

二响应 Scheffé 混料模型的 I-最优设计

姬 钰¹, 张崇岐^{2†}, 田丰智¹

1. 西安建筑科技大学理学院, 陕西 西安 710055;

2. 广州大学经济与统计学院, 广东 广州 510006

收稿日期: 2025-06-10 † 通信联系人 E-mail: cqzhang@gzhu.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金(12561046)

第一作者: 姬 钰, 女, 硕士生, 现从事试验设计研究。E-mail: 1362716330@qq.com

摘 要: 研究了 Scheffé 一阶和二阶混料模型的二响应模型 I-最优设计问题, 推导出模型平均预测方差的最小迹, 并给出了特定分量数下模型的 I-最优设计。研究结果表明, 该二响应混料模型的 I-最优设计与响应的协方差矩阵无关。

关 键 词: 混料试验; 多响应; Scheffé 模型; I-最优设计

中图分类号: O212.6

文献标志码: A

文章编号: 1671-8836(2026)04-0592-07

I-Optimal Design of the Two-Response Scheffé Mixture Model

JI Yu¹, ZHANG Chongqi^{2†}, TIAN Fengzhi¹

1. School of Science, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, Shaannxi, China;

2. School of Economics and Statistics, Guangzhou University, Guangzhou 510006, Guangdong, China

Abstract: This study investigates the I-optimal design problem for two-response Scheffé canonical first-order and second-order mixture models. We derive the minimum trace of the average prediction variance matrix and provide the I-optimal designs for models with specific numbers of components. The results demonstrate that the I-optimal design for these two-response Scheffé mixture models is independent of the response covariance matrix.

Key words: mixture experiments; multi-response; Scheffé model; I-optimal design

0 引 言

混料试验设计^[1]是研究多种成分比例对响应变量影响的一类重要试验设计方法, 已广泛应用于制药工业、农业科学、化学工程和食品加工等领域。Scheffé^[2]首先提出单纯形格子设计方法, 随后研究者对单响应混料模型在各种定义下的最优性进行讨论研究。随着时代的发展, 人们发现多响应模型更加符合实际需求, 例如, 在优化金黄纳米凝胶贴膏基质处方的混料试验设计中^[3], 需确保其初黏力、内聚力与黏接力符合国家药典规定, 这要求构建包含三个响应的混料回归模型进行处方筛选; 而姜黄疗癣乳膏的处方优化^[4]则涉及多个响应变量的混料模型分析。乐锐^[5]研究了 Scheffé 一阶和二阶模型构成的多响应混料模型的 D-最优设计, Pal 等^[6]对由混料线性模型和二阶混料规范多项式模型构成的二响应混料模型进行研究。金红娣等^[7]得出一些多响应模型的定理, 研究了 D-和 A-最优设计。郝红花等^[8]构造了 p 响应 Scheffé 二阶混料模型的 D-最优设计, 并给出二响应 Scheffé 二阶模型的 Ds-和 A-最优测度。张新风等^[9]进一步探讨了二响应 Scheffé 混料模型的 R-最优设计。朱小渊等^[10-11]给出多响应和缺失项混料模型的最优试验设计。

引用格式: 姬钰, 张崇岐, 田丰智. 二响应 Scheffé 混料模型的 I-最优设计[J]. 武汉大学学报(理学版), 2026, 72(4): 592-598. DOI: 10.14188/j.1671-8836.2025.0138.

JI Yu, ZHANG Chongqi, TIAN Fengzhi. I-Optimal Design of the Two-Response Scheffé Mixture Model [J]. J. Wuhan Univ. (Nat. Sci. Ed.), 2026, 72(4): 592-598. DOI: 10.14188/j.1671-8836.2025.0138(Ch).

I-最优设计旨在寻找使预测值方差函数的平均值(Average Prediction Variance, APV)最小化的设计。这个概念由 Box 等^[12]提出,其后 Goos 等^[13]对相关研究成果进行了总结与比较分析。叶婉颖等^[14]对三种常见混料模型在含有定性因子的情况下求解近似 I-最优的配置,马景文^[15]讨论 V-最优设计,该设计与 I-最优设计有相似之处。A-最优设计是 I-最优设计的一种特殊形式,李俊鹏等^[16-18]对混料试验的加权效率最优设计,二阶指数模型的 A-最优设计进行系统研究。

Scheffé 一阶和二阶模型构成多响应模型的 I-最优设计研究具有重要的理论意义,但由于两类模型设计点个数的差异,增加了研究的复杂性,相关研究较为匮乏。本文探讨二响应 Scheffé 一阶和二阶混料模型的 I-最优设计,给出了在部分分量下满足 I-最优设计的设计。

1 模型与准则

给定试验区域内的一组不重复的点 $x_1, x_2, \dots, x_n$, 并对应相应的一组数 $r_1, r_2, \dots, r_n$, 如果满足: $\sum_{i=1}^n r_i = 1, 0 \leq r_i \leq 1$, 则称其为一个连续试验设计, 记作 $\xi, \xi = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix}$ 。其中, x_i 称为柱点, 也称为支撑点或试验点; r_i 称为该点的测度, 这也是一类特殊的概率测度分布; 记 Ξ 表示试验域 S^{q-1} 上的全体设计, 即 $\xi \in \Xi$ 。试验点所对应的信息矩阵: $M(\xi) = \int_{S^{q-1}} f(x) f^T(x) \xi(dx)$ 。

在正规单纯形中, 单纯形-格子设计通过均匀分布的格子点实现了饱和设计, 其数学模型可表示为混料规范多项式。

q 分量一阶混料规范多项式模型为:

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (1)$$

q 分量二阶混料规范多项式模型为:

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

其中, β_i, β_{ij} 表示多项式模型的参数, β_i 为分量 i 的效应参数, β_{ij} 为分量 i 与 j 的交互效应参数。考虑模型:

$$Y(x) = \begin{pmatrix} Y_1(x) \\ Y_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1^T(x) & 0 \\ 0 & f_2^T(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1(x) \\ \varepsilon_2(x) \end{pmatrix} \quad (3)$$

其中, $\varepsilon_1(x), \varepsilon_2(x)$ 为对应点的试验误差; $f_1^T(x) = (x_1, x_2, \dots, x_q), f_2^T(x) = (x_1, x_2, \dots, x_q, x_1 x_2, x_1 x_3, \dots, x_{q-1} x_q)$; $\beta_1 = (\beta_{11}, \dots, \beta_{1q}, \beta_{112}, \beta_{113}, \dots, \beta_{1,q-1,q})^T, \beta_2 = (\beta_{21}, \dots, \beta_{2q}, \beta_{211}, \beta_{222}, \dots, \beta_{2,q,q})^T$; $\text{Var}(\varepsilon_1(x), \varepsilon_2^T(x)) = \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \mu\sigma_1\sigma_2 \\ \mu\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$ 。 Σ 是模型的协方差矩阵; σ_1, σ_2 为 $Y_1(x), Y_2(x)$ 的方差; μ 表示相关系数。

I-最优是指在整体利益区域 S^{q-1} 上, 平均预测方差

$$\text{APV} = \frac{\int_{S^{q-1}} f^T(x) M^{-1}(\xi) f(x) dx}{\int_{S^{q-1}} dx} = \frac{\text{tr}[M^{-1}(\xi)B]}{\int_{S^{q-1}} dx} \quad (4)$$

达到最小, 即: $\text{tr}[M^{-1}(\xi)B] \rightarrow \inf_{\xi \in \Xi}, B$ 称为矩阵^[10]。

引理 1 (I-最优等价定理) 令 $M(\xi)$ 表示设计 $\xi \in \Xi$ 的信息矩阵, 对任意的 $x \in S^{q-1}$, 设计 ξ^* 是 I-最优的充要条件是:

$$f^T(x) M^{-1}(\xi^*) B M^{-1}(\xi^*) f(x) \leq \text{tr}[M^{-1}(\xi^*)B] \quad (5)$$

其中, 矩阵 B 表示如下:

$$B = \int_{S^{q-1}} f(x) f^T(x) dx \quad (6)$$

2 二响应模型的 I-最优设计

定理 1 二响应模型(3)的 I-最优设计

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

的最小迹为:

$$\text{tr}[M^{-1}(\xi^*)B] = \frac{2q[8r_1^* + (3q-5)r_2^*]}{[4r_1^* + (q-2)r_2^*][2r_1^* + (q-1)r_2^*](q+1)!} + \frac{32q(q-1)r_1^* + 2q(q^2-7q+18)r_2^*}{(q+3)!r_1^*r_2^*}$$

证 设协方差矩阵的逆矩阵为:

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^2\sigma_2^2 - \mu\sigma_1\sigma_2} & -\frac{\mu\sigma_1\sigma_2}{\sigma_1^2\sigma_2^2 - \mu\sigma_1\sigma_2} \\ -\frac{\mu\sigma_1\sigma_2}{\sigma_1^2\sigma_2^2 - \mu\sigma_1\sigma_2} & \frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2\sigma_2^2 - \mu\sigma_1\sigma_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$$

由 Scheffé 一阶模型(1)和二阶模型(2), 可得模型(3)的信息矩阵:

$$M(\xi^*, \Sigma) = \sum_{i=1}^q r_1 f(x_i) \Sigma^{-1} f^T(x_i) + \sum_{j=1}^{\frac{q(q-1)}{2}} r_2 f(x_i) \Sigma^{-1} f^T(x_i) = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \left[\left(r_1 + \frac{q-2}{4} r_2 \right) I_q + \frac{r_2}{4} U_q \right] & \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V_{C_q^2 \times q}^T \\ \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes V_{C_q^2 \times q} & \frac{1}{16} b r_2 I_{C_q^2} \end{pmatrix}$$

其中, V 是 0-1 矩阵, 第一行前 2 个元素为 1, 其余元素为 0; 剩余每一行都根据第一行按照字典顺序进行全排列得到。 $U_q = J_q - I_q$, J 表示全 1 矩阵, I 表示单位矩阵。令:

$$\begin{aligned} Q &= \left[ar_1 + \frac{(q-2)r_2}{4} \left(a - \frac{c^2}{b} \right) \right] I_q + \frac{r_2}{4} \left(a - \frac{c^2}{b} \right) U_q \\ L &= Q - \frac{c^2 r_1}{b} I_q, K = \begin{pmatrix} Q & cr_1 I_q \\ cr_1 I_q & br_1 I_q \end{pmatrix}, \\ L^{-1} &= \frac{\left(1 - \frac{qr_2}{4} \right) I_q - \frac{qr_2}{4} U_q}{\left[r_1 + \frac{r_2}{4} (q-2) \right] \left(a - \frac{c^2}{b} \right)}, K^{-1} = \begin{pmatrix} L^{-1} & -\frac{c}{b} L^{-1} \\ -\frac{c}{b} L^{-1} & \frac{1}{br_1} I_q + \frac{c^2}{b^2} L^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

可以求出信息矩阵的逆矩阵:

$$M^{-1}(\xi^*, \Sigma) = \begin{pmatrix} K^{-1} & -\frac{2}{b} K^{-1} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V_{C_q^2 \times q}^T \\ -\frac{2}{b} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes V_{C_q^2 \times q} K^{-1} & \frac{16}{br_2} I_{C_q^2} + \frac{4}{b^2} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes V_{C_q^2 \times q} K^{-1} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes V_{C_q^2 \times q}^T \end{pmatrix}$$

推广到多响模型, 矩阵 B 为:

$$B = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{(q+1)!} (I_q + J_q) & \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{(q+2)!} (J_{C_q^2 \times q}^T + V_{C_q^2 \times q}^T) \\ \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{(q+2)!} (J_{C_q^2 \times q} + V_{C_q^2 \times q}) & b \otimes \frac{1}{(q+3)!} (I_{C_q^2} + J_{C_q^2} + V_{C_q^2 \times q} V_{C_q^2 \times q}^T) \end{pmatrix}$$

令 $M^{-1}B = D$, 即: $M^{-1}B = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix}^{\circ}$

分块矩阵 $D_{11} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} \\ E_{21} & E_{22} \end{pmatrix}$ 。其中, $E_{11} = \frac{[4r_1 + (q-3)r_2]J_q + [4r_1 + (2q-2)r_2]I_q}{(q+1)! \left[4r_1^2 + (3q-4)r_1r_2 + \frac{q^2-3q+2}{2}r_2^2 \right]}$, $E_{12} = O_q$, O 表示全 0 矩阵;

$$E_{21} = -\frac{c}{b} \cdot \frac{\left\{ [8(q-2)+16]r_1^2 + (25q-78)r_1r_2 + (2 \times 3^{q-3})r_1^2 \right\} J_q + [8(q-2)r_1^2 + 5(q-2)^2r_1r_2 - 6r_2^2]I_q}{\left[4r_1^2 + (3q-4)r_1r_2 + \frac{q^2-3q+2}{2}r_2^2 \right] (q+2)!r_1}$$

$$E_{22} = \frac{1}{(q+2)!r_1} [(6-q)I_q + (2-q)J_q]。$$

分块矩阵 $D_{12} = \begin{pmatrix} O_{C_q^1 \times C_q^2} \\ G \end{pmatrix}$ 。其中, $G = \frac{1-q}{(q+3)!r_1} J_{C_q^1 \times C_q^2}^T + \frac{5-q}{(q+3)!r_1} V_{C_q^1 \times C_q^2}^T$ 。

分块矩阵 $D_{21} = (P \ R)$ 。其中, $R = \frac{[16r_1 + (4q-8)r_2]J_{C_q^2 \times C_q^1} + [16r_1 + (2q-12)r_2]V_{C_q^2 \times C_q^1}}{(q+2)!r_1r_2}$,

$$P = \frac{c}{b} R。$$

分块矩阵 $D_{22} = \frac{1}{(q+3)!r_1r_2} \left\{ 16r_1I_{C_q^2} + [16r_1 + 4(q-1)r_2]J_{C_q^2} + [16r_1 + 2(q-5)r_2]V_{C_q^2 \times q} V_{C_q^2 \times q}^T \right\}。$

综上所述, $\text{tr}[M^{-1}(\xi)B]$ 表示为:

$$\text{tr}[M^{-1}(\xi)B] = \frac{2q[8r_1 + (3q-5)r_2]}{[4r_1 + (q-2)r_2][2r_1 + (q-1)r_2](q+1)!} + \frac{32q(q-1)r_1 + 2q(q^2-7q+18)r_2}{(q+3)!r_1r_2} \quad (7)$$

当 $r_1 = r_1^*, r_2 = r_2^*$ 时, $\text{tr}[M^{-1}(\xi)B]$ 最小, 且与协方差矩阵无关。

推论 1 推广到 n 响应, 对于 Scheffé 一阶和二阶模型交替的多响应混料模型, 令 $T = \text{tr}^*[M^{-1}(\xi)B]$, 可得:

$$1) \text{ 当 } n \text{ 为奇数时, } \text{tr}^{1*}[M^{-1}(\xi)B] = \frac{n-1}{2}T + \frac{[4r_1 + (q-3)r_2]q + [4r_1 + (2q-2)r_2]q}{(q+1)! \left[4r_1^2 + (3q-4)r_1r_2 + \frac{q^2-3q+2}{2}r_2^2 \right]};$$

$$2) \text{ 当 } n \text{ 为偶数时, } \text{tr}^{2*}[M^{-1}(\xi)B] = \frac{n}{2}T。$$

定理 2 存在唯一的 $r_1^* \in (0, \frac{1}{q})$, $r_2^* \in \left(0, \frac{2}{q(q-1)}\right)$, 对于模型(3), 当 r_1^*, r_2^* 分别表示设计 ξ^* 分配到 C_q^1 个

顶点和 C_q^2 个二顶点的测度时, 设计 ξ^* 是 S^{q-1} 上的 I-最优设计。

证 将约束条件转换为: $r_1 = \frac{1}{q} - \frac{q(q-1)}{2}r_2$, 代入 $\text{tr}[M^{-1}(\xi)B]$ 中, 得到:

$$f(r_2) = q \left(\frac{q[q(q+1)r_2 - 8]}{(q^2r_2 - 4)(q+1)!} + \frac{64 + 4q[(7q+5)(q-2)r_2 - 16]}{[q(q-1)r_2 - 2](q+3)!r_2} \right)$$

当 $r_2 \in \left(0, \frac{2}{q(q-1)}\right)$ 时, $\frac{d^2}{dr_2^2} f(r_2) > 0$, 可以得出函数 $f(r_2)$ 是在 $r_2 \in \left(0, \frac{2}{q(q-1)}\right)$ 上的凸函数。且当

$r_2 \rightarrow 0$ 或 $r_2 \rightarrow \frac{2}{q(q-1)}$ 时, $f \rightarrow \infty$ 。因此, 存在唯一的 r_1^*, r_2^* , 使得 $\text{tr}^*[M^{-1}(\xi)B]$ 最小。

3 二响应混料模型的 I-最优设计例子

以 $q=3$ 为例, 构造 Scheffé 一阶和二阶混料模型构成多项式的等边三角形的顶点和二顶点中心上的 I-最优设计。对应的模型为:

$$\begin{cases} y_1 = \beta_{11}x_1 + \beta_{12}x_2 + \beta_{13}x_3 \\ y_2 = \beta_{21}x_1 + \beta_{22}x_2 + \beta_{23}x_3 + \beta_{212}x_1x_2 + \beta_{213}x_1x_3 + \beta_{223}x_2x_3 \end{cases}$$

根据模型求出信息矩阵 M 和矩阵 B :

$$M = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} r_1 + \frac{r_2}{2} & \frac{r_2}{4} & \frac{r_2}{4} \\ \frac{r_2}{4} & r_1 + \frac{r_2}{2} & \frac{r_2}{4} \\ \frac{r_2}{4} & \frac{r_2}{4} & r_1 + \frac{r_2}{2} \end{pmatrix} & \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ \frac{r_2}{8} \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} & \frac{br_2}{16} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{12} & \frac{1}{24} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{12} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{12} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} c & b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{120} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{120} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{120} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} \end{pmatrix} & b \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{180} & \frac{1}{360} & \frac{1}{360} \\ \frac{1}{360} & \frac{1}{180} & \frac{1}{360} \\ \frac{1}{360} & \frac{1}{360} & \frac{1}{180} \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

$$\text{求得迹: } \text{tr}[M^{-1}(\xi)B] = \frac{1}{60} \left[\frac{3}{r_1} + \frac{16}{r_2} + 10 \left(\frac{1}{r_1 + r_2} + \frac{2}{4r_1 + r_2} \right) \right].$$

结合约束条件 $C_1^1 r_1 + C_2^2 r_2 = 1$, 求解测度: $\begin{cases} r_1^* = 0.117\ 674 \\ r_2^* = 0.215\ 660 \end{cases}$, 即最优设计可表示为:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} (1, 0, 0) & (0, 1, 0) & (0, 0, 1) & \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) & \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) & \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ 0.117\ 674 & 0.117\ 674 & 0.117\ 674 & 0.215\ 66 & 0.215\ 66 & 0.215\ 66 \end{pmatrix}$$

下面验证 $q=3$ 时引理 1 成立。

假定 $\mu^2 = 0.5, \sigma_1^2 = 1, \sigma_2^2 = 2$ 时^[9], 根据等价定理: 对于顶点 $x = (1, 0, \dots, 0)$ 和二顶点 $x = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0)$, 有 $f^T(x)M^{-1}(\xi^*)BM^{-1}(\xi^*)f(x) = 2.647\ 078\ 65$; 由于 $\text{tr}[M^{-1}(\xi^*)B] = 2.647\ 08$, 满足 (5) 式, 引理 1 成立。

表 1 展示出部分分量满足约束条件

$$\begin{cases} \arg \min_{\xi \in \Xi} \text{tr}[M^{-1}(\xi)B] \\ \text{s.t. } C_q^1 r_1 + C_q^2 r_2 = 1 \end{cases}$$

所得的数值解。可以看出, 结果不受协方差矩阵的影响。

结合 (4) 和 (7) 式, 计算出单纯形全域 S^{q-1} 的平均预测方差:

$$\text{APV} = \frac{q}{(q-1)!} \left(\frac{2[8r_1 + (3q-5)r_2]}{[4r_1 + (q-2)r_2][2r_1 + (q-1)r_2](q+1)!} + \frac{32(q-1)r_1 + 2(q^2 - 7q + 18)r_2}{(q+3)!r_1r_2} \right)$$

在表 1 计算结果的基础上, 求满足 (4) 式的最小迹与平均预测方差, 结果如表 2 所示。

表1 不同分量时模型的 I-最优设计

Table 1 I-optimal designs of the model with different components

q	r_1^*	n_1	$n_1 r_1^*$	r_2^*	n_2	$n_2 r_2^*$	$n_1 + n_2$
3	0.117 674	3	0.353 022	0.215 660	3	0.646 980	6
4	0.064 604	4	0.258 416	0.123 597	6	0.714 158	10
5	0.044 767	5	0.223 838	0.077 616	10	0.776 161	15
6	0.035 802	6	0.214 813	0.052 346	15	0.785 187	21
7	0.030 674	7	0.214 720	0.037 394	21	0.782 796	28
8	0.027 176	8	0.217 410	0.027 949	28	0.782 590	36
9	0.024 530	9	0.220 771	0.021 645	36	0.779 229	45
10	0.022 409	10	0.224 090	0.017 242	45	0.775 910	55

注: n_1, n_2 表示约束条件中顶点与二顶点中心测度的系数, $n_1 = C_q^1, n_2 = C_q^2$

表2 不同分量时模型的最小迹与 APV

Table 2 The minimum trace and average APV for models with different components

q	最小迹	APV	q	最小迹	APV
3	2.647 08	1.128 31	7	$1.547 95 \times 10^{-2}$	$2.149 3 \times 10^{-5}$
4	1.128 31	0.188 051	8	$2.467 28 \times 10^{-2}$	$4.895 4 \times 10^{-7}$
5	0.344 44	$1.435 1 \times 10^{-2}$	9	$3.374 95 \times 10^{-4}$	$8.370 42 \times 10^{-9}$
6	0.081 21	$6.767 56 \times 10^{-4}$	10	$4.042 18 \times 10^{-5}$	$1.113 92 \times 10^{-10}$

4 结 语

本文针对二响应混料模型的 I-最优设计问题展开深入探讨, 研究由 Scheffé 一阶和二阶模型构成的二响应混料模型的 I-最优设计, 并将其推广到多响应。通过理论推导, 得到满足 I-最优设计的最小迹和平均预测方差 APV 的表达式, 并以 $q=3$ 为例, 求解 I-最优设计的测度, 并给出部分分量的 I-最优设计的数值解。从定理 1 和本文所给的例子可知, 该多响应模型的 I-最优设计有一个显著特征: 它与响应变量的协方差矩阵无关。这一发现与乐锐^[5]在 D-最优设计研究中得出的结论相吻合, 而张新风等^[9]的研究显示, 该模型的 R-最优设计与协方差矩阵有关。未来关于多响应 Scheffé 模型中不同阶数(如一阶、二阶及更高阶)的混料模型, 在各种意义下的最优配置与协方差矩阵的关系问题都将是值得思考和研究的问题。

参考文献:

- [1] 关颖男. 混料试验设计[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1990: 1-389.
GUAN Y N. Mixing experiment design[M]. Shanghai: Shanghai Scientific & Technical Publishers, 1990: 1-389(Ch).
- [2] SCHEFFÉ H. Experiments with mixtures[J]. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, 1958, **20**(2): 344-360. DOI:10.1111/j.2517-6161.1958.tb00299.x.
- [3] 章烨雯, 臧青民, 卢成淑, 等. D-最优混料试验设计优化金黄纳米凝胶贴膏基质处方[J]. 中国中医药信息杂志, 2019, **26**(2): 93-96. DOI:10.3969/j.issn.1005-5304.2019.02.020.
ZHANG Y W, ZANG Q M, LU C S, et al. Optimization of matrix formulation of Jinhuang nano cataplasma by D-optimal mixture design[J]. *Chinese Journal of Information on Traditional Chinese Medicine*, 2019, **26**(2): 93-96. DOI:10.3969/j.issn.1005-5304.2019.02.020(Ch).
- [4] 曲彤, 康希, 郝慧汇, 等. D-最优混料设计制备姜黄疗癣乳膏及其体外透皮特性研究[J]. 中药材, 2020, **43**(6): 1434-1440. DOI:10.13863/j.issn1001-4454.2020.06.029.
QU T, KANG X, HAO H H, et al. Preparation of Jianghuang Liaoxian cream by D-optimal mixture design and *in vitro* transdermal characteristics research[J]. *Journal of Chinese Medicinal Materials*, 2020, **43**(6): 1434-1440. DOI:10.13863/j.issn1001-4454.2020.06.029(Ch).
- [5] 乐锐. 多响应混料模型及其最优设计[D]. 广州: 广州大学, 2013.
LE R. Mixture experiments with multiresponse models and themselves optimal designs[D]. Guangzhou: Guangzhou University,

- 2013(Ch).
- [6] PAL M, MANDAL N K. Optimum designs for parameter estimation in a mixture experiment with two correlated responses[J]. *Communications in Statistics — Simulation and Computation*, 2017, **46**(10): 7698–7709. DOI: 10.1080/03610918.2016.1248575.
- [7] 金红娣, 岳荣先. 多响应混料模型的 D-和 A-最优设计[J]. 上海师范大学学报(自然科学版), 2008, **37**(2): 124–130. DOI: 10.3969/j.issn.1000-5137.2008.02.003.
- 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. DOI: 10.3969/j.issn.1000-5137.2008.02.003(Ch).
- [8] 郝红花, 张崇岐. 多响应 Scheffe 混料模型最优设计[J]. 数学的实践与认识, 2018, **48**(23): 183–188.
- HAO H H, ZHANG C Q. Multiresponse scheffe mixture experiment optimal designs[J]. *Mathematics in Practice and Theory*, 2018, **48**(23): 183–188(Ch).
- [9] 张新风, 郝红花, 李光辉. 多响应混料模型的 R-最优设计[J]. 重庆师范大学学报(自然科学版), 2022, **39**(2): 103–110.
- ZHANG X F, HAO H H, LI G H. R-optimal design of multi-response mixture model[J]. *Journal of Chongqing Normal University (Natural Science)*, 2022, **39**(2): 103–110(Ch).
- [10] 朱小渊. 多响应和缺失项混料模型最优试验设计[D]. 广州: 广州大学, 2021.
- ZHU X Y. Optimal Experimental Design of Mixture Model with Multiple Response and Missing Items Model[D]. Guangzhou: Guangzhou University, 2021(Ch).
- [11] 朱小渊, 郝红花, 张新风, 等. 多响应混料模型最优设计的基础定理[J]. 数理统计与管理, 2023, **42**(4): 637–648. DOI: 10.13860/j.cnki.sltj.20230309-002.
- ZHU X Y, HAO H H, ZHANG X F, *et al.* Basic theorem for optimal design of multiresponse mixture model[J]. *Journal of Applied Statistics and Management*, 2023, **42**(4): 637–648. DOI: 10.13860/j.cnki.sltj.20230309-002(Ch).
- [12] BOX G E P, DRAPER N R. A basis for the selection of a response surface design[J]. *Journal of the American Statistical Association*, 1959, **54**(287): 622–654. DOI: 10.1080/01621459.1959.10501525.
- [13] GOOS P, JONES B, SYAFITRI U. I-optimal design of mixture experiments[J]. *Journal of the American Statistical Association*, 2016, **111**(514): 899–911. DOI: 10.1080/01621459.2015.1136632.
- [14] 叶婉颖, 朱小渊, 张崇岐, 等. 几类含定性因子的复合型混料模型的 I-最优设计[J]. 广州大学学报(自然科学版), 2020, **19**(4): 57–66. DOI: 10.3969/j.issn.1671-4229.2020.04.007.
- YE W Y, ZHU X Y, ZHANG C Q, *et al.* I-optimal design of mixture models with a qualitative factor[J]. *Journal of Guangzhou University (Natural Science Edition)*, 2020, **19**(4): 57–66. DOI: 10.3969/j.issn.1671-4229.2020.04.007(Ch).
- [15] 马景文. 混料试验的 V-和 R-最优设计研究[D]. 兰州: 兰州财经大学, 2023. DOI: 10.27732/d.cnki.gnzsx.2023.000396.
- MA J W. V-and R-optimal designs of mixture experiments[D]. Lanzhou: Lanzhou University of Finance and Economics, 2023. DOI: 10.27732/d.cnki.gnzsx.2023.000396(Ch).
- [16] 李俊鹏, 张崇岐. 基于二阶指数混料模型的 A-最优设计[J]. 数理统计与管理, 2023, **42**(3): 472–482. DOI: 10.13860/j.cnki.sltj.20220715-003.
- LI J P, ZHANG C Q. A-optimal design for second-order exponential mixture model[J]. *Journal of Applied Statistics and Management*, 2023, **42**(3): 472–482. DOI: 10.13860/j.cnki.sltj.20220715-003(Ch).
- [17] LI J P, LI G H, LENG W, *et al.* Construction of weighted efficiency optimal designs for experiments with mixtures[J]. *Statistics & Probability Letters*, 2025, **216**: 110255. DOI: 10.1016/j.spl.2024.110255.
- [18] 李俊鹏. 混料试验的加权效率最优设计的研究[D]. 广州: 广州大学, 2024. DOI: 10.27040/d.cnki.ggzdu.2024.000115.
- LI J P. Research on weighted efficiency optimal design for experiments with mixtures[D]. Guangzhou: Guangzhou University, 2024. DOI: 10.27040/d.cnki.ggzdu.2024.000115(Ch).

□