

混料信息矩阵的方向导数及改进的 Fedorov 算法

冯鑫¹, 陈嘉丽², 李光辉^{3*}

1. 吉首大学数学与统计学院, 湖南 吉首 416000

2. 兰州财经大学统计与数据科学学院, 甘肃 兰州 730020

3. 凯里学院微电子与人工智能学院, 贵州 凯里 556000

摘 要 : 为了构造复杂混料系统下搜索最优设计的算法, 根据连续型设计的信息矩阵在单点设计方向上的导数确定算法的迭代过程, 通过分析单点设计方向上的 Fréchet 导数与 Gâteaux 导数的性质, 构建改进的 Fedorov 算法, 进而提高搜索的效率。

关 键 词 : 信息矩阵; Fréchet 导数; Gâteaux 导数; Fedorov 算法

Directional Derivatives of the Mixture Information Matrix and an Improved Fedorov Algorithm

Feng Xin¹, Chen Jiali², Li Guanghui^{3*}

1. School of Mathematics and Statistics, Jishou University, Jishou, Hunan 416000

2. School of Statistics and Data Science, Lanzhou University of Finance and Economics, Lanzhou, GanSu 730020

3. School of Microelectronics and Artificial Intelligence, Kaili University, Kaili, Guizhou 556000

Abstract : In order to construct an algorithm for searching optimal designs under complex mixture systems, the iterative process of the algorithm is determined based on the derivative of the information matrix of continuous designs in the direction of single-point designs. By analyzing the properties of the Fréchet derivative and the Gâteaux derivative in the direction of single-point designs, an improved Fedorov algorithm is developed, thereby enhancing the efficiency of the search.

Keywords : Information Matrix; Fréchet Derivative; Gâteaux Derivative; Fedorov Algorithm

引言

自 Scheffé^[1]提出了混料试验设计的相关理论以来, 其理论与方法已广泛的应用于工业、农业、经济、医疗以及生物科学等诸多领域. 随着人工智能与机器学习等技术的蓬勃发展, 处理和分析海量数据方面的技术已日渐成熟, 与此同时, 各行各业对数据的需求也随之提高. 许多企业在改进生产技术和加工工艺方面需要进行大型的混料试验, 而很多试验过程复杂、周期漫长、耗费巨大. 囿于时间、人力和财力的限制, 加之试验本身的复杂性, 以至于在混料设计的过程中常面临着许多困难的问题. 这些问题不仅制约了某些科学领域的研究, 而且影响到许多生产技术的发展。

一直以来, 关于最优设计的搜索算法都是研究的热点. 搜索复杂混料系统的全局最优设计主要有两类方法. 一类是根据凸设计理论而提出的极端顶点法. 例如, Karunanithi 等^[2]使用 CAMD 算法搜索混料试验的 D -最优设计. Limmun 等^[3]使用遗传算法搜索出了多项式模型的 D -和 D_s -最优设计. Li 和 Zhang^[4]在格点理论基础上构造了 MDRS 算法, 它适用于复杂约束域内最优设计的搜索, 其核心原理是使用混料格点与随机混料点集结合作为搜索矩阵, 将复杂试验域剖分后分块搜索, 从而大大提高搜索效率。

使用智能算法能够适应在各类复杂的混料系统内搜索最优设计, 但搜索效率不高, 特别在复杂约束的试验域内, 临近边界的搜索工作效率很低^[5]. 当混料模型是确定的, 且试验域是无附加约束的情形下, 使用 Fedorov 算法能够快速搜索到最优设计. 在 Fedorov 算法中最核心的迭代步骤中就要求解关于信息矩阵的单点方向导数. 通过求解关于信息矩阵的凸组合函数在某个单点处的方向导数, 进而找到使得目标函数最优化的下一步迭代值. 目前, 关于矩阵的方向导数主要有两类, 即 Fréchet 导数和 Gâteaux 导数. 特别的, 对于混料模型下的信息矩阵, 这两类导数有一些特殊的性质, 这些都有助于改进当前的 Fedorov 算法, 使得搜索效率进一步提高。

基金项目: 贵州省高等学校本科教学内容和课程体系改革项目 (GZJG2024378); 凯里学院博士专项课题 (BS201807)。

作者简介:

冯鑫 (2002—), 男, 贵州毕节人, 硕士生, 研究方向: 试验设计;

陈嘉丽 (1994—), 女, 广东阳江人, 博士生, 研究方向: 试验设计;

通讯作者: 李光辉 (1985—), 男, 贵州贵阳人, 教授, 博士, 主要从事试验设计的研究, Email: liguanghui1985@126.com。

本文首先介绍关于混料信息矩阵及其基本记号；第三节给出了混料信息矩阵的 Fréchet 导数和 Gâteaux 导数的具体形式以及相关性质；第四节在信息矩阵方向导数的基础上对 Fedorov 算法进行了调整与改进，最后总结并提出可进一步研究的问题。

一、混料信息矩阵

q 分量的混料试验域是一个 $q-1$ 维的标准单纯形

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

线性模型是最优设计的理论基础，模型中的响应是关于各未知参数的线性组合，假设未知参数为 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ ，则模型可以表示为如下形式

$$y = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta} + \varepsilon, \quad (1)$$

其中 y 表示试验观测值， $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x}))$ 是关于 $\mathbf{x} \in \mathcal{X} \subseteq S^{q-1}$ 已知的函数向量， $\boldsymbol{\beta}^T = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)$ 是待估计的未知参数向量， ε 为随机误差，通常假设 $E(\varepsilon) = 0, \text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2$ 。

对于试验域 $\mathcal{X}$ 内的 n 个互异试验点 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iq})^T \in \mathcal{X} \subset S^{q-1}, i = 1, 2, \dots, n$ ，定义连续型设计为

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ \omega_1 & \omega_2 & \cdots & \omega_n \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中 $\omega_i > 0, i = 1, 2, \dots, n$ 为各试验点对应的测度，且满足 $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$ 。由所有的设计构成的集合记为 Ξ ，由 (2) 式中的 n 个设计点所确定的设计 ξ 对应的信息矩阵为

$$\mathbf{M}(\xi) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}^T(\mathbf{x})d\xi(\mathbf{x}). \quad (3)$$

混料设计 ξ 的信息矩阵是一个定义在 $\mathcal{X}$ 上的 Lebesgue 积分^[6]。由信息矩阵构成的矩阵空间记为 $\mathcal{M} = \{\mathbf{M}(\xi) : \xi \in \Xi\}$ 。

最优设计准则都是建立在已知模型的信息矩阵的基础上，令 $\Phi_\phi(\cdot)$ 表示最优设计的准则函数。则常见最优设计的准则函数有以下几种。

(1) D -准则函数为 $\Phi_D[\mathbf{M}(\xi)] = |\mathbf{M}(\xi)|$ ；

(2) A -准则函数为 $\Phi_A[\mathbf{M}(\xi)] = \text{Tr}[\mathbf{M}^{-1}(\xi)]$ ；

(3) R -准则函数为 $\Phi_R[\mathbf{M}(\xi)] = \prod_{i=1}^p [\mathbf{M}^{-1}(\xi)]_{ii}$ ，其中 $[\mathbf{M}]_{ii}$ 表示

矩阵 $\mathbf{M}$ 的主对角线上的第 i 个元素。

准则函数是判断一个设计优劣的函数，通常还需要验证其等价性定理，而等价性定理往往是与信息矩阵的微商有关，下面我们介绍关于矩阵微商的一些基本性质。

引理 1^[7] 设矩阵 $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ 是关于变量 t 的同阶矩阵，即 $\mathbf{A} = (a_{ij}(t))$ ， $\mathbf{B} = (b_{ij}(t))$ ，其中 $a_{ij}(t)$ 与 $b_{ij}(t)$ 都是关于 t 的可导函数，则有以下结论。

(1) 矩阵加减的微分， $d(\mathbf{A} \pm \mathbf{B}) = d\mathbf{A} \pm d\mathbf{B}$ ；

(2) 矩阵乘法的微分， $d(\mathbf{AB}) = d(\mathbf{A})\mathbf{B} + \mathbf{A}d(\mathbf{B})$ ；

(3) 矩阵转置的微分， $d(\mathbf{A}^T) = (d\mathbf{A})^T$ ；

(4) 矩阵的迹的微分， $d\text{Tr}(\mathbf{A}) = \text{Tr}(d\mathbf{A})$ ；

(5) 矩阵哈达马乘积的微分， $d(\mathbf{A} \odot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \odot d(\mathbf{B}) + d(\mathbf{A}) \odot \mathbf{B}$ ；

(6) 矩阵逐元素求导， $d\sigma(\mathbf{A}) = \sigma'(\mathbf{A}) \odot d\mathbf{A}$ ；

(7) 逆矩阵的微分， $d\mathbf{A}^{-1} = -\mathbf{A}^{-1}d\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}$ ；

(8) 矩阵行列式的微分， $d|\mathbf{A}| = |\mathbf{A}|\text{Tr}(\mathbf{A}^{-1}d\mathbf{A})$ 。

证明：(1)-(6) 容易由定义直接得出，以下我们仅证明 (7) 和 (8)。

(7) 特别地，令矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij}(t))_{i,j=1}^{n,n}$ ，由于 $\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}_{n \times n}$ ，则

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt}\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}\frac{d\mathbf{A}^{-1}}{dt} = \mathbf{0}_{n \times n},$$

再移项并左乘 $\mathbf{A}^{-1}$ 可得

$$\frac{d\mathbf{A}^{-1}}{dt} = -\mathbf{A}^{-1}\frac{d\mathbf{A}}{dt}\mathbf{A}^{-1}.$$

(8) 令矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij}(t))_{i,j=1}^{n,n}$ ，且 $\mathbf{A}$ 可逆，则根据链式求导法则有

$$\frac{d|\mathbf{A}|}{dt} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ij}} \frac{da_{ij}}{dt}, \quad (4)$$

令 $\mathbf{A}_{ij}$ 为代数余子式，则 $|\mathbf{A}| = \sum_{j=1}^n a_{ij} \mathbf{A}_{ij}$ ，故 $\frac{\partial |\mathbf{A}|}{\partial a_{ij}} = \mathbf{A}_{ij}$ ，所以

(4) 式又有

$$\frac{d|\mathbf{A}|}{dt} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{A}_{ij} \frac{da_{ij}}{dt}, \quad (5)$$

而伴随矩阵 $\mathbf{A}^*$ 的第 j 行第 i 列元素为 $\mathbf{A}_{ij}$ ，不妨记为

$\mathbf{A}_{ij} = (\mathbf{A}^*)_{ji}$ ，同理 $\frac{da_{ij}}{dt}$ 可表示为 $(\frac{d\mathbf{A}}{dt})_{ij}$ ，则 (5) 式又有

$$\begin{aligned} \frac{d|\mathbf{A}|}{dt} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\mathbf{A}^*)_{ji} \left(\frac{d\mathbf{A}}{dt} \right)_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (|\mathbf{A}|\mathbf{A}^{-1})_{ji} \left(\frac{d\mathbf{A}}{dt} \right)_{ij} \\ &= |\mathbf{A}| \sum_{j=1}^n (\mathbf{A}^{-1} \frac{d\mathbf{A}}{dt})_{jj} \\ &= |\mathbf{A}| \text{Tr}(\mathbf{A}^{-1} \frac{d\mathbf{A}}{dt}). \end{aligned}$$

二、信息矩阵的凸组合

由于在最优设计理论中，往往需要考虑关于不同信息矩阵的凸组合，进而再对其微商进行分析。信息矩阵凸组合的微商是推导最优性条件的核心手段，以 D -最优准则为例，其目标函数为信息矩阵的行列式，而凸组合的行列式性质（如凹性）直接决定了最优设计的存在性与唯一性。通过分析凸组合的方向导数，可建立最优设计的必要条件。这里我们给出信息矩阵凸组合的定义及相关性质。

定义 1 在模型 (1) 的基础上，假设有两个非退化设计 $\xi_1, \xi_2 \in \Xi$ ，则它们的凸组合表示为 $\alpha\xi_1 + (1-\alpha)\xi_2$ ，其中 $\alpha \in [0, 1]$ 。

定理 1 对于设计

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ \omega_1 & \omega_2 & \cdots & \omega_n \end{pmatrix},$$

其中 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathcal{X} \subset S^{q-1}$ 。在模型 (1) 的基础上有以下结论。

(1) 信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 是半正定的. 若 $n < p$, 则 $\mathbf{M}(\xi)$ 是奇异矩阵。

(2) 设有两个非退化设计 ξ_1 与 ξ_2 , 其对应的信息矩阵为 $\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_s) \in \mathcal{M}$, 令常数 $\alpha \in [0, 1]$, 则设计

$$\xi = \alpha \xi_1 + (1 - \alpha) \xi_2$$

为设计 ξ_1 与 ξ_2 的凸组合, 且

$$\mathbf{M}(\xi) = \alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)$$

为凸集。

证明: 设计 ξ 的信息矩阵为 $\mathbf{M}(\xi) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x})$, 则

$$\mathbf{M}^T(\xi) = \int_{\mathcal{X}} [\mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})]^T d\xi(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}) = \mathbf{M}(\xi), \quad (6)$$

由 (6) 式可知 $\mathbf{M}(\xi)$ 是对称矩阵, 设 $\mathbf{z}$ 是一个 p 维实向量, 则有

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^T \mathbf{M}(\xi) \mathbf{z} &= \mathbf{z}^T \left[\int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}) \right] \mathbf{z} \\ &= \int_{\mathcal{X}} \mathbf{z}^T \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{z} d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\mathcal{X}} [\mathbf{z}^T \mathbf{f}(\mathbf{x})]^2 d\xi(\mathbf{x}) \geq 0. \end{aligned}$$

故 $\mathbf{M}(\xi)$ 是半正定的。

信息矩阵中 $(\mathbf{f}(\mathbf{x}_1), \mathbf{f}(\mathbf{x}_2), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{x}_n))$ 为 $p \times n$ 矩阵, 若 $n < p$, 则它的秩 $r \leq n < p$, 而信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 的秩不大于 r , 即有 $\text{rank}[\mathbf{M}(\xi)] \leq r < p$, 又因为 $\mathbf{M}(\xi)$ 是 $p \times p$ 的矩阵, 所以 $\mathbf{M}(\xi)$ 为奇异矩阵。

(2) 由 (3) 式有

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\xi_1 + (1 - \alpha) \xi_2) &= \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d[\xi_1 + (1 - \alpha) \xi_2] \\ &= \alpha \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi_1(\mathbf{x}) + (1 - \alpha) \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi_2(\mathbf{x}) \\ &= \alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2). \end{aligned}$$

显然, 信息矩阵集合对设计的凸组合是封闭的, 所以 $\mathbf{M}(\xi)$ 是凸集。

推论 1 对于最优设计准则, 若准则函数 $\Phi(\cdot)$ 为凸函数, 则有,

$$\Phi(\mathbf{M}(\xi)) \leq \alpha \Phi(\mathbf{M}(\xi_1)) + (1 - \alpha) \Phi(\mathbf{M}(\xi_2)),$$

若准则函数 $\Phi(\cdot)$ 为凹函数, 则 $\Phi(\mathbf{M}(\xi)) \geq \alpha \Phi(\mathbf{M}(\xi_1)) + (1 - \alpha) \Phi(\mathbf{M}(\xi_2))$ 。

推论 2 对于 $\mathbf{M}(\xi_1), \mathbf{M}(\xi_2) \in \mathcal{M}$, 因为 $\mathbf{M}(\xi_1)$ 和 $\mathbf{M}(\xi_2)$ 均为非负定矩阵, 则其行列式有

$$|\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)| \geq |\mathbf{M}(\xi_1)|^\alpha |\mathbf{M}(\xi_2)|^{1-\alpha}.$$

证明: 引入函数 $\ln |\mathbf{M}(\xi)|$, 该函数在信息矩阵空间中为凹函数, 由推论 1 有,

$$\ln |\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)| \geq \alpha \ln |\mathbf{M}(\xi_1)| + (1 - \alpha) \ln |\mathbf{M}(\xi_2)|,$$

而 $\exp(x)$ 为增函数, 则

$$\exp \{ \ln |\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)| \} \geq \exp \{ \alpha \ln |\mathbf{M}(\xi_1)| + (1 - \alpha) \ln |\mathbf{M}(\xi_2)| \},$$

所以有 $|\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)| \geq |\mathbf{M}(\xi_1)|^\alpha |\mathbf{M}(\xi_2)|^{1-\alpha}$ 。

三、单点设计的方向导数

单点设计的方向导数在最优设计理论中有着重要的作用, 尤其在 Fedorov 算法这一用于求解最优设计的经典方法中, 其重要性尤为突出。Fedorov 算法以迭代优化为核心, 通过不断调整试验

点逼近最优设计, 而单点设计的方向导数, 正是算法迭代的决策依据, 不仅构建了算法的迭代逻辑, 更保障了算法在搜索最优设计时的精准性, 使其能系统地逼近最优解, 完成从初始设计到最优设计的迭代升级。在讨论单点设计的方向导数之前我们给出以下结论。

定理 2 设 $\xi = \alpha \xi_1 + (1 - \alpha) \xi_2 \in \Xi$ 为一个凸组合设计, 其中 ξ_1, ξ_2 均为非退化设计, $\alpha \in [0, 1]$, 则有下面结论,

$$(1) \frac{d}{d\alpha} \ln |\mathbf{M}(\xi)| = \text{Tr} \left\{ [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-1} [\mathbf{M}(\xi_1) - \mathbf{M}(\xi_2)] \right\};$$

$$(2) \frac{d}{d\alpha} \mathbf{M}^{-1}(\xi) = [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-1} [\mathbf{M}(\xi_2) - \mathbf{M}(\xi_1)] [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-1};$$

$$(3) \frac{d}{d\alpha} \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)) = \text{Tr} \left\{ [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-2} [\mathbf{M}(\xi_2) - \mathbf{M}(\xi_1)] \right\}.$$

证明: (1) 由引理 1 中矩阵行列式的微分公式可得

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} \ln |\mathbf{M}(\xi)| &= \frac{1}{|\mathbf{M}(\xi)|} |\mathbf{M}(\xi)| \text{Tr} \{ \mathbf{M}^{-1}(\xi) d\mathbf{M}(\xi) \} \\ &= \text{Tr} \{ \mathbf{M}^{-1}(\xi) [\mathbf{M}(\xi_1) - \mathbf{M}(\xi_2)] \} \\ &= \text{Tr} \left\{ [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-1} [\mathbf{M}(\xi_1) - \mathbf{M}(\xi_2)] \right\}. \end{aligned}$$

(2) 由引理 1 中逆矩阵的微分公式可得

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} \mathbf{M}^{-1}(\xi) &= -\mathbf{M}^{-1}(\xi) d\mathbf{M}(\xi) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \\ &= -\mathbf{M}^{-1}(\xi) [\mathbf{M}(\xi_1) - \mathbf{M}(\xi_2)] \mathbf{M}^{-1}(\xi) \\ &= [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-1} [\mathbf{M}(\xi_2) - \mathbf{M}(\xi_1)] \\ &\quad [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-1}. \end{aligned}$$

(3) 由引理 1 中矩阵的迹的微分可得

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)) &= -\text{Tr} \{ \mathbf{M}^{-1}(\xi) d\mathbf{M}(\xi) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \} \\ &= -\text{Tr} \{ \mathbf{M}^{-1}(\xi) [\mathbf{M}(\xi_1) - \mathbf{M}(\xi_2)] \mathbf{M}^{-1}(\xi) \} \\ &= \text{Tr} \{ \mathbf{M}^{-2}(\xi) [\mathbf{M}(\xi_2) - \mathbf{M}(\xi_1)] \} \\ &= \text{Tr} \left\{ [\alpha \mathbf{M}(\xi_1) + (1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi_2)]^{-2} [\mathbf{M}(\xi_2) - \mathbf{M}(\xi_1)] \right\}. \end{aligned}$$

推论 3 令 ξ_1 为单点设计, 若 $\ln |\mathbf{M}(\xi)|$ 在 $\alpha = 0$ 处对 α 求导大于 0, 则认为设计 ξ_2 不是 D -最优的; 若 $\text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi))$ 在 $\alpha = 0$ 处对 α 求导小于 0, 则认为设计 ξ_2 不是 A -最优的。

证明: 由定理 2 以及 D -, A -最优设计的判决函数易得。

设 $\xi_{\mathbf{x}}$ 为一个单点设计 (即在 $\mathbf{x}$ 点处测度为 1 的设计), 下面我们讨论一个设计 ξ 在单点设计 $\xi_{\mathbf{x}}$ 方向上的三类导数, 分别为 Fréchet 导数, Gâteaux 导数和 Hadamard 导数。

定义 2 对于信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_s) \in \mathcal{M}$, 准则函数 $\Phi(\cdot)$ 在 $\mathbf{M}(\xi)$ 处沿 $\mathbf{M}(\xi_s)$ 方向上的 Fréchet 导数为

$$F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_s)] = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} [\Phi((1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_s)) - \Phi(\mathbf{M}(\xi))], \quad (7)$$

(7) 式等价于

$$F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_s)] = \frac{d}{d\alpha} \Phi[(1 - \alpha) \mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_s)] \Big|_{\alpha=0^+}.$$

定义3 对于信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x) \in \mathcal{M}$, 准则函数 $\Phi(\cdot)$ 在 $\mathbf{M}(\xi)$ 处沿 $\mathbf{M}(\xi_x)$ 方向上的 Gâteaux 导数为

$$G_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} [\Phi(\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)) - \Phi(\mathbf{M}(\xi))] \quad (8)$$

推论4 若 $\Phi(\cdot)$ 是所有信息矩阵构成的集合 $\mathcal{M}$ 上的凹函数, 且在 $\mathbf{M}(\xi)$ 处可微, 则 ξ 为 Φ - 最优的充要条件是 $F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] \leq 0$; 若 $\Phi(\cdot)$ 为 $\mathcal{M}$ 上的凸函数, 且在 $\mathbf{M}(\xi)$ 处可微, 则 ξ 为 Φ - 最优的充要条件是 $F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] \geq 0$.

单点设计 ξ_x 的信息矩阵为 $\mathbf{M}(\xi_x) = \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}^T(\mathbf{x})$, 令 ξ_x 和 ξ 的一个凸组合为 $\xi_0 = \alpha \xi_x + (1-\alpha)\xi$, 由定理1可得

$$\mathbf{M}(\xi_0) = \alpha \mathbf{M}(\xi_x) + (1-\alpha)\mathbf{M}(\xi).$$

以下我们给出两类最优设计的准则函数, 分别为 D - 最优设计的准则函数 $\Phi_D[\mathbf{M}(\xi_0)] = |\mathbf{M}(\xi_0)|$, 以及 A - 最优设计的准则函数 $\Phi_A[\mathbf{M}(\xi_0)] = \text{Tr}[\mathbf{M}^{-1}(\xi_0)]$.

记 $F_{\Phi_D}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)]$ 为准则函数 $\Phi_D[\mathbf{M}(\xi_0)] = |\mathbf{M}(\xi_0)|$ 下计算的 Fréchet 导数, 则有

$$\begin{aligned} F_{\Phi_D}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} [|(1-\alpha)\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)| - |\mathbf{M}(\xi)|] \\ &= \frac{d}{d\alpha} |(1-\alpha)\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)|_{\alpha=0^+} \\ &= |\mathbf{M}(\xi_0)| \text{Tr}\{\mathbf{M}^{-1}(\xi)[\mathbf{M}(\xi_x) - \mathbf{M}(\xi)]\} \\ &= |\mathbf{M}(\xi_0)| \text{Tr}\{\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) - \mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi)\} \\ &= |\mathbf{M}(\xi_0)| [\text{Tr}\{\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}^T(\mathbf{x})\} - \text{Tr}\{\mathbf{I}_p\}] \\ &= |\mathbf{M}(\xi_0)| [\mathbf{f}^T(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{f}(\mathbf{x}) - p]. \end{aligned}$$

事实上, 为了简便计算, 这里的函数可选择 $\Phi_D[\mathbf{M}(\xi_0)] = \ln|\mathbf{M}(\xi_0)|$, 因为在计算 D - 最优设计的判决函数时, 两个函数的选择均不影响最终判决函数的形式, 同时我们仅对 ξ_0 感兴趣, 选择对数形式使得 $\ln|\mathbf{M}(\xi_0)|$ 非奇异。

记 $F_{\Phi_A}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)]$ 为准则函数 $\Phi_A[\mathbf{M}(\xi_0)] = \text{Tr}[\mathbf{M}^{-1}(\xi_0)]$ 下计算的 Fréchet 导数, 则有

$$\begin{aligned} F_{\Phi_A}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] &= \frac{d}{d\alpha} \text{Tr}\{[(1-\alpha)\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)]^{-1}\}_{\alpha=0^+} \\ &= \text{Tr}\{\mathbf{M}^{-2}(\xi)[\mathbf{M}(\xi) - \mathbf{M}(\xi_x)]\} \\ &= \text{Tr}\{\mathbf{M}^{-1}(\xi)[\mathbf{M}(\xi) - \mathbf{M}(\xi_x)]\mathbf{M}^{-1}(\xi)\} \\ &= \text{Tr}\{\mathbf{M}^{-1}(\xi) - \mathbf{M}^{-2}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)\} \\ &= \text{Tr}[\mathbf{M}^{-1}(\xi)] - \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-2}(\xi)\mathbf{f}(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

推论5 任意 $\mathbf{M}(\xi_i)$ 都可表示为 $\mathbf{M}(\xi_i) = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)$, 这里 $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$, 且 $\omega_i > 0$. 若 $\Phi(\cdot)$ 在 $\mathbf{M}(\xi)$ 处可微, 则 $F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_i)] = \sum_{i=1}^n \omega_i F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)]$.

基于上文的分析, 此处采用 $\Phi_D[\mathbf{M}(\xi_0)] = \ln|\mathbf{M}(\xi_0)|$ 来计算 D - 最优准则下的 Gâteaux 导数, 记为 $G_{\Phi_D}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)]$.

由泰勒公式可计算

$$\begin{aligned} |\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)| &= |\mathbf{M}(\xi)| + \alpha |\mathbf{M}(\xi)| \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)) + o(\alpha^2) \\ &= |\mathbf{M}(\xi)| [1 + \alpha \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)) + o(\alpha^2)], \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} \ln|\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)| - \ln|\mathbf{M}(\xi)| &= \ln[1 + \alpha \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)) + o(\alpha^2)] \\ &= \alpha \text{Tr}[\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)] + o(\alpha^2), \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} G_{\Phi_D}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} [\ln|\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)| - \ln|\mathbf{M}(\xi)|] \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{\alpha \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)) + o(\alpha^2)}{\alpha} \\ &= \text{Tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)). \end{aligned}$$

同理, 记在准则函数 $\Phi_A[\mathbf{M}(\xi_0)] = \text{Tr}[\mathbf{M}^{-1}(\xi_0)]$ 下计算的 Gâteaux 导数为 $G_{\Phi_A}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)]$.

根据泰勒公式有

$$\text{Tr}[\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)]^{-1} = \text{Tr}[\mathbf{M}(\xi)^{-1}] - \alpha \text{Tr}[\mathbf{M}^{-2}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)] + o(\alpha^2),$$

所以

$$\begin{aligned} G_{\Phi_A}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{\text{Tr}[\mathbf{M}(\xi) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)]^{-1} - \text{Tr}[\mathbf{M}(\xi)^{-1}]}{\alpha} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{\text{Tr}[\mathbf{M}(\xi)^{-1}] - \alpha \text{Tr}[\mathbf{M}^{-2}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)] - \text{Tr}[\mathbf{M}(\xi)^{-1}] + o(\alpha^2)}{\alpha} \\ &= -\text{Tr}[\mathbf{M}^{-2}(\xi)\mathbf{M}(\xi_x)]. \end{aligned}$$

推论6 对于给定的信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$, 满足 $F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi)] = 0$. 由定义可以得出 Fréchet 导数和 Gâteaux 导数之间的关系

$$F_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] = G_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi_x)] - G_{\Phi}[\mathbf{M}(\xi), \mathbf{M}(\xi)].$$

四、改进的 Fedorov 算法

Fedorov 算法是最优设计理论中求解 D - 最优设计的经典迭代方法, 其核心思想是通过逐步替换试验点来最大化信息矩阵的行列式. 该算法巧妙利用单点设计的方向导数来决策优化方向, 通过迭代计算当前设计下各候选点的方向导数, 选择使目标函数更大的点替换原有试验点, 从而得到最终的设计作为最优设计。

设 ξ_0 是一个非退化设计, ξ_x 是只有柱点 $\mathbf{x}$ 的单点设计, 令 ξ_0 与 ξ_x 的一个凸组合为

$$\xi_1 = (1-\alpha)\xi_0 + \alpha\xi_x,$$

其中 $0 \leq \alpha \leq 1$, 则有

$$\frac{d}{d\alpha} \log \det \mathbf{M}(\xi_1) = \text{Tr}\{[(1-\alpha)\mathbf{M}(\xi_0) + \alpha \mathbf{M}(\xi_x)]^{-1} [\mathbf{M}(\xi_x) - \mathbf{M}(\xi_0)]\}$$

于是得到

$$\frac{d}{d\alpha} \log \det \mathbf{M}(\xi_1)|_{\alpha=0} = F_{\Phi_D}[\mathbf{M}(\xi_1), \mathbf{M}(\xi_x)] = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-1}(\xi_0)\mathbf{f}(\mathbf{x}) - p$$

使用 Fréchet 导数求解得到的关于单点设计 ξ_x 的方向导数, 确定了下一步迭代的最优搜索方向, 在此方向上生成与设计空间边界的交点, 即为最优迭代解. 在构造了设计 ξ_1 以后, 我们可以寻找 $\mathbf{x}_1$, 以及小化的 α_1 使得 $\xi_2 = (1-\alpha_1)\xi_1 + \alpha_1\xi_{x_1}$, 满足 $\det \mathbf{M}(\xi_2) \leq \det \mathbf{M}(\xi_1)$ 继续这种方法, 可构造出一系列设计 $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_s, \dots$, 满足

$$\det \mathbf{M}(\xi_0) \leq \det \mathbf{M}(\xi_1) \leq \det \mathbf{M}(\xi_2) \leq \dots \leq \det \mathbf{M}(\xi_s) \leq \dots,$$

并且对一切 s 有

$$\det \mathbf{M}(\xi_s) \leq \det \mathbf{M}(\xi^*)$$

其中 ξ^* 是 D-最优设计. 因此, 我们要适当地选择序列 $\{\alpha_s\}$ 使

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \det \mathbf{M}(\xi_s) = \det \mathbf{M}(\xi^*)$$

将以上过程整理为以下算法步骤如下.

改进 Fedorov 算法
1. 输入: 一个非退化的初始设计 $\xi_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ \omega_1 & \omega_2 & \cdots & \omega_n \end{pmatrix}$, $n \geq p$, $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$;
2. 计算 ξ_0 的信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi_0) = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)$ 及其逆矩阵 $\mathbf{M}^{-1}(\xi_0)$;
3. 根据在 D-最优准则下计算的 Fréchet 导数, 令 $d(\mathbf{x}_0, \xi_0) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\xi_0) \mathbf{f}(\mathbf{x})$;
4. 构造设计 $\xi_1 = (1 - \alpha_0) \xi_0 + \alpha_0 \xi_{\mathbf{x}_0}$, 其中
$\alpha_0 = \frac{\delta_0}{[\delta_0 + (p-1)]^p}, \delta_0 = d(\mathbf{x}_0, \xi_0) - p ;$
5. 计算 $\mathbf{M}(\xi_1)$ 与 $\mathbf{M}^{-1}(\xi_1)$, 以 ξ_1 代替 ξ_0 , 重复步骤 2~4 可得一系列设计 $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots$;
6. 上述迭代过程收敛的, 系列设计的极限设计就是一个 D-最优设计.

算法中需要频繁计算各个设计的方差函数

$$d(\mathbf{x}, \xi) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x}).$$

一般的, 如果 D-最优设计 ξ 的支撑点数恰好等于模型未知参数的个数, 这样的设计我们称之为饱和 D-最优设计, 而且饱和 D-最优设计一定是等测度设计, 即所有支撑点处的测度都等于 $1/p$. 由于 Fedorov 算法每次迭代都要添加新的试验点, 且最终设计

与初始设计的选择有关, 所以很多时候 Fedorov 算法不能生成饱和的 D-最优设计。

五、总结

信息矩阵的微商在最优设计理论中扮演着重要的角色, 为构建最优设计的条件提供了理论基础, 本文研究了最优设计理论中关于信息矩阵的微商, 以及一个设计在单点设计方向上的方向导数. 单点设计的方向导数是 Fedorov 算法的核心支撑. 通过对 Fréchet 导数和 Gâteaux 导数的系统分析, 明确了两类导数在最优设计准则下的计算方式及其与算法迭代的关联. 值得注意的是常用的 Hadamard 导数和 Fréchet 导数虽然有着不同的定义方式, 但在某些情况下两者是等价的. 具体而言, 在给定的函数空间中, Fréchet 导数存在, 则 Hadamard 导数也存在且等于 Fréchet 导数. 也就是说, Fréchet 导数是 Hadamard 导数的特例。

除了使用方向导数改进现有搜索算法外, 还可以结合混料格点的理论, 提高搜索效率, 避免落入局部最优解, 可以参考文献 [8-9]. 信息矩阵的微商在最优设计理论中非常重要, 进一步可以研究在其他最优设计准则下的方向导数, 以及在不同场景下三类方向导数的应用等等, 以促进最优设计理论的发展完善。

参考文献

[1] Scheffé H (1958). Experiments with Mixtures. Journal of the Royal Statistical Society(2), 344–360.
[2] Karunanithi A T, Achenie L E K, Gani R (2004). Optimal (Solvent) mixture design through a decomposition based CAMD methodology. Computer Aided Chemical Engineering(04), 217–222.
[3] Limmun W, Borkowski J J, Chomtee B (2012). Using a genetic algorithm to generate D-optimal designs for mixture experiments. Quality and Reliability Engineering International(7), 1055–1068.
[4] 李光辉, 张崇岐 (2017). 具有复杂约束混料试验的渐近 D-最优设计. 应用概率统计 (02), 203–220.
[5] Li G H, Zhang C Q. Random search algorithm for optimal mixture experimental design. Communication in Statistics: Theory and Methods(6), 1413–1422.
[6] Kiefer J. Optimum designs in regression problems, II [J]. The Annals of Mathematical Statistics, 1961, 32(1): 298–325.
[7] Gene H, Charles F. Matrix Computations—4th Edition [M]. The Johns Hopkins University Press, 2023.
[8] 李光辉, 朱志彬, 李俊鹏, 等. 混料试验的格点填充设计 [J]. 应用数学学报, 2022, 45(04): 607–623.
[9] 李光辉, 李俊鹏, 张崇岐. 复杂约束域内混料最优设计的格点评价 [J]. 应用概率统计, 2022, 38(02): 253–266.