应用概率统计　第二十四卷
第四期　2008年8月

Chinese Journal of Applied Probability
and Statistics Vol.24 No.4 Aug. 2008

多重混料系统及其最优设计

孙 学 波

(辽宁科技大学, 鞍山, 114044)

摘 要

本文主要讨论了多重混料系统上Scheffé模型的最优设计问题. 在本文中, 提出并证明了一个基于单纯形和正定二次型的不等式, 并应用这个不等式解决了多重混料系统上多项式模型的D-最优和A-最优设计的结构问题, 找到了一个构造最优设计的新方法.

关键词: Scheffé模型, D-最优设计, A-最优设计, 单纯形, 多重混料系统.

学科分类号: O212.6.

§1. 引　　言

最优试验设计是近几十年发展起来的一门新学科. 上世纪五十年代末期, Scheffé提出了单纯形上Scheffé多项式模型, 并给出了相应的单纯形格子设计[1]. Kifer和Wolfowitz等人将离散化的试验设计的概念推广到连续设计, 提出了一系列最优设计准则(如D-最优、A-最优和I_λ-最优等最优设计准则), 并证明了著名的最优设计等价定理[2], 为最优设计理论的建立和发展奠定了基础.

Cornell (1986)[3], Crosier (1986)[4], Chen (1988)[5]等人又相继给出了某些特殊模型的最优设计配置.

在混料试验中, 当某些分量之间不存在"交互作用"时, 其模型将出现相应的"塌落"[1]现象, 由此引出了多重混料系统上的最优设计问题.

关颖男(2000)[6]提出了q分量n阶塌落多重线性多项式模型, 并给出了这个模型在某些特殊情况下的D-最优设计配置.

本文对多重混料系统上的Scheffé模型, 给出并证明了一个不等式, 利用这个不等式, 解决了多重混料系统上Scheffé模型的D-最优设计和A-最优设计的结构问题. 找到了一个在多重混料系统上构造最优设计的新方法.

§2.　基本概念和基本术语

设y是随机变量, u是可控制向量变量, $Q^T=(Q_1,Q_2,Q_3,\cdots,Q_k)$是待估参数向量, τ是未知参数, 线性模型的一般形式为

$$\mathsf{E}(y|u,Q,\tau)=\sum_{i=1}^{k}Q_if_i(u)=f^T(u)Q, \tag{2.1}$$

本文2005年9月7日收到, 2007年4月5日收到修改稿.

其中, E表示数学期望, $f_i(u)$表示u的函数, $f^T(u)=(f_1(u),f_2(u),\cdots,f_k(u))$.

对模型(2.1), 若使用变换$\chi_i=f_i(u)$, $i=1,2,\cdots,k$, 并令$\boldsymbol{\chi}=\{\chi^T=(\chi_1,\chi_2,\cdots,\chi_k)|\chi_i=f_i(u);\ i=1,2,\cdots,k;u\in\mu\}$, 则模型(2.1)变化为如下模型

$$\mathsf{E}(y|\chi,Q,\tau)=\sum_{i=1}^{k}Q_i\chi_i=\chi^TQ, \tag{2.2}$$

其中$\chi^T=(\chi_1,\chi_2,\cdots,\chi_k)$, μ为设计空间, $\boldsymbol{\chi}$为导出空间.

设ε是定义在μ或$\boldsymbol{\chi}$上的概率测度, 对于模型(2.1), 称矩阵

$$M(\varepsilon)=\int_{u\in\mu}f(u)f^T(u)\varepsilon(u)\mathrm{d}u \tag{2.3}$$

为设计ε关于模型(2.1)的信息矩阵.

在试验设计理论中, 人们定义了多种最优设计准则, 及这些优设计准则的判别方法[2].

试验设计中, 对于模型(2.1), 使信息矩阵$M(\varepsilon)$的逆的行列式值最小的试验设计称为模型(2.1)的D-最优设计, 即满足下式的试验设计ε^*称为模型(2.1)的D-最优设计:

$$\det(M^{-1}(\varepsilon^*))=\min_{\varepsilon\in\mu}\det(M^{-1}(\varepsilon)). \tag{2.4}$$

对于模型(2.1), 设计ε是D-最优设计的充分必要条件是: 对任意的$u\in\mu$,

$$d(u)=f^T(u)M^{-1}(\varepsilon)f(u)\leq k, \tag{2.5}$$

其中, k是矩阵$M^{-1}(\varepsilon)$的阶数.

对于模型(2.1), 使信息矩阵$M(\varepsilon)$的逆的迹值最小的试验设计称为模型(2.1)的A-最优设计, 即满足下式的试验设计ε^*称为A-最优设计:

$$\mathrm{tr}(M^{-1}(\varepsilon^*))=\min_{\varepsilon\in\mu}\mathrm{tr}(M^{-1}(\varepsilon)). \tag{2.6}$$

对于模型(2.1), 设计ε是模型(2.1)的A-最优设计的充分必要条件是: 对任意的$u\in\mu$,

$$d(u)=f^T(u)M^{-1}(\varepsilon)M^{-1}(\varepsilon)f(u)\leq \mathrm{tr}M^{-1}(\varepsilon), \tag{2.7}$$

其中, $\mathrm{tr}(M_{-1}(\varepsilon))$是矩阵$M^{-1}(\varepsilon)$的迹.

定义在$q-1$维正规单纯形S_{q-1}上的试验称为混料回归试验, 对应的试验设计称为混料试验设计[1], 其中

$$S_{q-1}=\Big\{x|x=(x_1,x_2,\cdots,x_q),\sum_{i=0}^{k}x_i=1,x_i\geq0,i=1,2,\cdots,k\Big\}. \tag{2.8}$$

在混料试验中, 若某些分量之间不存在任何形式的交互作用, 而只起一种“稀释”作用[2], 则可按变量之间的这种关系对变量进行分类, 使得同类变量之间存在交互作用, 而不同类之间的变量则不存在交互作用, 此时称S_{q-1}为多重混料系统. 而多重混料系统上的多项式模型可相应地表示成多个多项式模型的和的形式.

定义 2.1 多重混料系统是指这样一个单纯形S_{q-1}. 其分量被划分为m个类, 用带双下标的变量x_{ij}表示, i表示变量x_{ij}所处的类, j表示变量x_{ij}在第i类变量中的位置, $i=1,2,\cdots,m$; $j=1,2,\cdots,q_i$且$q=\sum\limits_{i=1}^{m}q_i$; 再记$X_i^T=(x_{i1},x_{i1},\cdots,x_{iq_i})$, 则单纯形$S_{q-1}$可重新表示成如下形式单纯形:

$$\begin{aligned}S_{q-1} &= \Big\{X|X^T=(X_1^T,X_2^T,\cdots,X_m^T),\text{其中 } X_i^T=\{x_{i1},x_{i1},\cdots,x_{iq_i}\}, i=1,2,\cdots,m;\\ &\quad \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{q_i}x_{ij}=1, x_{ij}\geq 0, i=1,2,\cdots,m, j=1,2,\cdots,q_i\Big\}.\end{aligned} \tag{2.9}$$

亦可记为$S_{\sum\limits_{i=1}^{m}q_i-1}$, 其中$m$为其重数, 把其中第$i$类分量构成的单纯形记为$S_{q_i-1}$, 称为它的第$i$个子系统.

设$\eta_i=f_i^T(X_i)\beta_i$是定义在S_{q_i-1}上的线性模型, 则称(2.10)式为多重混料系统上的线性回归模型.

$$\eta=\sum_{i=1}^{m}\eta_i=\sum_{i=1}^{m}f_i^T(X_i)\beta_i. \tag{2.10}$$

定义 2.2 设S_{q-1}为多重混料系统, 其重数为m, S_{q_i-1}为其第i个子系统, 对任意的$X_i\in S_{q_i-1}$, 令$X_{(i)}^T=(0_1^T,\cdots,0_{i-1}^T,X_i^T,0_{i+1}^T,\cdots,0_m^T)\in S_{q-1}$, 其中, 0_j为q_j阶零向量$(j=1,2,\cdots,i-1,i+1,\cdots,m)$. 称$X_{(i)}$为$X_i$在$S_{q-1}$中的映像.

定义 2.3 设S_{q-1}为一多重混料系统, 其重数为m, ε_i是其子系统S_{q_i-1}上的一个连续设计, 它在点$X_i\in S_{q_i-1}$的测度为$\varepsilon_i(X_i)$. 则称满足如下两个条件的S_{q-1}上连续设计ε为设计$\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m$的直和, 记为

$$\varepsilon=\bigoplus_{i=1}^{m}p_i\varepsilon_i. \tag{2.11}$$

(1) $p_1,p_2,\cdots,p_m$为一组非负实数, 满足$\sum\limits_{i=1}^{m}p_i=1$;

(2) ε在点$X_i\in S_{q_i}-1$的映像点$X_{(i)}$的测度$\varepsilon_i(X_{(i)})=p_i\varepsilon_i(X_i)$, 而在其它非映像点的测度为0.

§3. 本文主要工作

定义 3.1 设向量$X^T=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$, $Y^T=(y_1,y_2,\cdots,y_m)$, 若向量Y的元素构成的有序序列是向量X的元素构成的有序序列的子序列, 则称向量Y是向量X的子向量.

定义 3.2 设向量$X^T=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$, 则称具有如下形式的向量为向量X的正则向量.

$$\begin{aligned}\overline{X}^T &= (x_1,x_2,\cdots,x_n,x_1x_2,x_1x_3,\cdots,x_{n-1}x_n,\\ &\quad x_1x_2x_3,x_1x_2x_4,x_1x_2x_5,\cdots,x_{n-2}x_{n-1}x_n,\cdots,x_1x_2x_3\cdots x_n).\end{aligned} \tag{3.1}$$

例如: 向量(x_1,x_2,x_3)的正则向量为$(x_1,x_2,x_3,x_1x_2,x_1x_3,x_2x_3,x_1x_2x_3)$.

定义 3.3 设S_{q-1}是一个混料系统, 模型$\eta=f^T(X)\beta$是S_{q-1}上的多项式模型, 其中$f^T(X)$是一关于X的多项式构成的k阶向量, β是k阶待估参数向量. 若$f(X)$是向量X的正则向量, 则称$\eta=f^T(X)\beta$为定义在S_{q-1}上的q阶Scheffé模型[2]. 若$f(X)$是向量X的正则向量的子向量, 则称$\eta=f^T(X)\beta$为定义在S_{q-1}上塌落的Scheffé模型[6].

本文不严格区分上述两种模型, 而将它们通称为Scheffé模型.

定义 3.4 设S_{q_i-1}是多重混料系统S_{q-1}的子系统. 若$\eta_i=f_i^T(X_i)\beta_i$是S_{q_i-1}上的Scheffé模型, 则$\eta=\sum\limits_{i=1}^m\eta_i$称为定义在多重混料系统$S_{q-1}$上的Scheffé模型.

显然, 多重混料系统上的Scheffé模型是一个特殊的Scheffé模型, 即塌落的Scheffé模型.

定理 3.1 S_{q-1}是一个重数为m的多重混料系统. S_{q_i-1}为其第i个子系统, 设$M_i(\varepsilon_i)$是S_{q_i-1}上设计ε_i关于模型$\eta_i=f_i^T(X_i)\beta_i$的信息矩阵, 其中$i=1,2,\cdots,m$.

若设计ε为$\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m$的直和, 且$M(\varepsilon)$是设计$\varepsilon$关于模型$\eta=\sum\limits_{i=1}^m\eta_i$的信息矩阵, 则

$$M(\varepsilon)=\begin{bmatrix} p_1M_1(\varepsilon_i) & & & \\ & p_2M_2(\varepsilon_i) & & \\ & & \ddots & \\ & & & p_mM_m(\varepsilon_i)\end{bmatrix}, \tag{3.2}$$

其中$p_1,p_2,\cdots,p_m$是一组非负实数, 满足$\sum\limits_{i=1}^m p_i=1$.

证明: 由信息矩阵定义(2.3), 知S_{q_i-1}上试验设计ε_i关于模型$\eta_i=f_i^T(X_i)\beta_i$的信息矩阵为

$$M_i(\varepsilon_i)=\int_{X_i\in S_{q_i-1}}f_i(X_i)f_i^T(X_i)\varepsilon_i(X_i)\mathrm{d}X_i;\qquad \text{其中 } i=1,2,3,\cdots,m.$$

对于任意$X\in S_{q-1}$, S_{q-1}是重数为m的多重混料系统, 由多重混料系统定义(定义2.1), 知X可以表示成$X^T=(X_1^T,X_2^T,\cdots,X_m^T)$的形式. 其中$X_i^T=(x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{iq_i})$; $i=1,2,\cdots,m$. 所以,

$$\begin{aligned} M(\varepsilon) &= \int_{X\in S_{q-1}}f(X)f^T(X)\varepsilon(X)\mathrm{d}X \\ &= \int_{X\in S_{q-1}}\begin{bmatrix} f_1(X_1)\\ f_2(X_2)\\ \vdots \\ f_m(X_m)\end{bmatrix}\begin{bmatrix} f_1^T(X_1) & f_2^T(X_2) & \cdots & f_m^T(X_m)\end{bmatrix}\varepsilon(X)\mathrm{d}X.\end{aligned}$$

对$X\in S_{q-1}$, 当X是子系统S_{q_i-1}中某个点的映像时, X的各个分量中, 分量$X_i\in S_{q_i-1}$, 而其余分量$X_j=0\ (j\neq i)$. 此时, $\varepsilon(X)=p_i\varepsilon_i(X_i)$. 否则, 当$X$不是$S_{q-1}$任何子系统中点的

映像时, 由试验设计直和定义(定义2.3)知, $\varepsilon(X)=0$. 所以,

$$
\begin{aligned}
M(\varepsilon) &= \int_{X\in S_{q-1}}\begin{bmatrix} f_1(X_1)f_1^T(X_1) & f_1(X_1)f_2^T(X_2) & \cdots & f_1(X_1)f_m^T(X_m) \\ f_2(X_2)f_1^T(X_1) & f_2(X_2)f_2^T(X_2) & \cdots & f_2(X_2)f_m^T(X_m) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_m(X_m)f_1^T(X_1) & f_m(X_m)f_2^T(X_2) & \cdots & f_m(X_m)f_m^T(X_m) \end{bmatrix}\varepsilon(X)\mathrm{d}X \\
&= \sum_{i=1}^m \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ & 0 & & & \\ & & p_i\displaystyle\int_{X_i\in S_{q-1}} f_i(X_i)f_i^T(X_i)\varepsilon_i(X_i)\mathrm{d}X_i & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} p_1M_1(\varepsilon_1) & & & \\ & p_2M_2(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & p_mM_m(\varepsilon_m) \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

定理得证. □

定理 3.2 设X_1,X_2是两个向量, 其中$X_1^T=(x_{11},x_{12},\cdots,x_{1q_1})$, $X_2^T=(x_{21},x_{22},\cdots,x_{2q_2})$. 若向量$f_1(X_1),f_2(X_2)$分别是向量$X_1$, X_2的正则向量或正则向量的子向量, 它们的阶数分别为k_1和k_2. M_1和M_2是两个阶数分别为k_1和k_2的实正定矩阵. 则下述两个命题等价.

(1) 对于$i=1,2$; 若$\begin{cases}\sum\limits_{j=1}^{q_i} x_{ij}=1; \\ x_{ij}\geq 0;\ j=1,2,\cdots,q_i,\end{cases}$ 则$f_i^T(X_i)M_if_i(X_i)\leq 1$.

(2) 若$\begin{cases}\sum\limits_{i=1}^{2}\sum\limits_{j=1}^{q_i} x_{ij}=1; \\ x_{ij}\geq 0;\ i=1,2;\ j=1,2,\cdots,q_i,\end{cases}$ 则$\sum\limits_{i=1}^{2} f_i^T(X_i)M_if_i(X_i)\leq 1$.

证明: 为方便定理证明, 定义如下公式. 对任意向量X_1,X_2, 记向量$U=\begin{bmatrix}X_1\\X_2\end{bmatrix}$, 再记

$$D(U)=\sum_{i=1}^{2} f_i^T(X_i)M_if_i(X_i). \tag{3.3}$$

首先, 设命题(1)成立, 现证明命题(2)亦成立. 假设命题(2)中的条件成立, 即

$$\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{q_i} x_{ij}=1,\quad x_{ij}\geq 0,\quad i=1,2,\quad j=1,2,\cdots,q_i. \tag{3.4}$$

若命题(2)中的两个向量X_1和X_2中有一个向量是零向量, 如$X_2=0$, 则由(3.4)可得X_1满足$\sum\limits_{j=1}^{q_1}x_{1j}=1$, $x_{1j}\geq 0$, 即命题(1)中的条件. 所以有$f_1^T(X_1)M_1f_1(X_1)\leq 1$成立, 且$f_2(X_2)=0$. 所以, $D(U)=\sum\limits_{i=1}^{2}f_i^T(X_i)M_if_i(X_i)=f_1^T(X_1)M_1f_1(X_1)\leq 1$, 即命题(2)成立.

若X_1,X_2两个向量均不是零向量, 令$U_0=\begin{bmatrix}X_1\\X_2\end{bmatrix}$, 此时$X_1,X_2$中均有非零分量. 不妨再设$x_{1i},x_{2j}$分别为$X_1,X_2$的两个非零分量, 且$x_{1i}+x_{2j}=R$. 显然$0<R\leq 1$, 即$x_{1i},x_{2j}$满足下列条件:

$$\begin{cases}x_{1i}+x_{2j}=R\ \ (R>0),\\ x_{1i}>0 \text{ 且 } x_{2j}>0.\end{cases} \tag{3.5}$$

由正则向量的定义3.2知此时向量$f_1(X_1),f_2(X_2)$的各个分量均可以分别表示成x_{1i}和x_{2j}的一元一次多项式的形式.

又由于M_1, M_2是两个实正定矩阵, 所以, $D(U_0)$可以表示成下列形式:

$$\begin{aligned}D(U_0)&=\sum_{i=1}^{2}f_i^T(X_i)M_if_i(X_i)\\&=f_1^T(X_1)M_1f_1^T(X_1)+f_2^T(X_2)M_2f_2(X_2)\\&=\sum_{s=1}^{k_1}(a_{s1}x_{1i}+b_{s1})^2+\sum_{s=1}^{k_2}(a_{s2}x_{2j}+b_{s2})^2\\&=A_1x_{1i}^2+B_1x_{1i}+C_1+A_2x_{2j}^2+B_2x_{2j}+C_2,\end{aligned} \tag{3.6}$$

其中, $a_{s1},b_{s1},a_{s2},b_{s2},A_1,B_1,C_1,A_2,B_2,C_2$均为与$x_{1i}$和$x_{2j}$无关的常量, 且

$$A_1=\sum_{s=1}^{k_1}a_{s1}^2\geq 0,\qquad A_2=\sum_{s=1}^{k_2}a_{s2}^2\geq 0.$$

再由条件(3.5), 将$x_{2j}=R-x_{1i}$代入(3.6), 可得

$$D(U_0)=A_1x_{1i}^2+B_1x_{1i}+C_1+A_2(R-x_{1i})^2+B_2(R-x_{1i})+C_2,$$

其中$0<x_{1i}<R$.

令$F(x_{1i})=A_1x_{1i}^2+B_1x_{1i}+C_1+A_2(R-x_{1i})^2+B_2(R-x_{1i})+C_2$, 显然

$$F''(x_{1i})=\frac{\partial^2D(U_0)}{\partial x_{1i}^2}=2(A_1+A_2)\geq 0.$$

所以, $F(x_{1i})$是关于x_{1i}在区间$[0,R]$上的非凹函数, 所以有$F(x_{1i})\leq\max(F(0),F(R))$.

若$F(0)>F(R)$, 则令

$$U_1^T=(x_{11},\cdots,x_{1i-1},0,x_{1i+1},\cdots,x_{1s_1},x_{21},\cdots,x_{2j-1},R,x_{2j+1},\cdots,x_{2s_2}),$$

否则令

$$U_1^T=(x_{11},\cdots,x_{1i-1},R,x_{1i+1},\cdots,x_{1s_1},x_{21},\cdots,x_{2j-1},0,x_{2j+1},\cdots,x_{2s_2}).$$

此时, 在上述两种情况下均有$D(U_1)=\max(F(0),F(R))$, 所以$D(U_0)\le D(U_1)$.

显然, U_1仍然满足命题(2)条件约束, 且其中零分量个数比U_0的零分量个数恰好多一个. 若U_1的两个向量X_1, X_2中有一个向量等于0, 则定理得证.

否则, 重复上述过程可得一系列向量$U_0,U_1,U_2,\cdots,U_n,\cdots$, 使得下列不等式成立.

$$D(U_0)\le D(U_1)\le D(U_2)\le\cdots\le D(U_n)\le\cdots,$$

其中每一个U_i均满足命题(2)条件约束, 且U_{i+1}中零分量个数比U_i的零分量个数恰好多一个. 此时, 不妨令

$$U_i=\begin{bmatrix}X_1^{(i)}\\ X_2^{(i)}\end{bmatrix}.$$

由于U_0的分量个数有限, 所以, 必存在一个正整数N, 使得构成U_N的两个向量$X_1^{(N)}$和$X_2^{(N)}$中恰好有一个向量的所有分量均等于0. 即有$D(U_N)\le1$. 所以有

$$D(U_0)\le D(U_1)\le D(U_2)\le\cdots\le D(U_N)\le1.$$

又由U_0的任意性, 所以命题(2)成立.

反之, 若命题(2)成立, 则命题(1)显然成立. □

由定理3.2, 显然可以推出如下推论.

推论 3.1 设$X_1,X_2,\cdots,X_m$是一组向量, 其中$X_i^T=(x_{i1},x_{i1},\cdots,x_{iq_i})$, $f_i(X_i)$是X_i的正则向量的k_i阶子向量, M_i是k_i阶实正定矩阵, $i=1,2,\cdots,m$. 则下述两个命题等价.

(1) 若$\begin{cases}\sum\limits_{j=1}^{q_i}x_{ij}=1;\\ x_{ij}\ge0;\ j=1,2,\cdots,q_i,\end{cases}$ 则$f_i^T(X_i)M_if_i(X_i)\le1$, 对于$i=1,2,\cdots,m$均成立.

(2) 若$\begin{cases}\sum\limits_{i=1}^{m}\sum\limits_{j=1}^{q_i}x_{ij}=1,\\ x_{ij}\ge0;\ i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,q_i,\end{cases}$ 则$\sum\limits_{i=1}^{m}f_i^T(X_i)M_if_i(X_i)\le1$成立.

定理 3.3 设$\eta=\sum\limits_{i=1}^{m}\eta_i$是定义在重数为$m$的多重混料系统$S_{q-1}$上的Scheffé模型. 其中, $\eta_i=f_i^T(X_i)\beta_i$是S_{q-1}的子系统S_{q_i-1}上的Scheffé模型. 若设计ε_i是模型$\eta_i=f_i^T(X_i)\beta_i$的D-最优设计$(i=1,2,\cdots,m)$, 则

$$\varepsilon=\frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{m}k_j}\bigoplus_{i=1}^{m}k_i\varepsilon_i \tag{3.7}$$

是S_{q-1}上Scheffé模型$\eta=\sum\limits_{i=1}^{m}\eta_i$的$D$-最优设计, 其中$k_i$是向量$f_i(X_i)$的阶数$(i=1,2,\cdots,m)$.

证明: 设ε_i是S_{q_i-1}上$\eta_i = f_i^T(X_i)\beta_i$的$D$-最优设计$(i=1,2,\cdots,m)$, 则由$D$-最优设计的充分必要条件(2.5), 知$d_i(X_i) = f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i) \le k_i$. 所以

$$\frac{d_i(X_i)}{k_i} = \frac{1}{k_i} f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i) \le 1, \tag{3.8}$$

其中, $X_i \in S_{q_i-1}$; $i=1,2,\cdots,m$. 由(3.7)式和定理3.1, 可知

$$M(\varepsilon) = \frac{1}{\sum\limits_{j=1}^m k_j}\begin{bmatrix} k_1M_1(\varepsilon_1) & & & \\ & k_2M_2(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & k_mM_m(\varepsilon_m)\end{bmatrix}.$$

所以,

$$M^{-1}(\varepsilon) = \left(\sum_{j=1}^m k_j\right)\begin{bmatrix} \frac{1}{k_1}M_1^{-1}(\varepsilon_1) & & & \\ & \frac{1}{k_2}M_2^{-1}(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{k_m}M_m^{-1}(\varepsilon_m)\end{bmatrix}.$$

所以,

$$\begin{aligned} d(X) &= f^T(X)M^{-1}(\varepsilon)f(X) \\ &= \begin{bmatrix} f_1^T(X_1) & f_2^T(X_2) & \cdots & f_m^T(X_m)\end{bmatrix}\left(\sum_{j=1}^m k_j\right) \\ &\quad\cdot\begin{bmatrix} \frac{1}{k_1}M_1^{-1}(\varepsilon_1) & & & \\ & \frac{1}{k_2}M_2^{-1}(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{k_m}M_m^{-1}(\varepsilon_m)\end{bmatrix}\begin{bmatrix} f_1(X_1) \\ f_2(X_2) \\ \vdots \\ f_m(X_m)\end{bmatrix} \\ &= \left(\sum_{j=1}^m k_j\right)\sum_{i=1}^m \frac{1}{k_i} f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i). \end{aligned}$$

所以,

$$\frac{d(X)}{\sum\limits_{j=1}^m k_j} = \sum_{i=1}^m \frac{1}{k_i} f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i). \tag{3.9}$$

由最优设计理论[2], 知$M_i(\varepsilon_i)$是正定矩阵. 所以, $(1/k_i)\cdot M_i^{-1}(\varepsilon_i)$也是正定矩阵$(i=1,2,\cdots,m)$.

所以, 综合(3.8), (3.9)和推论3.1, 可得

$$d(X) \le \sum_{i=1}^{m} k_i = k. \tag{3.10}$$

所以由D-最优设计的充分必要条件(2.5), 得

$$\varepsilon = \frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{m} k_j} \bigoplus_{i=1}^{m} k_i \varepsilon_i$$

是S_{q-1}上Scheffé模型$\eta = \sum\limits_{i=1}^{m} \eta_i$的$D$-最优设计. □

定理 3.4 设$\eta = \sum\limits_{i=1}^{m} \eta_i$是定义在一个重数为$m$的多重混料系统$S_{q-1}$上的Scheffé模型. 其中, $\eta_i = f_i^T(X_i)\beta_i$是$S_{q-1}$的子系统$S_{q_i-1}$上的Scheffé模型. 若设计$\varepsilon_i$是模型$\eta_i = f_i^T(X_i)\beta_i$的$A$-最优设计$(i = 1, 2, \cdots, m)$, 则

$$\varepsilon = \frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{m} [\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}} \bigoplus_{i=1}^{m} [\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))]^{1/2} \varepsilon_i \tag{3.11}$$

是S_{q-1}上Scheffé模型$\eta = \sum\limits_{i=1}^{m} \eta_i$的$A$-最优设计, 其中$\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))$是矩阵$M_i^{-1}(\varepsilon_i)$的迹$(i = 1, 2, \cdots, m)$.

证明: 设ε_i是S_{q_i-1}上$\eta_i = f_i^T(X_i)\beta_i$的$A$-最优设计$(i = 1, 2, \cdots, m)$, 则由$A$-最优设计的充分必要条件(2.7), 知

$$f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i) \le \mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i)).$$

所以

$$\frac{1}{\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))} f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i) \le 1, \tag{3.12}$$

其中, $X_i \in S_{q_i-1}$; $i = 1, 2, \cdots, m$. 由(3.11)和定理3.1, 知

$$M(\varepsilon) = \begin{bmatrix} \frac{[\mathrm{tr}(M_1^{-1}(\varepsilon_1))]^{1/2}}{\left(\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)} M_1(\varepsilon_1) & & & \\ & \frac{[\mathrm{tr}(M_2^{-1}(\varepsilon_2))]^{1/2}}{\left(\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)} M_2(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{[\mathrm{tr}(M_m^{-1}(\varepsilon_m))]^{1/2}}{\left(\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)} M_m(\varepsilon_m) \end{bmatrix}. \tag{3.13}$$

所以,

$$M^{-1}(\varepsilon)=\begin{bmatrix}\frac{\left(\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)}{[\mathrm{tr}(M_1^{-1}(\varepsilon_1))]^{1/2}}M_1^{-1}(\varepsilon_1) & & & \\ & \frac{\left(\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)}{[\mathrm{tr}(M_2^{-1}(\varepsilon_2))]^{1/2}}M_2^{-1}(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{\left(\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)}{[\mathrm{tr}(M_m^{-1}(\varepsilon_m))]^{1/2}}M_m^{-1}(\varepsilon_m)\end{bmatrix}.$$

所以, 可得

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(M^{-1}(\varepsilon)) &= \left(\sum_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))}{[\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))]^{1/2}}\right)\\ &= \left(\sum_{i=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))]^{1/2}\right)^2. \end{aligned}\tag{3.14}$$

由A-最优设计的充分必要条件(2.7), 只要证明$f^T(X)M^{-1}(\varepsilon)M^{-1}(\varepsilon)f(X)\le \mathrm{tr}(M^{-1}(\varepsilon))$即可. 而

$$\begin{aligned}d(X) &= f^T(X)M^{-1}(\varepsilon)M^{-1}(\varepsilon)f(X)\\ &= \begin{bmatrix} f_1^T(X_1) & f_2^T(X_2) & \cdots & f_m^T(X_m)\end{bmatrix}\\ &\cdot\begin{bmatrix}\frac{\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}}{[\mathrm{tr}(M_1^{-1}(\varepsilon_1))]^{1/2}}M_1^{-1}(\varepsilon_1) & & & \\ & \frac{\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}}{[\mathrm{tr}(M_2^{-1}(\varepsilon_2))]^{1/2}}M_2^{-1}(\varepsilon_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}}{[\mathrm{tr}(M_m^{-1}(\varepsilon_m))]^{1/2}}M_m^{-1}(\varepsilon_m)\end{bmatrix}^2\begin{bmatrix}f_1(X_1)\\ f_2(X_2)\\ \vdots \\ f_m(X_m)\end{bmatrix}\\ &= \left(\sum_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)^2\sum_{i=1}^{m}\frac{f_i^T(X_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)M_i^{-1}(\varepsilon_i)f_i(X_i)}{\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))}. \end{aligned}\tag{3.15}$$

所以, 综合(3.12), (3.15)和$M_i(\varepsilon_i)$是正定矩阵等因素, 由推论3.1, 可得

$$f^T(X)M^{-1}(\varepsilon)M^{-1}(\varepsilon)f(X)\le\left(\sum_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}\right)^2=\mathrm{tr}(M^{-1}(\varepsilon)).$$

所以由等价定理, 得

$$\varepsilon=\frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_j^{-1}(\varepsilon_j))]^{1/2}}\bigoplus_{i=1}^{m}[\mathrm{tr}(M_i^{-1}(\varepsilon_i))]^{1/2}\varepsilon_i$$

是S_{q-1}上Scheffé模型$\eta=\sum\limits_{i=1}^{m}\eta_i$的$A$-最优设计. □

§4. 问题与展望

利用本文给出的不等式, 不仅可以解决多重混料系统上的Scheffé模型的D-最优和A-最优设计问题, 亦可用于解决其他一些最优准则的最优设计问题, 甚至是其他一些模型的最优设计问题. 另外, 本文遗留的主要问题是, 应用本文提出的方法构造出来的最优设计是否具有唯一性.

参 考 文 献

[1] Cornell, *Experiments with Mixture Designs*, John Wiley, New York, 1981.

[2] Silvey, S.D., *Optimal Design*, Chapman and Hall, New York, 1980.

[3] Cornell, J.A., A comparison between two ten point designs for studding three components mixture system, *Journal of Quality Technology*,**18(1)**(1986), 1–15.

[4] Crosier, B., The geometry of constrained mixture experiment, *Techno. Metrics*, **28(2)**(1986), 95–102.

[5] Chen, L.-Y., Optimal Designs for a Linear Log Contrast Model for Experiment with Mixture, *Journal of Statistical Planning an Inference*, **20**(1988), 105–113.

[6] 关颖男, 佟毅, 塌落的单纯型–中心设计及其D-最优性, 工程数学学报, **17(3)**(2000), 36–42.

Multi-Mixture System and Its Optimal Experimental Design

Sun Xuebo

(*Liaoning University of Technology, Anshan, 114044*)

In this paper, we discuss some issues of D-optimal and A-optimal design for Scheffé model on multiple mixture system. An important inequality based on positive definite quadratic form is also given. Employing the inequality, the structures of optimal designs for Scheffé model defined on multiple mixture system are made explicit.

Keywords: Scheffé model, D-optimal design, A-optimal design, simplex form, multiple mixture system.

AMS Subject Classification: 62K05.