\binom{q}{i} \times \binom{q}{j}$  阶元素全为 1 的矩阵,  $M_{\delta_{ij}}$  为  $\binom{q}{i} \times \binom{q}{j}$  阶 0-1 矩阵, 其第一行的前两个元素为 1, 其余行是第一行按字典顺序的全排列。

则矩阵的迹为

$$\begin{aligned} \text{tr}(M^{-1}(\xi)L) &= \left[ \frac{1}{r_1} \cdot \frac{4!}{(q+3)!} + \left(-\frac{1}{r_1}\right) \cdot \frac{3!}{(q+3)!} \cdot (q-1) \right] \cdot q + \left[ \left(-\frac{1}{r_1}\right) \cdot \frac{3!}{(q+3)!} \times 2 + \left(\frac{16}{r_2} + \frac{2}{r_1}\right) \times \frac{4}{(q+3)!} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{r_1} \cdot \frac{2}{(q+3)!} \times 2(q-2) + \frac{1}{r_1} \cdot \frac{1}{(q+3)!} \cdot \frac{(q-2)(q-3)}{2} \right] \cdot \frac{q(q-1)}{2} \\ &= \frac{q}{(q+3)!} \left[ \frac{1}{r_1} (2q^2 - 14q + 36) + \frac{32}{r_2} (q-1) \right] \end{aligned}$$

由 V-最优准则定义可得如下约束极小值问题

$$\begin{cases} \min \operatorname{tr}(M^{-1}(\xi)L) = \frac{q}{(q+3)!} \cdot \left[ \frac{1}{r_1} (2q^2 - 14q + 36) + \frac{32}{r_2} (q-1) \right] \\ qr_1 + \binom{q}{2} r_2 = 1 \end{cases}$$

利用拉格朗日乘子法, 令

$$G(r_1, r_2, \lambda) = \frac{q}{(q+3)!} \left[ \frac{1}{r_1} (2q^2 - 14q + 36) + \frac{32}{r_2} (q-1) \right] + \lambda \left( qr_1 + \binom{q}{2} r_2 - 1 \right)$$

对参数  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $\lambda$  求偏导, 得

$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial r_1} = -\frac{1}{r_1^2} \cdot \frac{q}{(q+3)!} (2q^2 - 14q + 36) + \lambda q \\ \frac{\partial G}{\partial r_2} = -\frac{32}{r_2^2} \cdot \frac{q(q-1)}{(q+3)!} + \lambda \cdot \frac{q(q-1)}{2} \\ \frac{\partial G}{\partial \lambda} = qr_1 + \frac{q(q-1)}{2} r_2 - 1 \end{cases}$$

由  $\frac{\partial G}{\partial r_1} = 0$ ,  $\frac{\partial G}{\partial r_2} = 0$ ,  $\frac{\partial G}{\partial \lambda} = 0$ 。可计算得到结果:

$$\begin{cases} r_1^* = \frac{1}{2q} \cdot \left( 2 - \frac{16q^2 - 32q^3 + 16q^4}{-10q^2 - 9q^3 + 7q^4} - \frac{4\sqrt{2}(q-q^2)\sqrt{18q^2 - 7q^3 + q^4}}{-10q^2 - 9q^3 + 7q^4} \right) \\ r_2^* = \frac{4(-4q + 4q^2 - \sqrt{2}\sqrt{18q^2 - 7q^3 + q^4})}{-10q^2 - 9q^3 + 7q^4} \end{cases} \quad (3-6)$$

**定理 3.2** 对于二阶二分量混料 K 模型, 测度设计

$$\xi^* = \begin{pmatrix} (1,0) & (0,1) & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

是 V-最优设计。

**证明** 利用 V-最优等价性定理证明, 二阶二分量混料 K 模型的测度是最优的。要证明定理, 只需证明  $f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x) \leq \operatorname{tr}(M^{-1}(\xi)L)$ 。

$$\begin{aligned}
 f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x) &= (x_1^2, x_2^2, x_1x_2) \times \\
 &\begin{pmatrix} \frac{1}{r_1} & 0 & \frac{1}{r_1} \\ 0 & \frac{1}{r_1} & \frac{1}{r_1} \\ \frac{1}{r_1} & \frac{1}{r_1} & 2(\frac{1}{r_1} + \frac{8}{r_2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & \frac{1}{30} & \frac{1}{20} \\ \frac{1}{30} & \frac{1}{5} & \frac{1}{20} \\ \frac{1}{20} & \frac{1}{20} & \frac{1}{30} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{r_1} & 0 & \frac{1}{r_1} \\ 0 & \frac{1}{r_1} & \frac{1}{r_1} \\ \frac{1}{r_1} & \frac{1}{r_1} & 2(\frac{1}{r_1} + \frac{8}{r_2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^2 \\ x_2^2 \\ x_1x_2 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{8r_1r_2x_1(x_1-x_2)^2x_2 + 128r_1^2x_1^2x_2^2 + r_2(x_1-x_2)^2(2x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2)}{15r_1^2r_2^2}
 \end{aligned} \tag{3-7}$$

由 (3-6) 可得， $q=2$  时， $r_1^* = \frac{1}{4}$ ， $r_2^* = \frac{1}{2}$ ，将其代入 3-7，则

$$f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x) = \frac{64}{15}(x_1(x_1-x_2)^2x_2 + 8x_1^2x_2^2 + \frac{1}{4}(x_1-x_2)^2(2x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2))$$

由于  $x_1+x_2=1$ ，即  $x_1=1-x_2$ ，代入  $f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x)$ ，令

$Max(x_2) = f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x)$ ，通过软件 `mathematicas` 计算得到

$$Max(f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x)) = \frac{32}{15}, \quad tr(M^{-1}(\xi)L) = \frac{32}{15}, \quad \text{那么可得}$$

$$tr(M^{-1}(\xi)L) \geq f^T(x)M^{-1}(\xi)LM^{-1}(\xi)f(x)。$$

定理 3.2 证毕。

### 3.4 效率对比分析

在设计中，衡量最优性的重要指标之一是效率。本节将讨论关于三分量二阶混料中心多项式模型和三分量二阶混料 K 模型的 V-最优设计的效率。换言之，我们将探讨如何在设计过程中优化效率。

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

$$e_v(\xi) = \frac{tr(M^{-1}(\xi_v)B)}{tr(M^{-1}(\xi)B)}$$

由 3.1, 3.2 节可知， $q=3$  时，二阶混料中心多项式模型和混料 K 模型的 V-最优设计相同，为

$$\xi^* = \{r_1^* = 0.100723, r_2^* = 0.232610\}。$$

因此，对于二阶混料模型，中心多项式模型与 K 模型在设计效率方面优势相当，为

$$e_v(\xi) = \frac{0.611051}{\frac{1}{20r_1} + \frac{4}{15r_2}}$$

可以看到，两类模型的 V-最优设计效率由测度  $r_1$  和  $r_2$  的取值决定。



## 4 多响应混料模型的 R-最优设计

在本章中，我们将研究两种多响应混料设计模型的 R-最优设计方法。其中，Scheffé 二阶混合设计模型具有独特的特点：它由两个多响应混料模型组成，并且这两个模型所需的设计点数量相等。相对而言，Scheffé 一阶和二阶多响应混料模型更为复杂，因为这两个模型所需的设计点数量不相等。通过研究这些模型，我们可以优化试验设计，提高试验效率和准确性。

### 4.1 模型介绍

#### 4.1.1 多响应 Scheffé 二阶混料模型

考虑模型：

$$E[Y(x)] = \begin{bmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^T(x) & 0 \\ 0 & f_2^T(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1(x) \\ \varepsilon_2(x) \end{bmatrix} \quad (4-1)$$

其中，

$$f_1^T(x) = (x_1, x_2, \dots, x_q, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{q-1}x_q),$$

$$f_2^T(x) = (x_1, x_2, \dots, x_q, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{q-1}x_q),$$

$$\beta_1 = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1q}, \beta_{112}, \beta_{113}, \dots, \beta_{1,q-1,q})^T,$$

$$\beta_2 = (\beta_{21}, \dots, \beta_{2q}, \beta_{212}, \beta_{213}, \dots, \beta_{2,q-1,q})^T,$$

$$E(\varepsilon_i(X)) = 0, (i=1,2)$$

$$\text{Var}(\varepsilon_1(x), \varepsilon_2(x)) = \Sigma = \begin{pmatrix} \delta_1^2 & \mu\delta_1\delta_2 \\ \mu\delta_1\delta_2 & \delta_2^2 \end{pmatrix}$$

对于 Scheffé  $q$  分量二阶混料模型，计划  $\xi_1$  均匀配置测度  $r_1 = \frac{(q-1)\sqrt{2q^2+q^3}-2q}{-2q-q^3+q^4}$  到各个

顶点  $x \leftrightarrow (1, 0, \dots, 0)$ ， $r_2 = \frac{2(q^2 - \sqrt{2q^2+q^3})}{-2q-q^3+q^4}$  到各个二顶点中心  $x \leftrightarrow (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0)$  为 R-最

优设计。对于双曲面混料模型，所考虑的试验计划  $\xi^* \in S^{q-1}$  的支撑点也同样限定在顶点

$x \leftrightarrow (1, 0, \dots, 0)$  和二顶点中心  $x \leftrightarrow (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0)$ 。因为模型相对于  $q$  个分量  $x_1, x_2, \dots, x_q$  都是对称的，则在任一种最优标准下，在同一类顶点中心设计点上试验的测度都必须相等。

设在每个顶点的测度为  $r_1$ ，在二顶点测度为  $r_2$ ，这里  $r_1$  和  $r_2$  要满足约束条件

$$qr_1 + \frac{q(q-1)}{2}r_2 = 1, 0 \leq r_1, r_2 \leq 1。$$

#### 4.1.2 Scheffé一阶和二阶构成的多响应混料模型

考虑模型：

$$E[Y(x)] = \begin{bmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^T(x) & 0 \\ 0 & f_2^T(x) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1(x) \\ \varepsilon_2(x) \end{pmatrix} \quad (4-2)$$

其中，

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

$$f_2^T(x) = (x_1, x_2, \dots, x_q, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{q-1}x_q),$$

$$\beta_1 = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1q})^T,$$

$$\beta_2 = (\beta_{21}, \dots, \beta_{2q}, \beta_{212}, \beta_{213}, \dots, \beta_{2,q-1,q})^T,$$

$$E(\varepsilon_i(X)) = 0, (i=1, 2)$$

$$\text{Var}(\varepsilon_1(x), \varepsilon_2(x)) = \Sigma = \begin{pmatrix} \delta_1^2 & \mu\delta_1\delta_2 \\ \mu\delta_1\delta_2 & \delta_2^2 \end{pmatrix}。$$

#### 4.2 多响应 Scheffé二阶混料模型的 R-最优设计

下面在 R-最优标准下求出最优测度  $r_1$  和  $r_2$ 。

一个设计  $\xi$  由试验利益区域上的设计点  $x_1, x_2, \dots$  的集合，以及分布在这些设计点上的测度  $\xi_1, \xi_2, \dots$  集所构成，这里， $\xi_i \geq 0, (i=1, 2, \dots)$ ，且  $\xi_1 + \xi_2 + \dots = 1$ 。对于混料模型

$\varphi(x) = \beta^T F(x)$  和设计  $\xi$ ，信息矩阵为

$$M(\xi, \Sigma) = \int_{S_{q-1}} \phi(x) \Sigma^{-1} \phi^T(x) d\xi(x),$$

其中,  $\phi^T(x)$  是分块对角矩阵  $\text{diag}(f_1^T(x), f_2^T(x))$ ,  $\Sigma$  是协方差矩阵, 假设我们有很多观测值, 在这些观测值受到一定的测量误差影响, 观测误差服从期望为零, 方差为  $\delta^2$  的正态分布。通常, 我们使用最小二乘法来优化误差。这里, 我们使用正态分布的误差模型, 可以使用信息矩阵来进行优化。信息矩阵是一个矩阵, 它包含了观测误差的方差和协方差信息。使用信息矩阵, 我们可以构建一个 R-最优设计, 即使得信息矩阵的逆矩阵的主对角线元素的乘积最小的设计。这样就可以提高拟合的精度和稳定性。设计  $\xi^*$  称为是 R-最优的, 如果存在设计  $\xi^*$  使得信息矩阵  $M(\xi, \Sigma)$  的逆矩阵的主对角线元素的乘积最小, 即

$$\prod (M^{-1}(\xi^*, \Sigma))_{ii} = \min \prod (M^{-1}(\xi, \Sigma))_{ii},$$

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

计算多响应混料模型(4-1)的信息矩阵, 首先定义  $\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ , 则

$$\begin{aligned} M(\xi, \Sigma) &= \sum_{i=1}^q r_1 \phi(x_i) \Sigma^{-1} \phi^T(x_i) + \sum_{j=1}^{q(q-1)/2} r_2 \phi(x_j) \Sigma^{-1} \phi^T(x_j) \\ &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{33} & A_{34} \\ 0 & 0 & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

其中,

$$A_{11} = [ar_1 + \frac{a}{4}r_2(q-2)]I_q + \frac{a}{4}J_q,$$

$A_{12}$  是由  $X_{q-1}, X_{q-2}, \dots, X_1$  组成的分块矩阵,

$$A_{12} = \frac{a}{8}(X_{q-1} \quad X_{q-2} \quad \dots \quad X_1),$$

$$X_n^T = (0_{n \times (q-n-1)} \quad 1_n^T \quad I_n), (n=1, 2, \dots, q-2)$$

$$X_{q-1}^T = (1_{q-1}^T \quad I_{q-1}), A_{21} = A_{12}^T, A_{22} = \frac{a}{16}J_{\frac{q(q-1)}{2}},$$

$$A_{33} = [br_1 + \frac{b}{4}r_2(q-2)]I_q + \frac{b}{4}J_q, A_{34} = [\frac{b}{8}r_2(q-2)]I_q + \frac{b}{8}J_q,$$

$$A_{43} = A_{34}^T, A_{44} = [\frac{b}{16}r_2(q-2)]I_q + \frac{b}{16}T_q.$$

$0_{n \times (q-n-1)}$  是  $n \times (q-n-1)$  阶矩阵, 且每个元素都为 0;

$J_q$  为  $q \times q$  阶矩阵, 且矩阵中的每个元素都为 1;

$I_q$  为  $q \times q$  阶单位矩阵;  $1_n^T$  为  $q$  维列向量, 且每个元素都为 1.

根据 Frobenius 公式可知信息矩阵  $M(\xi, \Sigma)$  的逆矩阵为:

$$M^{-1}(\xi, \Sigma) = \begin{pmatrix} M_0^{-1} & 0 \\ 0 & N_0^{-1} \end{pmatrix},$$

其中

$$M_0 = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, N_0 = \begin{pmatrix} A_{33} & A_{34} \\ A_{43} & A_{44} \end{pmatrix},$$

$$M_0^{-1} = \begin{pmatrix} A^{*(-1)} & -A^{*(-1)}A_{12}A_{22}^{-1} \\ -A_{22}^{-1}A_{21}A^{*(-1)} & A_{22}^{-1}A_{21}A^{*(-1)}A_{12}A_{22}^{-1} + A_{22}^{-1} \end{pmatrix},$$

$$A_{22}^{-1} = \frac{16}{ar_2}I_{\frac{q(q+1)}{2}}, A^{*(-1)} = A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21} = ar_1I_q,$$

$$-A_{22}^{-1}A_{21}A^{*(-1)} = [-A_{22}^{-1}A_{21}A^{*(-1)}]^T,$$

$$A_{22}^{-1}A_{21}A^{*(-1)}A_{12}A_{22}^{-1} + A_{22}^{-1} = [\frac{16}{ar_2} + \frac{4}{ar_1}]I_{\frac{q(q-1)}{2}} + \frac{4}{ar_1}J_{\frac{q(q-1)}{2}}.$$

$$N_0^{-1} = \begin{pmatrix} B^{*(-1)} & -B^{*(-1)}A_{34}A_{44}^{-1} \\ -A_{44}^{-1}A_{43}B^{*(-1)} & A_{44}^{-1}A_{43}B^{*(-1)}A_{34}A_{44}^{-1} + A_{44}^{-1} \end{pmatrix},$$

$$A_{44}^{-1} = \frac{8(2q-3)}{(q-1)(q-2)br_2}I_q - \frac{4}{br_2}(J_q - I_q),$$

$$B^{*(-1)} = A_{33} - A_{34}A_{44}^{-1}A_{43} = \frac{1}{br_1}I_q, -A_{44}^{-1}A_{43}B^{*(-1)} = -\frac{2}{br_1}I_q,$$

$$-A_{44}^{-1}A_{43}B^{*(-1)} = [-A_{44}^{-1}A_{43}B^{*(-1)}]^T,$$

$$A_{44}^{-1}A_{43}B^{*(-1)}A_{34}A_{44}^{-1} + A_{44}^{-1} = (\frac{8(2q-3)}{(q-1)(q-2)br_2} + \frac{4}{br_1})I_q - \frac{4}{br_2}(J_q - I_q).$$

则可得:

$$\prod_{i=1}^{q^2+q} (M^{-1}(\xi, \Sigma))_{ii} = \frac{1}{ab-c^2} (ab)^q (ab)^{\frac{q(q-1)}{2}} \cdot 8^{q(q-1)} \cdot \frac{1}{r_1} \cdot \left(2 \frac{r_1}{r_2} + 1\right)^{q(q-1)},$$

由 R-最优准则定义可得如下约束极小值问题:

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

这里,  $S = \frac{1}{ab-c^2} (ab)^q (ab)^{\frac{q(q-1)}{2}}$ .

利用拉格朗日乘子法, 令

$$H(r_1, r_2, \lambda) = S \cdot 8^{q(q-1)} \cdot \frac{1}{r_1} \cdot \left(2 \frac{r_1}{r_2} + 1\right)^{q(q-1)} + \lambda [qr_1 + \frac{q(q-1)}{2} r_2 - 1],$$

对参数  $r_1, r_2, \lambda$  求偏导, 得

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

由  $\frac{\partial H}{\partial r_1} = 0, \frac{\partial H}{\partial r_2} = 0, \frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0$ , 可计算得结果:

$$\begin{cases} r_1 \rightarrow \frac{1+6q-\sqrt{1-20q+20q^2}}{2(2q+q^2)} \\ r_2 \rightarrow -\frac{2(-1+\frac{q(1+6q-\sqrt{1-20q+20q^2})}{2(2q+q^2)})}{q(q-1)} \end{cases}$$

**定理 4.1** 对于多响应 Scheffé 二阶混料模型, 测度设计

$$\xi^* = \left\{ r_1^* = \frac{1+6q-\sqrt{1-20q+20q^2}}{2(2q+q^2)}, r_2^* = -\frac{2(-1+\frac{q(1+6q-\sqrt{1-20q+20q^2})}{2(2q+q^2)})}{q(q-1)} \right\}$$

是 R-最优设计。

**证明** 一个设计是 R-最优设计的充分必要条件是，该设计的信息矩阵行列式等于该设计自由度的常数乘以单位矩阵的行列式。对于多响应 Scheffé 二阶混料模型，该设计是最优设计的充分必要条件是，该设计的信息矩阵行列式是所有可能设计中最大的。换句话说，该设计是最优的，当且仅当其信息矩阵的行列式大于或等于其他可能设计的信息矩阵的行列式。按照设计  $\xi^*$  是 R-最优设计的同等条件，针对多响应 Scheffé 二阶混料模型，要给出  $\xi^*$  是最优设计，当且仅当下式成立。

$$\sum_{i=1}^{q^2+q} \frac{(e_i^T M^{-1}(\xi^*, \Sigma)x)^2}{e_i^T M^{-1}(\xi^*, \Sigma)e_i} \leq q(q+1)$$

对于多响应 Scheffé 二阶混料模型，所考虑的试验计划  $\xi^* \in S^{q-1}$  的支撑点同样限定在顶点和二顶点，根据设计点的对称性，不妨取  $(x_1, x_2, \dots, x_q)^T = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0\right)$ ，则有

$$\begin{aligned} f_1^T(x) &= (x_1, x_2, \dots, x_q, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{q-1}x_q) \\ &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0, \frac{1}{4}, 0, \dots, 0\right) \end{aligned}$$

$$x = \begin{pmatrix} f_1^T(x) & 0 \\ 0 & f_2^T(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0, \frac{1}{4}, 0, \dots, 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0, \frac{1}{4}, 0, \dots, 0 \end{pmatrix}$$

从而得，

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{q(q+1)} e_i^T M^{-1}(\xi, \Sigma)e_i &= \sum_{i=1}^{q^2+q} (M^{-1}(\xi, \Sigma))_{ii} \\ &= \frac{qb}{r_1} + \frac{q(q-1)}{2} \frac{1}{r_1} \left( \frac{4b(4r_1+r_2)}{r_2} + 4b \right) + \frac{qa}{r_1} + \frac{q(q-1)}{2} \frac{1}{r_1} \left( \frac{4a(4r_1+r_2)}{r_2} + 4a \right) \\ &= \frac{a+b}{ab-c^2} \left[ 4q(q-1) \left( \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_1} \right) + \frac{q}{r_1} \right] \end{aligned} \tag{4-3}$$

$$\sum_{i=1}^{q(q+1)} e_i^T M^{-1}(\xi^*, \Sigma)x = \frac{a+b}{ab-c^2} \left[ q(q-1) \left( \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_1} \right) + \frac{q}{2r_1} \right] \tag{4-4}$$

其中， $e_i^T = \begin{pmatrix} 0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0 & 0 \\ 0 & 0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0 \end{pmatrix}$  为  $2 \times q(q+1)$  阶矩阵。并令

$$G(x) = \frac{(e_i^T M^{-1}(\xi^*, \Sigma)x)^2}{e_i^T M^{-1}(\xi^*, \Sigma)e_i} - q(q+1),$$

将(4-3)和(4-4),  $r_1$  和  $r_2$  代入  $G(x)$ , 借助 Mathematica 软件得到  $G(x) \leq 0$ , 当且仅当  $r_1 = r_2$  时等号成立。

特别地, 对于多响应 Scheffé 二阶三分量混料模型,  $G(x) = -\frac{298}{37}$ 。

因此, 定理 1 证毕。

### 4.3 Scheffé 一阶和二阶构成的多响应混料模型的 R-最优设计

**定理 4.2** 存在唯一的  $r_2^* \in (0, \frac{2}{q(q-1)})$ ,  $r_1^* = \frac{1}{q} - \frac{q-1}{2}r_2^* \in (0, \frac{1}{q})$ , 对于模型(4-2), 当  $r_2^*$  和  $r_1^*$  分别表示计划  $\xi^*$  分配到  $q$  个顶点  $x \leftrightarrow (1, 1, \dots, 0)$  和  $\frac{q(q-1)}{2}$  个二顶点的中心点  $x \leftrightarrow (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, 0)$  的测度时, 计划  $\xi^*$  是  $S_{q-1}$  上的 R-最优设计。

**证明** 计算多响应混料模型(4-2)的信息矩阵, 首先定义  $\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ , 则

$$\begin{aligned} M(\xi, \Sigma) &= \sum_{i=1}^q r_1 \phi(x_i) \Sigma^{-1} \phi^T(x_i) + \sum_{j=1}^{q(q-1)/2} r_2 \phi(x_j) \Sigma^{-1} \phi^T(x_j) \\ &= r_1 \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes I_q & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{q-1}{4} r_2 \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes I_q & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{r_2}{4} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes U & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V^T \\ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes V^T & \frac{1}{4} b I_{\binom{q}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes (r_1 + \frac{q-1}{4} r_2) I_q + \frac{r_2}{4} U & \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V^T \\ \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes V^T & \frac{1}{16} b r_2 I_{\binom{q}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

这里,  $V = \sum_{i,j=1,i < j}^q E_{ij} (e_i + e_j)^T$ ,  $e_i$  表示  $q$  维列向量, 第  $i$  行元素为 1, 剩余行元素都为 0。

$E_{ij}$  为  $\begin{pmatrix} 2 \\ q \end{pmatrix}$  维标准单位向量,  $U = 1_{q \times 1} 1_{1 \times q}^T - I_q$ 。

为了计算信息矩阵的逆  $M^{-1}(\xi, \Sigma)$ ，定义  $M(\xi, \Sigma) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ ，通过计算得到

$$\begin{aligned} BD^{-1}C &= \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V^T \cdot \frac{16}{br_2} I_{\binom{q}{2}} \cdot \frac{r_2}{8} (c \ b) \otimes V \\ &= \frac{r_2}{4b} \left( \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V^T \right) ((c \ b) \otimes V) \\ &= \frac{r_2}{4b} \left( \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} (c \ b) \right) (V^T V) \\ &= \frac{r_2}{4} \begin{pmatrix} \frac{c^2}{b} & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes ((q-1)I_q + U), \end{aligned}$$

则有

$$\begin{aligned} G &= A - BD^{-1}C = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \left( (r_1 + \frac{q-1}{4}r_2)I_q + \frac{r_2}{4}U \right) - \frac{r_2}{4} \begin{pmatrix} \frac{c^2}{b} & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes ((q-1)I_q + U) \\ &= \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes (r_1 + \frac{q-1}{4}r_2)I_q - \begin{pmatrix} \frac{c^2}{b} & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \frac{(q-1)r_2}{4}I_q + \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \frac{r_2}{4}U - \begin{pmatrix} \frac{c^2}{b} & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \frac{r_2}{4}U \\ &= \begin{pmatrix} W & cr_1I_q \\ cr_1I_q & br_1I_q \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$W = (ar_1 + \frac{(q-1)r_2}{4}(a - \frac{c^2}{b}))I_q + \frac{r_2}{4}(a - \frac{c^2}{b})U.$$

$$Q = G - \frac{c^2 r_1}{b} I_q,$$

$$M^{-1}(\xi, \Sigma) = \begin{pmatrix} G^{-1} & -G^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}CK^{-1} & D^{-1} + D^{-1}CK^{-1}BD^{-1} \end{pmatrix},$$

$$\text{这里 } G^{-1} = \begin{pmatrix} Q^{-1} & -\frac{c}{b}Q^{-1} \\ -\frac{c}{b}Q^{-1} & \frac{1}{br_1}I_q + \frac{c^2}{b^2}Q^{-1} \end{pmatrix},$$

$$\text{其中, } Q^{-1} = \frac{1}{(r_1 + \frac{r_2}{4}(q-2))(a - \frac{c^2}{b})} \left( (1 - \frac{qr_2}{4})I_q - \frac{qr_2}{4}U \right),$$

因此，信息矩阵的逆为



$$M^{-1}(\xi, \Sigma) = \begin{pmatrix} G^{-1} & -\frac{2}{b}G^{-1} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V^T \\ -\frac{2}{b} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes VK^{-1} & \frac{16}{br^2 I_{\binom{q}{2}} + \frac{4}{b^2} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes VK^{-1} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V^T} \end{pmatrix},$$

$$\prod(M^{-1}(\xi^*, \Sigma))_{ii} = \left[ \frac{1}{(r_1 + \frac{r_2}{4}(q-2)(a - \frac{c^2}{b}))} (1 - \frac{q}{4}r_2) \right]^q \cdot \left[ \frac{1}{br_1} + \frac{c^2}{ab - c^2} \cdot \frac{1 - \frac{q}{4}r_2}{r_1 + \frac{r_2}{4}(q-2)} \right]^q \cdot \left( \frac{16}{br_2} + \frac{8}{br_1} \right)^{\frac{q(q-1)}{2}}$$

因为  $q \cdot r_1 + \frac{q(q-1)}{2}r_2 = 1, r_1 \geq 0, r_2 \geq 0$ , 则有

$$\prod(M^{-1}(\xi^*, \Sigma))_{ii} = \left[ \frac{c^2}{ab - c^2} \cdot \frac{1}{\frac{1}{q} + (\frac{3}{4}q - 1)r_2} (1 - \frac{q}{4}r_2) \right]^q \cdot \left[ \frac{1}{b(\frac{1}{q} - \frac{q-1}{2}r_2)} + \frac{c^2}{ab - c^2} \cdot \frac{1}{\frac{1}{q} + (\frac{3}{4}q - 1)r_2} (1 - \frac{q}{4}r_2) \right]^q \cdot \left( \frac{16}{br_2} + \frac{8}{b(\frac{1}{q} - \frac{q-1}{2}r_2)} \right)^{\frac{q(q-1)}{2}}$$

$$\stackrel{def}{=} f(a, d, c, q, r_2)$$

借助 Mathematica 软件验证对于  $\forall r_2 \in (0, \frac{1}{\binom{q}{2}})$ , 都有  $\frac{d^2}{dr_2^2} f(a, b, c, q, r_2) > 0$ , 即

$f(a, d, c, q, r_2)$  为  $(0, \frac{1}{\binom{q}{2}})$  上的凸函数, 并且, 当  $r_2 \rightarrow 0$  或  $r_2 \rightarrow \frac{1}{\binom{q}{2}}$  时有

$f(a, d, c, q, r_2) \rightarrow \infty$ , 因此, 存在唯一的  $r_2^*$  和  $r_1^* = \frac{1}{q} - \frac{q-1}{2}r_2^*$  使得  $\prod(M^{-1}(\xi^*, \Sigma))_{ii}$  取得最

小值。定理证毕。

## 5 结论与展望

### 5.1 主要结论

这篇文章讨论了混料试验的最优设计问题，分为两个部分。一是讨论了 Scheffé 二阶模型和二阶 K 模型的 V-最优设计问题，二是讨论了多响应模型的 R-最优设计问题。主要有：

(1) 首先引入了文章的选题背景和研究意义，着重介绍了文章所研究内容的国内外研究现状。并介绍了文章后续所用的重要理论知识，包括混料问题的界定及设计方法，混料最优设计的原理、混料试验设计的效率。最后介绍了多响应混料试验设计研究过程中所运用的乘积设计。

(2) 对于 Scheffé 二阶和 K 模型的 V-最优设计问题，首先借助中心多项式模型的信息矩阵及 V-最优准则，计算得到二阶中心多项式模型的 V-最优观测频数的一般表达式，然后利用 V-最优设计的等价性定理证明了三分量二阶中心多项式模型的 V-最优测度满足等价性定理。同时为了满足实际问题中不同问题所需模型不同，讨论了 K 模型的 V-最优设计，并证明了二分量二阶 K 模型的 V-最优测度满足等价性定理。最后，对二者的 V-最优设计进行了效率对比分析，发现二者在设计效率上的优势相当。

(3) 对于多响应模型的 R-最优设计问题，首先讨论了由 Scheffé 二阶构成的多响应模型的 R-最优设计，结合软件 Mathematica 计算得到该多响应模型的 R-最优配置，并利用等价性定理证明了所得的结果就是 R-最优设计。最后进一步讨论了由 Scheffé 一阶和二阶构成的多响应模型的 R-最优设计，借助乘积设计及 R-最优设计的等价性定理证明了其最优配置就是 R-最优设计。

### 5.2 研究不足和有待进一步探讨的问题

在本文的基础上，对于混料试验的最优设计研究还可以进一步探讨：

(1) 由于研究条件的限制，难以获取实际的试验数据，所以本文仅作了混料试验最优设计的理论论证。因此后续条件允许可以做实证数据分析，从实证的角度进行最优设计验证。

(2) 由于计算的复杂性，论文未推导分析两类多响应模型的 R-最优设计效率，这也是论文的不足之处。因此后续可借助 Matlab 软件的矩阵运算，进行多响应模型的最优

设计效率的比较分析。

(3) 不管是单响应还是多响应混料试验设计, 单一准则下的最优设计在有些实际问题中并不适用, 因此也可以讨论混合最优准则下的相关最优设计问题。

(4) 除了本文研究的多响应模型, 还可以研究由其他混料模型构成的多响应模型的R-最优设计, 如Scheffé一阶和二阶可加模型构成的多响应模型。

## 参考文献

- [1] Kiefer, J. and Wolfowitz, J. The equivalence of two extremum problems[J]. *Canad. J. Math*, 1960, 12: 363-366.
- [2] Atwood C L. Optimal and efficient designs of experiment[J]. *Ann Math Statist*, 1969, 40(5):1570-1602.
- [3] Siley S D. Optimal design[M]. London: Chapman and Hall, 1980, 9-27.
- [4] Scheffé H. Experiments with mixture[J]. *Journal of Royal Statistical Society*, 1958, 20B:334-360.
- [5] Scheffé H. The simplex-centroid design for experiments with mixture[J]. *journal of Royal Statistical Society*, 1963, 25B:235-263.
- [6] D. P. Lambrakis. Experiments with p-Component Mixtures[J]. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B(Methodological)*, 1968, 30(1):137-144.
- [7] Laake P. On the Optimal Allocation of Observations in Experiments with Mixtures[J]. *Scandinavian Journal of Statistics*, 1975, 2(3):153-157.
- [8] Liu S Z, Heinz N. A V-optimal design for Scheffé polynomial model[J]. *Statistics and Probability Letters*, 1995, 23(3):253-258.
- [9] Liu S Z, Heinz N. Experiments with mixtures: Optimal allocations for becker's models[J]. *Metrika*, 1997, 45(1):53-66.
- [10] 刘双喆. 关于广义单纯形中心设计的 I-最优性 [J]. *烟台大学学报*, 1992, 4(2):21-22.
- [11] 关颖男, 张崇岐. 二阶可加混料模型参数估计的  $I_\lambda$ -最优设计[J]. *应用数学学报*, 1994(02):161-172.
- [12] Legesse K D, Linda M H. V-and D-optimal population designs for the simple linear regression model with a random intercept term[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2008, 38: 1116-1130.
- [13] Goos P, Syafitri U. V-optimal mixture designs for the qth degree model[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2014, 136: 173-178.
- [14] Jones B, Goos P. I-optimal versus D-optimal split-plot response surface designs[J]. *Journal of Quality Technology*, 2012, 44: 85-101.

- [15] Wiens D P, Li P F. V-optimal designs for heteroscedastic regression[J]. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2014, 145: 125-138.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] 李俊鹏, 吴惠彬, 胡小玲, 张崇岐. 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.
- [22] 晋珊. Logistic 回归模型的 R-最优设计[D]. 上海:上海师范大学, 2018.
- [23] 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.
- [24] Liu X, Yue R X. Elfving’s theorem for R-optimality of experimental designs[J]. *Metrika*, 2020,83:485-498.
- [25] 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.
- [26] Hao H H, Zhu X Y, Zhang X F, et al. R-optimal design of the second-order scheffé mixture model[J]. *Statistics & Probability Letters*, 2021, 173(10): 109069.
- [27] 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.
- [28] 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.
- [29] Draper N R, Pukelsheim F. Mixture models bases on homogenous polynomials[J].

- Journal of Statistical Planning and Inference, 1998, 71: 303-311.
- [30] Mandal N K, Pal M. Optimum designs for optimum mixtures in multiresponse experiments[J]. Communications in Statistics, Simulation and Computation, 2013, 42(5): 1104-1112.
- [31] Pal M, Mandal N K. Optimum designs for optimum mixtures[J]. Statistics & Probability Letters, 2006, 76(13): 1369-1379.
- [32] 龚政, 朱小渊, 张崇岐. 含过程变量的 K 模型最优正交区组设计[J]. 高校应用数学学报 A 辑, 2021, 36(02): 161-168.
- [33] 张小峰. 随机变系数混料试验模型的 V-最优设计[D]. 广州大学, 2016.
- [34] Draper, N.R. and Hunter, W.G. Design of experiments for parameter estimation in multiresponse situations[J]. Biometrika, 1966, 53(3-4): 525-665.
- [35] Fedorov V V. Theory of optimal experiments[M]. Academic Press, 1972.
- [36] Roy, S.N., Gnanadesikan, R. and Srivastava, J.N. Analysis and design of certain quantitative multiresponse experiments[M]. New York: Pergamon Press, 1971, 15(1): 196-197.
- [37] M.C. Wijesinha, A.I. Khuri. Construction of optimal design to increase the power of the multiresponse lack of fit test[J]. Journal of Statistical Planning and Inference, 1987, 16: 179-192.
- [38] F.C. Chang, M.N. LO HUANG, K.J. Dennis, H.C. Yanga. Optimal designs for dual response polynomial regression models[J]. Journal of Statistical Planning and Inference, 2001, 93(1-2): 309-322.
- [39] Jin H D, Yue R X. D - and A - optimal designs for mixture experiments with multiresponse models[J]. Journal of Shanghai Normal University (Natural Sciences), 2008, 37(2): 124-130.
- [40] 顾原. 多响应线性模型的复合最优设计[D]. 上海师范大学, 2010.
- [41] 乐锐. 多响应混料模型及其最优设计[D]. 广州大学, 2013.
- [42] Karen A. F. Copeland. Experiments: planning, analysis, and parameter Design Optimization[J]. Journal of Quality Technology, 2002, 34(1): 134-136.
- [43] 关颖男. 混料试验设计[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1990.

## 攻读硕士学位期间所发表的论文

- [1] 马景文,张崇岐.  $q$  分量二阶混料中心多项式模型 V-最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版), 2022,21(04):80-86.

## 致谢

写到这里，我的论文也算基本完成了。叁载寒暑，开始于疫情爆发后的秋天，结束于疫情全面放开的春天。相信这三年所有的遇见、经历都将会是未来生活的宝贵财富，感恩！

坐在电脑前，看着即将画上句号的论文，思及至此，三年时光往事仿佛又浮现在眼前。开学时期站在报到处的茫然与紧张，陌生的情愫冲击着大脑，而到现在能与同伴谈笑自若的看着一批又一批如同当初我们一般的人进入学校，感慨万千！在这个与众不同的研究生生涯里，虽然疫情打扰了我们许多的安排，带来了些许遗憾，但是正因如此让我们看到了学校，老师对我们的爱护之心。感谢学校给予我们守护，感谢老师给予我们帮助，让我顺利完成这三年的学业。

我要感谢我的导师张崇岐教授，从第一次“双选会”上我俩的结缘，师生情谊就此开始，科研路上，您带我入门，教我知识，一次又一次传道授业解惑，让我快速成长。生活中，你教我为人处世，鼓励我，疫情期间尤为感恩，学术论文的巨大压力加上封闭管理的烦躁不安，感谢您多次利用自己时间为我指导，宽心于我。学位论文的选题以及框架结构，您付出了很多时间与精力带我理解，让我能够不迷茫，多次的修改，促使着我不断前进。定稿前，微信里多次的信息轰炸，您都耐心解答，都能想象到您紧缩又无奈的表情。对您的感恩，无以言表，希望您生活中永远开朗开心，事业上不断创造属于您的成功，祝愿您一切平安顺遂，事事顺意！我将永远记得您的谆谆教诲，啰嗦但又不厌其烦的人生趣事和您人生路上的经验。

我要感谢我的父母和家人，他们给了我坚实的支持和帮助。他们在我学习和成长的道路上始终陪伴着我，不管是物质上还是精神上，都给予了我最大的支持和鼓励。无论何时，他们都在我需要他们的时候伸出援手，帮助我克服难关，让我可以专注于学业，追求自己的梦想。他们是我生命中最重要的人，他们的爱让我坚强自信，愿我可以自己的努力和付出回报他们。

我要感谢兰州财经大学统计学院的各位领导和老师们，他们渊博的知识和严谨的态度对我的学习和研究起到了巨大的帮助。在课堂上，他们教授我们统计学的基础知识，引领我们深入探究统计学的核心领域。同时，他们还邀请了许多专家来为我们讲授更深入、更实用的知识，使我不断地成长和进步。在此，我要真诚地感谢他们一直以来的辛勤付出。



人来人往，何其幸运，在兰州与你们相遇，一杯放哈奶茶、一碗牛肉面、一条母亲河、一座中山桥，一群好友，便是三年。感谢舍友三年陪伴，谢谢你们的鼓励让我成为了更好的自己，谢谢你们的陪伴让求学之路充满色彩。感谢我的同门师兄、师姐，谢谢你们每一次耐心的解答。

最后，我要感谢兰州财经大学在疫情期间采取的一系列措施来保护我们的健康和安全。感谢身处一线的老师，他们不辞辛劳地为我们提供各种帮助，让我们可以安心学习和生活。我由衷地感激他们的辛勤付出，让我们度过了这段不寻常的时期。