

试论二次旋转组合设计的多样性及其统一

蒋爱湘

(天津市农业科学院农作物研究所, 天津 300112)

摘 要 二次旋转组合设计是目前应用得较为广泛的试验设计方法, 但因其设计方案和分析方法的多样性, 给实际应用带来了不便。本文试图把握二次旋转组合设计的实质, 弄清其各种类型之间的关系, 力求使二次旋转组合设计在设计方案、统计分析、计算机程序上得到统一。

关键词 正交性 回归系数 旋转设计 组合设计

二次旋转组合设计是将旋转设计和组合设计方法结合起来, 对多因素多水平进行部分试验的一种设计方法。其试验次数少、信息量大、精度高、计算简便, 可部分消除回归系数之间的相关性, 并能根据预测值直接寻求最优区域。随着科学试验的蓬勃开展和计算机应用的不断普及, 二次旋转组合设计已越来越多地应用于生产、科研等各个领域, 例如, 作物的模式化栽培。为了给该设计更广泛地应用提供方便, 有必要在理论上进行一些探讨。本文将在概述二次旋转组合设计多样性的基础上, 谈谈它的统一问题。

1. 二次旋转组合设计的多样性

二次旋转组合设计的设计方案由以下三部分组成: ①二水平试验点, 各因子水平为+1或-1, 全实施的试验点数 $m_c = 2^p$, 这里 p 代表因子数, 部分实施时 m_c 可取 2^p 的 $1/2$ 、 $1/4$ 等等; ②星号臂试验点, 在固定其它因子水平为 0 时, 某因子水平为 $+\gamma$ 或 $-\gamma$ (γ 代表星号臂的不同取值, 可据 p 查表获得), 其试验点数 $m_p = 2p$; ③中心试验点, 各因子的水平取值均为 0, 试验点数 m_0 具有可变性。试验总点数 $N = m_c + 2p + m_0$ 。

正是由于中心试验点数 m_0 可有不同的取值, 而出现了二次旋转组合设计的多样性。按中心试验点的不同取值, 一般分为三种类型的设计, 即二次正交旋转组合设计, 二次通用旋转组合设计, 二次几乎正交旋转组合设计。

1.1 设计方案的多样性

1.1.1 二次正交旋转组合设计 该设计具有正交性, 即其结构矩阵满足正交要求: 任一列之和等于 0 (全 1 列除外), 任二列的内积等于 0, 其相关矩阵为对角阵。同其它类型的旋转组合设计一样, 它对二水平试验点、星号臂试验点均有严格要求, 并且对中心试验点的重复次数也有严格要求, 这里 m_0 取值较大, 以此来消除平方项间的相关性。实际应用时,

对 m_0 的设置可查表获得。

1.1.2 二次通用旋转组合设计 该设计的方差在一定区间内具有通用性, 即: 设 ρ 表示以试验中心点为球心的球的半径, 则这一设计可使它的预测值的方差 $D(\hat{Y})$ 在区间 $\rho_1 < \rho < \rho_2$ 上基本保持某一常数。与正交旋转组合设计一样, 它对三类试验点均有严格要求, 并可查表获得 m_0 , 但在这里, m_0 的数值比正交旋转组合设计的少。该设计不具备正交性, 其相关阵不是完全的对角阵, 在常数项 b_0 及平方项回归系数 b_{ii} 的集合里, 两两间均存在相关性, 而其它系数间互不相关。

1.1.3 二次几乎正交旋转组合设计 该设计对二水平试验点、星号臂试验点虽有严格要求, 但其中心试验点的重复次数却有较大的灵活性, 因而可根据实际情况, 适当选取比正交旋转组合设计少一些的 m_0 。很显然地, 该设计不满足正交性, 其相关矩阵亦不是完全的对角阵, 在常数项 b_0 及平方项回归系数 b_{ii} 的集合里, 两两间存在相关性, 而其它系数间互不相关。

1.2 分析方法的多样性

1.2.1 二次正交旋转组合设计 分析时需要对方项进行中心化处理, 以消除常数项与平方项系数间的相关性, 然后根据公式计算回归系数。

1.2.2 二次通用旋转组合设计 由于其不满足正交性, 相关矩阵不是对角阵, 所以在计算回归系数时, 需要首先查表获得参数: c 、 K 、 F 、 E 、 G 等, 才能根据一定的公式计算回归系数。

1.2.3 二次几乎正交旋转组合设计 该设计需要通过特定的公式计算出参数: c 、 K 、 F 、 E 、 G 等, 再根据一定的公式计算回归系数。因为该设计不仅不满足正交性, 而且其中心试验点的重复次数比较灵活, 所以没有现成的表可以查得各种参数。

2 二次旋转组合设计的统一

二次旋转组合设计, 尽管其设计方案有多种类型, 分析方法也不一样, 但都具备二次旋转组合设计的共同特点, 即: ①在与试验中心点距离相等的球面上的各点, 回归方程预测值 \hat{Y} 的方差相等, 因而属于旋转设计; ②在因子空间中选择几类具有不同特性的点, 把它们适当地组合起来而形成的设计; ③设计得到的回归方程是二次的, 它包括常数项、一次项、交互项和平方项。

由于各种类型的二次旋转组合设计具有以上共同的特点, 因此可以将不同类型的设计方案和分析方法统一起来, 进而求得在计算机程序上的统一, 这对实际工作是非常有利的。

2.1 设计方案的统一

2.1.1 各种类型的二次旋转组合设计对二水平试验点和星号臂试验点的要求都是统一的。当因子数和实施范围相同 (例如均为全实施或 $1/2$ 、 $1/4$ 实施等) 时, 二水平试验点和星号臂试验点的点数也是相同的。

2.1.2 除 m_0 取值不同外, 其它设计参数都适用于各种类型的二次旋转组合设计, 因此, 可统一列表 (见表)。

2.1.3 从附表可以看出, 在因子数和实施范围相同时, 二次几乎正交旋转组合设计之 m_0 的

取值范围包含了二次通用旋转组合设计之 m_0 的值,并且稍加扩充,亦包括了正交旋转组合设计之 m_0 ,因而,可以说经扩充之后,二次几乎正交旋转组合设计代表了二次旋转组合设计的一般情况,而二次正交旋转组合设计和二次通用旋转组合设计则为其特例。

表 二次旋转组合设计参数

| 方案号 | p | m_c | γ | m_0 | | |
|-----|-----------|-------|-----------|-------|----|------|
| | | | | 正交 | 通用 | 几乎正交 |
| 1 | 2 | 4 | 1.4142136 | 8 | 5 | <8 |
| 2 | 3 | 8 | 1.6817928 | 9 | 6 | <9 |
| 3 | 4 | 16 | 2.0000000 | 12 | 7 | <12 |
| 4 | 5 | 32 | 2.3784142 | 17 | 6 | <17 |
| 5 | 5(1/2 实施) | 16 | 2.0000000 | 10 | 6 | <10 |
| 6 | 6(1/2 实施) | 32 | 2.3784142 | 15 | 9 | <15 |
| 7 | 7(1/2 实施) | 64 | 2.8284271 | 22 | 14 | <22 |
| 8 | 8(1/2 实施) | 128 | 3.3635857 | 33 | 13 | <33 |
| 9 | 8(1/4 实施) | 64 | 2.8284271 | 20 | 13 | <20 |

2.2 分析方法的统一

2.2.1 对 e 、 K 、 F 、 E 、 G 等参数,可根据以下统一公式进行计算:

$$\begin{cases} e = m_c + 2\gamma^2 \\ f = m_c + 2\gamma^4 \\ H = 2\gamma^2 [Nf + (p-1)Nm_c - pe^2] \\ K = 2\gamma^4 H^{-1} [f + (p-1)m_c] \\ F = H^{-1} [Nf + (p-2)Nm_c - (p-1)e^2] \\ E = -2H^{-1}e\gamma^4 \\ G = H^{-1}(e^2 - Nm_c) \end{cases} \quad (1)$$

2.2.2 对回归系数,可根据以下统一公式进行计算:

$$\begin{cases} b_0 = K \sum_a y_a + E \sum_{j=1}^p (\sum_a x_{aj}^2 y_a) \\ b_j = e^{-1} \sum_a x_{aj} y_a \\ b_{cj} = m_c^{-1} \sum_a x_{aj} x_{aj} y_a \\ b_{jj} = (F - G) \sum_a x_{aj}^2 y_a + G \sum_{j=1}^p \sum_a x_{aj}^2 y_a + E \sum_a y_a \end{cases} \quad (2)$$

式中, y_a 为各点试验结果, 试验点 $a=1, 2, 3, \dots, N_0$ 。

以上列出的公式(1)和(2)可适用于任一种二次旋转组合设计结果的分析。事实上,以上两公式本是二次几乎正交旋转组合设计的计算公式,但是,对于二次正交旋转组合设计而言,若将其各项设计参数(可查上表)代入公式(1),(2)中,所得到的结果与先对平方项进行中心化处理,再代入其相应的回归系数的计算公式所得的回归系数完全相同;同样的,对于二次通用旋转组合设计而言,若将其各项设计参数(可查上表)代入公式(1)中,所得到的各项参数 e 、 K 、 F 、 E 、 G 等是与查表所得结果完全相同,同时,二次通用旋转组合设计的回归系数的计算公式亦为公式(2)。有兴趣的读者可以自己验证一下。这就进一步证明,二次几乎正交旋转组合设计包含了对二次正交旋转组合设计和二次通用旋转组合设计,统一地,我们不妨称其为二次旋转组合设计。

2.3 计算机程序的统一

统计分析方法统一以后,计算机程序自然也就能够很好地统一,使程序变得简便得多。因为无论是哪一种二次旋转组合设计的类型,只要给出设计参数,便可用以上统一的公式分别计算,从而免去了对二次正交旋转组合设计的平方项进行中心化处理的程序,也免去了对二次通用旋转组合设计进行 e 、 K 、 F 、 E 、 G 等参数的询问与人工查表作答的步骤,使得二次旋转组合设计的计算机程序成为简洁明快、一目了然、适应性强的统一软件。

二次旋转组合设计在设计方案、统计分析、计算机程序上统一以后,除上面已提到的以外,作者以为还有以下几点好处:

首先,在制定设计方案时增加了很大的灵活性,既可以对二水平试验点进行全实施或部分实施,也可以根据需要灵活地选择 m_0 。

其次,我们无须仔细弄清现有的二次旋转组合设计的试验结果到底属于哪一种类型,也不必分不同的类型走不同的分析途径,从而既避免了在分类上可能出现的错误,也为无基础数据可查的使用者提供方便。

最后,如果在试验过程中,中心试验点出现了意想不到的问题,可丢掉出了问题的中心试验点,同样能进行统计分析,而不会使整个试验报废。

参 考 文 献

- 1 中国农业系统工程丛书.农作物栽培技术系统优化设计.济南:山东科学技术出版社,1988,62~85
- 2 萧兵等.农业多因素试验设计与统计分析.长沙:湖南科学技术出版社,1985,332~367
- 3 朱伟勇等.最优设计的计算机证明与构造.沈阳:东北工学院出版社,1987,459~508
- 4 翟婉莹等.农业试验统计BASIC程序.沈阳:辽宁科学技术出版社,1987,276~290

A Preliminary Study on Diversity and Unification of Quadratic Rotatable Combined Design

Jiang Aixiang

(Tianjin Crops Institute, Tianjin 300112)

Abstract Quadratic rotatable combined design has been extensively used as a method of experimental design at present. Because it is varied in scheme and analysis, it isn't convenient for application. The paper attempts to unify the quadratic rotatable combined design in aspect of scheme, analysis and computer program on the basis of grasping the substance of the design and understanding the relations among the various types of the design.

Key words: Orthogonality; Regression coefficient; Rotatable design; Combined design

全国高产优质高效农业发展 学术讨论会在郑州举行

中国农学会、农业部科学技术委员会、中国农业科学院共同主持,于1993年9月21日至24日在郑州召开了“全国高产优质高效农业发展学术讨论会”。农业部副部长刘成果、中国农学会名誉会长卢良恕、中国农科院党组书记沈桂芳以及全国22个省、市、自治区的专家、学者100多人参加了会议。会议根据“国务院关于发展高产优质高效农业的决定”精神,探讨了我国高产优质高效农业发展中的理论和实际问题。并针对当前存在的问题向国务院提出了建议。

代表们认为:“发展”双高一优”农业,是我国农业发展史上的一个重大转折。各地在发展高产优质高效农业方面都已取得了很大成绩。但仍有一些突出的矛盾和深层次的问题,极大地制约着高产优质高效农业的发展。为了更好地贯彻落实国务院关于发展高产优质高效农业的决定,提出了以下建议:(1)国务院和有关部门要尽快完善农业宏观调控体系。(2)国家科委、国家计委和农业部尽快地组织制定“高产优质高效农业发展计划”。(3)国务院设立“高产优质高效农业发展基金”。(4)尽快建立和完善农产品标准体系和监测体系。(5)建立和完善全国性的农业信息体系,并逐步形成农业信息产业。(6)国务院建立国家级的农产品加工、贮藏、运输协调组织,增加对农产品加工储运基础设施的投资等。

(河南省农学会 李俊英 刘亚平报道)