穩健區別試驗設計

蔡旻曉、張殷實
mhtsai@mail.ntpu.edu.tw
國立臺北大學 統計學系

摘要

本論文主要考量在區間$[-1,1]$上有關連續兩個相鄰多項式迴歸模型之區別問題，在此我們給予高次冪模型β $(0\le\beta\le1)$的區別權重，另一方面亦給予$1-\beta$的區別權重於低次冪模型的區別問題中。針對上述考量，我們提出一個多重目的最適性準則(multiple-objective optimality criterion)，稱為Φ_β-最適性準則(Φ_β-optimality criterion)，利用正規動差(canonical moments)技巧，我們求出在此Φ_β-最適性準則下之最適設計的解析解。進一步利用小中取大原則(maximin principle)，我們證明$\Phi_{\beta'}$-最適設計的最小Φ_β-有效性之最大值會發生在$\beta'=\beta^*$，此時對應的$\Phi_{\beta*}$-最適設計即為具有穩健性質的區別設計。最後，我們將所提的$\Phi_{\beta*}$-最適設計$\xi_{\beta*}$與等權重法(即$\beta=1/2$)所建構的$\Phi_{1/2}$-最適設計$\xi_{1/2}$、Φ_1-最適設計ξ_1及Φ_0-最適設計ξ_0進行有效性的比較，結果顯示在不同多項式次冪考量下，我們所提出的$\Phi_{\beta*}$-最適設計無論在多重區別目的或者個別單一區別目的下均有相當穩健的表現。

關鍵字：模型區別，Φ_β-最適性準則，正規動差，小中取大原則。

Robust Discrimination Experimental Design

Min-Hsiao Tsai and Yin-Shi Chang
mhtsai@mail.ntpu.edu.tw
Department of Statistics National Taipei University

Abstract

In this paper, we tackle the problem of discriminating among polynomial regression models with degree k, $k-1$ and $k-2$ on the interval $[-1,1]$. We attempt to construct designs which are efficient for two objectives : (1) to discriminate between models with degree k and $k-1$, and (2) to discriminate between models with degree $k-1$ and $k-2$. For the dual objective we propose a multiple-objective optimality criterion —Φ_β-optimality criterion. By the aid of canonical moments and maximin principle, we derive a robust discrimination design for the described problem.

Keywords : model discrimination, Φ_β-optimality criterion, canonical moments, maximin principle

1. 簡介

在一般多項式迴歸問題中，實驗者若能事先確定多項式的次冪(degree)，則採用最適試驗設計(optimal experimental design)可以提高參數估計時的精確度。然而在實際應用時，實驗者對多項式次冪的選取通常具有不確定性，因此需先從幾個可能的候選模型當中挑選一個較合適的模型，此即模型區別(model discrimination)程序，相關文獻請參考 Hunter and Reiner (1965)，Stigler (1971)，Atkinson and Cox (1974)，Cook and Nachtsheim (1982)，Dette (1994)，Zen and Tsai (2002)及 Tsai and Zen (2004)。

本論文主要考量在區間$[-1,1]$上的多項式迴歸模型

$$E(Y_x)=\theta_0+\theta_1 x+\cdots+\theta_l x^l=\Theta_l^T f_l(x) \text{ ，}$$

其中 $\Theta_l=(\theta_0,\theta_1,\ldots,\theta_l)^T$ 稱為參數向量， $f_l(x)=(1,x,\ldots,x^l)^T$ 稱為迴歸函數向量，$l\in \mathrm{N}$ 且 $x\in\aleph=[-1,1]$。在非逐步試驗設計程序(non-sequential design procedure)的架構下，本研究考慮連續兩個相鄰多項式迴歸模型之區別問題，冀望在保有較高區別能力的要求下，同時考量下列兩個目的：(Ⅰ)區別k次冪模型與$k-1$次冪模型何者合適，(Ⅱ)區別$k-1$次冪模型與$k-2$次冪模型何者合適。為了滿足上述雙重目的，我們定義一個新的多重目的最適性準則(multiple-objective optimality criterion) —Φ_β-最適性準則(Φ_β-optimality criterion)，依據該準則推導對應最適設計，並針對所提出之最適設計與其他相關設計之有效性(efficiency)進行比較。

本節最後，簡述本論文之架構如下：在第 2 節中，主要陳述一般常用的模型區別準則，並提出一個針對多個模型區別問題時的最適性準則。在第 3 節中，首先介紹正規動差(canonical moments)的定義及一些相關的結果，並據此建構在不同最適性準則下的最適設計；接下來為了進一步求得具有穩健性質的區別設計，我們以小中取大原則(maximin principle)為基礎，推導出一些重要的定理。第 4 節則是將本論文中所提出的最適設計與一些傳統上常用的最適設計進行數值比較。最後，第 5 節為結論，而部分定理的證明則附於附錄 A 中。

2. Φ_β-最適性準則

在本研究中，我們稱設計ξ為在設計空間(design space)$\aleph=[-1,1]$上的一個機率測度，而其資訊矩陣(information matrix)定義如下：

$$M_l(\xi)=\int_{\aleph} f_l(x)f_l^T(x)d\xi(x) \text{ 。}$$

透過基本的矩陣代數運算可得參數向量Θ_l的最小平方估計量之共變異數矩陣將與$M_l^{-1}(\xi)$成

比例。在非逐步試驗設計程序考量下，針對連續兩個相鄰多項式迴歸模型的區別問題，會有兩個目的函數被同時考慮進來。為了符號表示上的方便，我們令 $M_k(\xi)$、$M_{k-1}(\xi)$ 及 $M_{k-2}(\xi)$ 分別表示 k 次冪模型、$k-1$ 次冪模型及 $k-2$ 次冪模型成立時所對應的資訊矩陣。在考量目的(Ⅰ)時，應先檢定模型中之 $\theta_k = 0$ 是否成立，故第一個目的函數可表示為：

$$\phi_k(\xi) = \left[M_k^{-1}(\xi)_{(k+1,k+1)} \right]^{-1} = \frac{|M_k(\xi)|}{|M_{k-1}(\xi)|} \text{，} \tag{2.1}$$

其中 $M_{(i,i)}$ 表示方陣 M 之 (i,i) 元素，$|\ \ |$ 表示行列式。考量目的(Ⅱ)時，應檢定模型中之 $\theta_{k-1} = 0$ 是否成立，則第二個目的函數可表示為：

$$\phi_{k-1}(\xi) = \left[M_{k-1}^{-1}(\xi)_{(k,k)} \right]^{-1} = \frac{|M_{k-1}(\xi)|}{|M_{k-2}(\xi)|} \text{。} \tag{2.2}$$

由於本論文中所欲建構的區別設計需同時滿足目的(Ⅰ)及目的(Ⅱ)的要求，因此本研究將採用加權幾何平均的方式建構新的目的函數，亦即給予低次冪模型區別問題 α 的區別權重，而另一方面亦給予 β 的區別權重於高次冪模型的區別問題中，則此多重目的函數可表示為：

$$\Phi_{\alpha,\beta}(\xi) = \left[\phi_{k-1}(\xi)\right]^{\alpha} \left[\phi_k(\xi)\right]^{\beta} \text{，}$$

其中 $0 \le \alpha, \beta \le 1$。若進一步設定 $\alpha + \beta = 1$，則由於 α 可以 $1-\beta$ 來表示，故上述目的函數可進一步改寫為：

$$\Phi_{\beta}(\xi) = \left[\phi_{k-1}(\xi)\right]^{1-\beta} \left[\phi_k(\xi)\right]^{\beta} \text{，} 0 \le \beta \le 1 \text{，} \tag{2.3}$$

我們稱此多重目的最適性準則為 Φ_β-最適性準則，而其對應之 Φ_β-最適設計，記作 ξ_β，需滿足

$$\Phi_\beta(\xi_\beta) = \max_{\xi \in \Xi} \left\{ \Phi_\beta(\xi) \right\} \text{，}$$

其中 Ξ 為所有在設計空間 $\aleph = [-1,1]$ 上的機率測度所形成的集合。有關極大化目的函數 $\Phi_\beta(\xi)$ 及求解對應的 Φ_β-最適設計之問題將於第 3 節中利用正規動差技巧來處理。另外值得注意的是由於本研究中所採用的行列式準則具有尺度不變性，因此可利用非奇異的線性轉換將所求得的設計由區間 $[-1,1]$ 轉換至任意區間 $[a,b]$ 上，其統計性質將不受任何影響。

3. 穩健區別設計之建構及主要結果

3.1 正規動差及Φ_β-最適設計

為了建構Φ_β-最適設計，我們需要運用大量的正規動差技巧，故於本小節中我們首先介紹正規動差的定義並陳述一些於本研究中所需用到的重要結果，其他有關正規動差的理論及其應用，請參考 Skibinsky (1967, 1968, 1969, 1986), Studden (1980, 1982) , Lau (1983), Lau and Studden (1985)及 Dette and Studden (1997)。

令設計ξ表示在區間$[-1,1]$上的一個機率測度，其各階原動差為$c_j=\int_{\aleph} x^j d\xi(x)$，$j=1,2,\ldots$，則設計$\xi$的各階正規動差定義如下：

$$p_j=\frac{c_j-c_j^-}{c_j^+-c_j^-},\quad j=1,2,\ldots,$$

其中

$$c_j^+=\max\left\{\int_{\aleph} x^j d\mu(x)\ \Big|\ \int_{\aleph} x^i d\mu(x)=c_i,\ i\le j-1,\ \mu\in\Xi\right\},\quad j\ge 1,$$

$$c_j^-=\min\left\{\int_{\aleph} x^j d\mu(x)\ \Big|\ \int_{\aleph} x^i d\mu(x)=c_i,\ i\le j-1,\ \mu\in\Xi\right\},\quad j\ge 1。$$

由上述定義可知$0\le p_j\le 1$，且當$c_j^+-c_j^-=0$時p_j不可定義。假設$i=\inf\{l:c_l^+-c_l^-=0\}$，則$0<p_j<1,\ j=1,\ldots,i-2$，且$p_{i-1}$必為 0 或 1，此時設計$\xi$將具有有限個數的支撐點(參見 Skibinsky, 1986)。根據 Lau and Studden (1985)的結果，對任意設計$\xi\in\Xi$，其資訊矩陣的行列式可以正規動差形式表示如下

$$|M_l(\xi)|=\prod_{j=1}^{l}(2^2 q_{2j-2}p_{2j-1}q_{2j-1}p_{2j})^{l-j+1}, \tag{3.1.1}$$

其中$q_0=1,\ q_j=1-p_j,\ j=1,\ldots,2l$。將(3.1.1)分別以$l=k$, $l=k-1$及$l=k-2$代入(2.1)及(2.2)中，可得下列結果。

引理 3.1.1 對任意設計 $\xi \in \Xi$，單一目的函數 $\phi_k(\xi)$ 及 $\phi_{k-1}(\xi)$ 可以正規動差形式分別表示如下

$$\phi_k(\xi) = \prod_{j=1}^{k} (2^2 q_{2j-2} p_{2j-1} q_{2j-1} p_{2j}) \quad \text{及} \quad \phi_{k-1}(\xi) = \prod_{j=1}^{k-1} (2^2 q_{2j-2} p_{2j-1} q_{2j-1} p_{2j}) \text{。}$$

進一步將引理 3.1.1 之結果代入(2.3)中，我們可得下列結果。

引理 3.1.2 對任意設計 $\xi \in \Xi$，多重目的函數 $\Phi_\beta(\xi)$ 可以正規動差形式表示如下：

$$\Phi_\beta(\xi) = q_0 (p_{2k})^\beta (2^2 p_{2k-1} q_{2k-1})^\beta (p_{2k-2} q_{2k-2}^\beta) \prod_{j=1}^{k-1} (2^2 p_{2j-1} q_{2j-1}) \prod_{j=1}^{k-2} (p_{2j} q_{2j}),\ 0 \le \beta \le 1 \text{。} \quad (3.1.2)$$

證明:

$$\begin{aligned}\Phi_\beta(\xi) &= [\phi_k(\xi)]^\beta [\phi_{k-1}(\xi)]^{1-\beta} = \left[\prod_{j=1}^{k} (2^2 q_{2j-2} p_{2j-1} q_{2j-1} p_{2j})\right]^\beta \left[\prod_{j=1}^{k-1} (2^2 q_{2j-2} p_{2j-1} q_{2j-1} p_{2j})\right]^{1-\beta} \\ &= q_0 (p_{2k})^\beta (p_{2k-2})^{1-\beta} (2^2 p_{2k-1} q_{2k-1})^\beta (p_{2k-2} q_{2k-2})^\beta \prod_{j=1}^{k-1} (2^2 p_{2j-1} q_{2j-1}) \prod_{j=1}^{k-2} (p_{2j} q_{2j}) \\ &= q_0 (p_{2k})^\beta (2^2 p_{2k-1} q_{2k-1})^\beta (p_{2k-2} q_{2k-2}^\beta) \prod_{j=1}^{k-1} (2^2 p_{2j-1} q_{2j-1}) \prod_{j=1}^{k-2} (p_{2j} q_{2j}),\ 0 \le \beta \le 1 \text{。}\end{aligned}$$

接下來，為了求解對應的 Φ_β-最適設計，我們需要極大化(3.1.2)，下列引理將有助於後續推導。

引理 3.1.3 令函數 $f(x) = x^a (1-x)^b$，$0 \le x \le 1$，其中 a 與 b 為介於 0 與 1 之間的常數，則 $f(x)$ 在 $x = a/(a+b)$ 處有唯一的極大值。

證明:令 $g(x) = \ln f(x) = a\ln(x) + b\ln(1-x)$，則我們有

$$g'(x) = \frac{a}{x} - \frac{b}{1-x} \quad \text{及} \quad g''(x) = -\left[\frac{a}{x^2} + \frac{b}{(1-x)^2}\right], x \in (0,1) \text{。}$$

令 $g'(x) = 0$ 可得唯一的臨界數 $x = a/(a+b)$，由於 $g''(a/(a+b)) < 0$，所以 $g(x)$ 在 $x = a/(a+b)$ 處有唯一極大值，又因 $f(x) = \exp\{g(x)\}$，因此 $f(x)$ 在 $x = a/(a+b)$ 處亦有唯一極大值，故得證。

令 $f_l(p_l) = p_l^{a_l} q_l^{b_l} = p_l^{a_l} (1-p_l)^{b_l}, l = 0, \ldots, 2k$，則(3.1.2)可進一步改寫成 $\Phi_\beta(\xi) = \prod_{l=0}^{2k} f_l(p_l)$，直接將引理 3.1.3 的結果應用於每個 $f_l(p_l)$ 中，可得下列結果。

引理 3.1.4 對任意次冪 $k \geq 2$ ，Φ_β-最適設計 ξ_β 的正規動差解為

$$q_0^{[\beta]} = p_{2k}^{[\beta]} = 1,\;\; p_{2j-1}^{[\beta]} = \frac{1}{2},\; j = 1,\ldots,k\;,\;\; p_{2j}^{[\beta]} = \frac{1}{2},\; j = 1,\ldots,k-2 \;\text{ 及 }\; p_{2k-2}^{[\beta]} = \frac{1}{1+\beta} \text{ 。}$$

值得注意的是引理 3.1.4 中 Φ_β-最適設計 ξ_β 的最末階正規動差解 $p_{2k}^{[\beta]}$ 為 1，表示其對應的最適設計具有 $k+1$ 個支撐點(參見 Skibinsky, 1986)，此外所有奇數階正規動差皆為 $1/2$ 則表示所對應的最適設計必為一對稱於原點的設計(參見 Lau, 1983)。另外，當 k 趨近無窮大時，引理 3.1.4 中所有的正規動差均會趨近 $1/2$ ，依據 Dette and Studden (1997)的結果，我們可得下列引理。

引理 3.1.5 Φ_β-最適設計 ξ_β 會弱收斂(weak convergence)至 $\tilde{\xi}$ ，其中 $\tilde{\xi}$ 具有反正弦分配(arc-sine distribution)，亦即

$$\tilde{\xi}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \;,\; -1 < x < 1 \text{ 。}$$

為了提供實務上可使用的最適設計，我們必須將設計 ξ_β 的正規動差解轉成機率測度的形式，下列引理提供一個將正規動差轉換成所對應試驗設計的方法，相關細節請參見 Lau (1988) 及 Dette (1994)。

引理 3.1.6 令設計 ξ 表示在設計空間 $\aleph = [-1,1]$ 上的機率測度，假設其正規動差滿足：$p_{2j} \in (0,1),\; j = 1,\ldots,k-1;\; p_{2j-1} = 1/2,\; j = 1,\ldots,k$ 且 $p_{2k} = 1$ ，則設計 ξ 將具有 $k+1$ 個支撐點 $x_0, x_1, \ldots, x_k$ ，分別為 $(x^2-1)Q_{k-1}(x) = 0$ 由小至大的根，而設計 ξ 在每個支撐點上的權重為

$$\xi(x_i) = \frac{P_k(x_i)}{(d[(x^2-1)Q_{k-1}(x)]/dx)|_{x=x_i}},\; i = 0,\ldots,k \;，$$

其中多項式 $\{P_l(x)\}_{l=0}^{k}$，$\{Q_l(x)\}_{l=0}^{k-1}$ 的遞迴式定義為：

$$P_{l+1}(x) = xP_l(x) - q_{2l}\,p_{2l+2}\,P_{l-1}(x),\;\; l = 0,\ldots,k-1 \;，$$

$$Q_{l+1}(x) = xQ_l(x) - p_{2l}\,q_{2l+2}\,Q_{l-1}(x),\;\; l = 0,\ldots,k-2 \;，$$

且起始值分別為 $P_{-1}(x) = Q_{-1}(x) = 0$ 及 $P_0(x) = Q_0(x) = 1$ 。

本小節最後，我們將以 $k=4$ 及 $\beta=1/2$ 為例，說明如何建構對應的 Φ_β-最適設計。首先利用引理 3.1.4，我們可求得 Φ_β-最適設計之正規動差解為

$$(p_1,p_2,p_3,p_4,p_5,p_6,p_7,p_8)=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{2}{3},\frac{1}{2},1\right),$$

由於其形式滿足引理 3.1.6 的條件，故可直接套用引理 3.1.6 中的遞迴公式，經計算化簡後可得對應的最適設計為 $\xi(\pm 1)=0.1429,\ \xi(\pm 0.6455)=0.2571$ 及 $\xi(0)=0.2000$。

3.2 Φ_β-最適設計之有效性

在 3.1 節中，針對任意給定的區別權重 $\beta\in[0,1]$，我們可利用正規動差技巧以及引理 3.1.6 的轉換公式求出所對應的 Φ_β-最適設計 ξ_β。在本小節中我們有興趣的是不同的 $\Phi_{\beta'}$-最適設計 $\xi_{\beta'}$ 在不同 Φ_β-最適性準則下的行為表現。為了進一步作量化的探討，我們定義設計 $\xi_{\beta'}$ 之 Φ_β-有效性如下：

$$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})=\frac{\Phi_\beta(\xi_{\beta'})}{\Phi_\beta(\xi_\beta)},\ \beta,\beta'\in[0,1]。 \tag{3.2.1}$$

將引理 3.1.4 的正規動差序列 $\{p_j^{[\beta]}\}$ 代入(3.1.2)及(3.2.1)中可得下列結果。

引理 3.2.1 對任意給定 $\beta'\in[0,1]$ 及 $k\geq 2$，$\Phi_{\beta'}$-最適設計 $\xi_{\beta'}$ 的 Φ_β-有效性可以正規動差形式表示如下:

$$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})=\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta']}}{p_{2k-2}^{[\beta]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[\beta]}}\right)^\beta,\ \beta,\beta'\in[0,1],$$

其中 $p_{2k-2}^{[\cdot]}$ 如引理 3.1.4 所述。

證明：由引理 3.1.2 及(3.2.1)可知，在設計空間 $\aleph=[-1,1]$ 上的任意對稱設計 $\xi_\cdot$ 其 Φ_β-有效性為：

$$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_\cdot)=\frac{\Phi_\beta(\xi_\cdot)}{\Phi_\beta(\xi_\beta)}=\frac{\left(p_{2k}^{[\cdot]}\right)^\beta(1/4)^{k-2}\left(p_{2k-2}^{[\cdot]}\right)\left(q_{2k-2}^{[\cdot]}\right)^\beta}{\left(p_{2k}^{[\beta]}\right)^\beta(1/4)^{k-2}\left(p_{2k-2}^{[\beta]}\right)\left(q_{2k-2}^{[\beta]}\right)^\beta}=\left(p_{2k}^{[\cdot]}\right)^\beta\left(\frac{p_{2k-2}^{[\cdot]}}{p_{2k-2}^{[\beta]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\cdot]}}{q_{2k-2}^{[\beta]}}\right)^\beta,$$

最後再以 $\{p_j^{[\beta']}\}$ 取代 $\{p_j^{[\cdot]}\}$ 即可得

$$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})=\frac{\Phi_\beta(\xi_{\beta'})}{\Phi_\beta(\xi_\beta)}=\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta']}}{p_{2k-2}^{[\beta]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[\beta]}}\right)^\beta。$$

為了進一步暸解 $\Phi_{\beta'}$-最適設計 $\xi_{\beta'}$ 在不同 Φ_{β}-最適性準則下有效性的行為表現，圖 3.1 將以 $k=4$ 為例，繪出不同 $\Phi_{\beta'}$-最適設計 $\xi_{\beta'}$ 的 Φ_{β}-有效性之等高線圖。由圖 3.1 很明顯可看出當 β 愈遠離 β' 時，$\Phi_{\beta}\text{-eff}(\xi_{\beta'})$ 也隨之變小，因此，在任意給定 β' 的情況下，有關 $\Phi_{\beta}\text{-eff}(\xi_{\beta'})$ 的極值問題便是一個值得關注的課題，我們將在下一小節中做更進一步的探討。

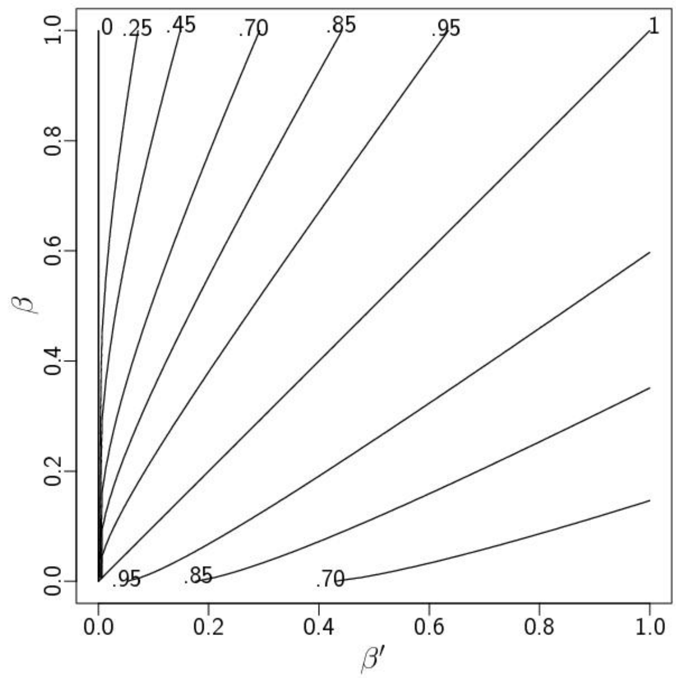

圖 3.1： 當 $k=4$ 時，$\Phi_{\beta'}$-最適設計的 Φ_{β}-有效性之等高線圖

3.3 Φ_{β^*}-最適設計

在非逐步試驗設計程序架構下，針對連續兩個相鄰多項式迴歸模型的區別問題，若實驗者本身對區別權重 β 具有主觀信念或先驗訊息，則利用 3.1 節及 3.2 節的結果，便可將對應的 Φ_{β}-最適設計建構出來。然而在實際應用上，實驗者對此區別權重 β 的選取通常不具任何概念，因此如何挑選一個好的區別權重 β 便是一個值得探討的問題。在本小節中，我們試圖利用小中取大原則來挑選一個具有穩健性質的區別權重 β^*，並再次利用正規動差技巧求解對應的 Φ_{β^*}-最適設計。

為了處理上述穩健區別設計的問題，進一步探討不同 $\Phi_{\beta'}$-最適設計的最小 Φ_{β}-有效性將扮演重要的角色。底下引理為證明定理 3.3.2 時所需用到之結果，而定理 3.3.2 的證明則附於附錄 A 中。

引理 3.3.1 $p_{2k-2}^{[\beta]}$ 為 β 的嚴格遞減函數。

證明: $\because\ p_{2k-2}^{[\beta]}=\dfrac{1}{1+\beta}\ \therefore\ \dfrac{d}{d\beta}(p_{2k-2}^{[\beta]})=\dfrac{-1}{(1+\beta)^2}<0,\ \forall\beta\in[0,1]$，故 $p_{2k-2}^{[\beta]}$ 為 β 的嚴格遞減函數。

定理 3.3.2 對任意 $k\geq 2$ ，

(i) 給定 $\beta'\in[0,1]$，$\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 為一個 β 的函數，其在區間 $[0,\beta')$ 上為嚴格遞增函數且在區間 $(\beta',1]$ 上為嚴格遞減函數

(ii) 給定 $\beta\in[0,1]$ ，$\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 為一個 β' 的函數，其在區間 $[0,\beta)$ 上為嚴格遞增函數且在區間 $(\beta,1]$ 上為嚴格遞減函數。

由定理 3.3.2 (i)可知對於任意給定的 β' ，$\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 的最小值會發生在 $\beta=0$ 或 $\beta=1$ 時。我們想進一步判斷此二者中何者是最小的，可令 $h(\beta')$ 表示 $\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 和 $\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 的比值，將引理 3.2.1 的結果代入 $h(\beta')$ 中可得

$$h(\beta')=\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[0]}}\right)\left(\frac{p_{2k-2}^{[0]}}{p_{2k-2}^{[1]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[0]}}{q_{2k-2}^{[1]}}\right), \tag{3.3.1}$$

註：兩個不等式 $\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})\geq\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 和 $h(\beta')\geq 1$ 是等價的。

由定理 3.3.2 (ii)與引理 3.2.1，我們得知 $\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 在區間 $[0,1]$ 上為連續且嚴格遞增函數，而 $\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 在區間 $[0,1]$ 上為連續且嚴格遞減函數，因此 $h(\beta')=\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})\big/\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 在區間 $[0,1]$ 上為連續且嚴格遞增函數。另一方面，由於 $0<\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_0)<1=\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_0)$ 且 $0<\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_1)<1=\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_1)$ ，故可得 $h(0)<1$ 與 $h(1)>1$ 。利用中間值定理與 $h(\beta')$ 的單調性質，我們可以保證方程式 $h(\beta')=1$ 的根必定存在且唯一，最後，結合定理 3.3.2 (ii)之結果，我們可得下列定理。

定理 3.3.3 對任意給定 $\beta'\in[0,1]$ 及 $k\geq 2$ ，

$$\min_{0\leq\beta\leq1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})\right\}=\begin{cases}\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'}), & \beta'\geq\beta^*\\ \Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'}), & \beta'<\beta^*\end{cases},$$

其中 $\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 和 $\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})$ 如同引理 3.2.1 所述，而 β^* 為(3.3.1)中 $h(\beta')=1$ 的根。

為了對定理 3.3.3 有更進一步的瞭解，圖 3.2 以 $k=4$ 為例，繪出不同 $\Phi_{\beta'}$-最適設計 $\xi_{\beta'}$ 在 Φ_1-最適性準則以及 Φ_0-最適性準則下的有效性值，而圖中實線部份即為定理 3.3.3 中所陳述的 $\min_{0\le\beta\le1}\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})\}$。由圖 3.2 不難看出欲求得具有穩健性質的區別設計，這些最小 Φ_β-有效性中的最大值扮演著關鍵的角色。由定理 3.3.2 (ii)可知 $\Phi_1\text{-eff}(\xi_{\beta'})$ 為 β' 的嚴格遞增函數，另一方面 $\Phi_0\text{-eff}(\xi_{\beta'})$ 為 β' 的嚴格遞減函數，再結合定理 3.3.3 的結果，我們可得下列定理。

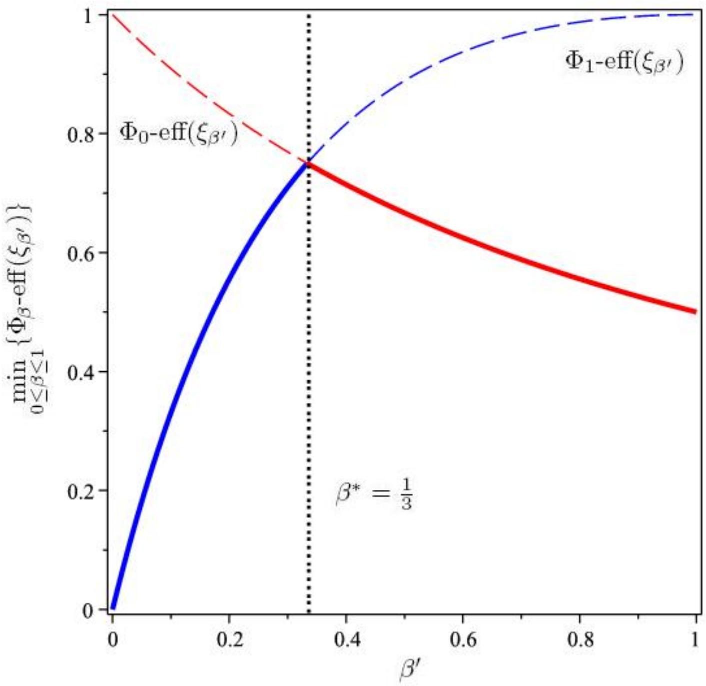

圖 3.2 : 當 $k=4$ 時，設計 $\xi_{\beta'}$ 的最小 Φ_β-有效性

定理 3.3.4 對任意 $k\ge2$，$\min_{0\le\beta\le1}\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})\}$ 為 β' 的一個先增後減函數，且當 $\beta'=\beta^*$ 時，可得 $\min_{0\le\beta\le1}\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})\}$ 的最大值，亦即

$$\beta^*=\arg\left\{\max_{0\le\beta'\le1}\min_{0\le\beta\le1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})\right\}\right\},$$

其中 β^* 為(3.3.1)中 $h(\beta')=1$ 的根。

將引理 3.1.4 及引理 3.2.1 的結果直接套用於定理 3.3.4 的 $\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})$ 中可得下列結果，相關的證明則附於附錄 A 中。

定理 3.3.5 對任意 $k \ge 2$ ，$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})$ 的小中取大解為

$$\beta^* = \arg\left\{\max_{0\le\beta'\le1}\min_{0\le\beta\le1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})\right\}\right\} = \frac{1}{3} ,$$

且

$$\max_{0\le\beta'\le1}\min_{0\le\beta\le1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})\right\} = \min_{0\le\beta\le1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta^*})\right\} = \frac{3}{4} 。$$

在非逐步試驗設計程序架構下，欲處理連續兩個相鄰多項式迴歸模型之區別問題時，由於大多數的實驗者對於區別權重 β 的挑選通常不具任何概念，因此經常使用等權重法，即 $\beta = 1/2$ 來建構對應的區別設計，而定理 3.3.5 的結果則是在「小中取大原則」基礎下所求得的最適區別權重，實驗者若挑選對應的 Φ_{β^*}-最適設計 ξ_{β^*} ，則可保證無論採用何種 Φ_β-最適性準則來進行評估，其對應的 Φ_β-有效性至少可達 0.75 以上。最後，為了提供實驗者在實際應用時之參考，表 3.1 列出次冪 $k = 2,3,4,5$ 時，由小中取大法及等權重法所建構之區別設計 ξ_{β^*} 及 $\xi_{1/2}$ 的支撐點與權重。有關設計 ξ_{β^*} 與其它相關設計之有效性的優劣比較將於下一節中探討。

表 3.1：設計 ξ_{β^*} 及 $\xi_{1/2}$ 的支撐點與權重，$k = 2,3,4,5$

k	ξ_{β^*}	$\xi_{1/2}$
2	$\begin{pmatrix} \pm1 & 0 \\ .3750 & .2500 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \pm1 & 0 \\ .3333 & .3333 \end{pmatrix}$
3	$\begin{pmatrix} \pm1 & \pm.3536 \\ .2143 & .2857 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \pm1 & \pm.4082 \\ .2000 & .3000 \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} \pm1 & \pm.6124 & 0 \\ .1500 & .2667 & .1667 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \pm1 & \pm.6455 & 0 \\ .1429 & .2571 & .2000 \end{pmatrix}$
5	$\begin{pmatrix} \pm1 & \pm.7551 & \pm.2341 \\ .1154 & .2203 & .1643 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \pm1 & \pm.7726 & \pm.2642 \\ .1111 & .2120 & .1769 \end{pmatrix}$

註：矩陣的第一列代表設計的支撐點，第二列代表支撐點的權重。

4. 數值比較

在 3.3 節中我們利用小中取大原則建構具有穩健性質的區別設計 ξ_{β^*}，而在本節中我們將進一步比較設計 ξ_{β^*} 與設計 $\xi_{1/2}$ ，ξ_1 及 ξ_0 在個別單一目的及多重目的考量下有效性的優劣表現。直接將區別權重以 $\beta = \beta^*$ ，$\beta = 0$ 及 $\beta = 1$ 分別代入引理 3.2.1 中可得下列結果。

定理 4.1 對 $k \geq 2$ ，任意對稱設計 $\xi_{\cdot}$ 之 Φ_{β^*}-, Φ_0-及 Φ_1-有效性可以正規動差形式表示如下

$$\Phi_{\beta^*}\text{-eff}(\xi_{\cdot}) = \frac{\Phi_{\beta^*}(\xi_{\cdot})}{\Phi_{\beta^*}(\xi_{\beta^*})} = \left(p_{2k}^{[\cdot]}\right)^{\beta^*}\left(\frac{p_{2k-2}^{[\cdot]}}{p_{2k-2}^{[\beta^*]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\cdot]}}{q_{2k-2}^{[\beta^*]}}\right)^{\beta^*},$$

$$\Phi_0\text{-eff}(\xi_{\cdot}) = \frac{\Phi_0(\xi_{\cdot})}{\Phi_0(\xi_0)} = \left(\frac{p_{2k-2}^{[\cdot]}}{p_{2k-2}^{[0]}}\right),$$

$$\Phi_1\text{-eff}(\xi_{\cdot}) = \frac{\Phi_1(\xi_{\cdot})}{\Phi_1(\xi_1)} = \left(p_{2k}^{[\cdot]}\right)\left(\frac{p_{2k-2}^{[\cdot]}}{p_{2k-2}^{[1]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\cdot]}}{q_{2k-2}^{[1]}}\right),$$

其中設計 $\xi_{\cdot}$ 為在 Ξ 中的任意對稱分配，而 $p_{2j}^{[\cdot]}$ 則如引理 3.1.4 所述。

本節最後以 $k=3$ 為例，計算設計 ξ_{β^*} 、 $\xi_{1/2}$ 、 ξ_1 及 ξ_0 的支撐點與權重以及其所對應的 Φ_{β^*}-， Φ_0-及 Φ_1-有效性，其結果如表 4.1 所示。很明顯地，設計 ξ_0 除了在 Φ_0-最適性準則下表現最優外，在其它 Φ_{β^*}-及 Φ_1-最適性準則下的表現最差。設計 $\xi_{1/2}$ 的 Φ_{β^*}-有效性為 0.9783 ，但其 Φ_0-有效性只有 0.6667 表現略差。設計 ξ_1 的 Φ_{β^*}-有效性為 0.8399 ，雖然其 Φ_1-有效性為 1，但其 Φ_0-有效性卻只有 0.5 表現不甚理想。而本論文所提之設計 ξ_{β^*} 的 Φ_{β^*}-有效性為 1，且其 Φ_0-及 Φ_1-有效性均可達 0.75 ，是以表現最為穩健。由於設計 ξ_{β^*} 無論是在自身的準則下或是在其它兩個單一目的準則下其有效性都有不錯的表現，是以設計 ξ_{β^*} 不失為一個具有穩健性質的區別設計。

表 4.1： 當 $k=3$ 時，各設計的支撐點與權重及其對應的 Φ_{β^*}-， Φ_0-及 Φ_1-有效性

設計	Φ_{β^*}-有效性	Φ_0-有效性	Φ_1-有效性
$\xi_{\beta^*} = \begin{pmatrix} -1 & -.3536 & .3536 & 1 \\ .2143 & .2857 & .2857 & .2143 \end{pmatrix}$	1	0.7500	0.7500
$\xi_{1/2} = \begin{pmatrix} -1 & -.4082 & .4082 & 1 \\ .2000 & .3000 & .3000 & .2000 \end{pmatrix}$	0.9783	0.6667	0.8889
$\xi_1 = \begin{pmatrix} -1 & -.5000 & .5000 & 1 \\ .1667 & .3333 & .3333 & .1667 \end{pmatrix}$	0.8399	0.5000	1
$\xi_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ .2500 & .5000 & .2500 \end{pmatrix}$	0	1	0

5. 結論

針對連續兩個相鄰多項式迴歸模型之區別問題，我們提出一個多重目的最適性準則，稱為Φ_β-最適性準則。為了建構在此一新準則下對模型區別問題具有穩健性質的最適設計，我們將小中取大原則運用於此一準則中，同時亦證明任意$\Phi_{\beta'}$-最適設計的最小Φ_β-有效性之最大值會發生在$\beta'=\beta^*$，此時對應的Φ_{β^*}-最適設計即為具有穩健性質的區別設計。除此之外，我們亦證明了β^*的解恆為$1/3$，其值並不會受到多項式次冪k的影響，且其對應的最小Φ_β-有效性恆為$3/4$，此代表實驗者若選用設計$\xi_{1/3}$來進行模型區別程序，則無論採用何種Φ_β-最適性準則來進行效率評估都保證有0.75的有效性，相較於其他區別設計而言更具穩健性質。

附錄 A

定理 3.3.2 的證明:

令β_1，β_2及β'為任意介於0與1之間的實數，由引理 3.2.1 知

$$\frac{\Phi_{\beta_1}\text{-eff}(\xi_{\beta'})}{\Phi_{\beta_2}\text{-eff}(\xi_{\beta'})}=\frac{\left(\dfrac{p_{2k-2}^{[\beta']}}{p_{2k-2}^{[\beta_1]}}\right)\left(\dfrac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[\beta_1]}}\right)^{\beta_1}}{\left(\dfrac{p_{2k-2}^{[\beta']}}{p_{2k-2}^{[\beta_2]}}\right)\left(\dfrac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[\beta_2]}}\right)^{\beta_2}}=\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta_2]}}{p_{2k-2}^{[\beta_1]}}\right)\frac{\left(q_{2k-2}^{[\beta_2]}\right)^{\beta_2}}{\left(q_{2k-2}^{[\beta_1]}\right)^{\beta_1}}\left(q_{2k-2}^{[\beta']}\right)^{\beta_1-\beta_2}$$

$$=\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[\beta_2]}}\right)^{\beta_1-\beta_2}\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta_2]}}{p_{2k-2}^{[\beta_1]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta_2]}}{q_{2k-2}^{[\beta_1]}}\right)^{\beta_1}=\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[\beta_2]}}\right)^{\beta_1-\beta_2}\Phi_{\beta_1}\text{-eff}(\xi_{\beta_2})\text{。}\quad\text{(A.1)}$$

(i) 對任意給定β'，由引理 3.3.1 知$p_{2k-2}^{[\cdot]}$為一嚴格遞減函數，故可得在$\beta_2<\beta'$時$q_{2k-2}^{[\beta']}/q_{2k-2}^{[\beta_2]}$大於$1$。因此，當$\beta_1<\beta_2$時，$\Phi_{\beta_1}\text{-eff}(\xi_{\beta'})<\Phi_{\beta_2}\text{-eff}(\xi_{\beta'})$。亦即對於任意給定$\beta'$，$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})$在$\beta\in[0,\beta')$時為$\beta$的嚴格遞增函數。相反地，當$\beta_2>\beta'$，則$q_{2k-2}^{[\beta']}/q_{2k-2}^{[\beta_2]}$小於$1$，因此，對於任意給定$\beta'$，$\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta'})$在$\beta\in(\beta',1]$時為$\beta$的嚴格遞減函數，故得證。

(ii) 對於給定β的情況下，將(A.1)中等號左右兩邊同乘上$\Phi_{\beta_2}\text{-eff}(\xi_{\beta'})/\Phi_{\beta_1}\text{-eff}(\xi_{\beta_2})$，再以$\beta_1$取代$\beta'$，以$\beta$取代$\beta_1$，我們可得

$$\frac{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta_1})}{\Phi_\beta\text{-eff}(\xi_{\beta_2})}=\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta_1]}}{q_{2k-2}^{[\beta_2]}}\right)^{\beta-\beta_2}\Phi_{\beta_2}\text{-eff}(\xi_{\beta_1})\text{，}$$

最後，再利用與(i)中類似的討論方式，即可得證。

定理 3.3.5 的證明:

(i) 令

$$h(\beta')=\frac{\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})}{\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})}=\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta']}}{p_{2k-2}^{[1]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[1]}}\right)\Bigg/\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta']}}{p_{2k-2}^{[0]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[0]}}\right)^0=\left(\frac{p_{2k-2}^{[0]}}{p_{2k-2}^{[1]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta']}}{q_{2k-2}^{[1]}}\right)$$

$$=\left(\frac{p_{2k-2}^{[0]}}{p_{2k-2}^{[1]}}\right)\left(\frac{1-p_{2k-2}^{[\beta']}}{1-p_{2k-2}^{[1]}}\right)=\left(\frac{1}{1+0}\Big/\frac{1}{1+1}\right)\left(\frac{\beta'}{1+\beta'}\Big/\frac{1}{1+1}\right)=4\left(\frac{\beta'}{1+\beta'}\right),$$

進一步求解方程式 $h(\beta^*)=1$ 可得

$$4\left(\frac{\beta^*}{1+\beta^*}\right)=1 \quad\Rightarrow\quad \frac{\beta^*}{1+\beta^*}=\frac{1}{4} \quad\Rightarrow\quad \beta^*=\frac{1}{3}\text{。}$$

(ii) 由引理 3.2.1 知

$$\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta^*})=\left(\frac{p_{2k-2}^{[\beta^*]}}{p_{2k-2}^{[\beta]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[\beta^*]}}{q_{2k-2}^{[\beta]}}\right)^\beta, \qquad \text{(A.2)}$$

分別將 $\beta=1$，$\beta=0$ 及 $\beta^*=1/3$ 代入(A.2)，可得

$$\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{1/3})=\left(\frac{p_{2k-2}^{[1/3]}}{p_{2k-2}^{[1]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[1/3]}}{q_{2k-2}^{[1]}}\right)=\left(\frac{1}{1+1/3}\Big/\frac{1}{1+1}\right)\left(\frac{1/3}{1+1/3}\Big/\frac{1}{1+1}\right)=\frac{3}{4}$$

及

$$\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{1/3})=\left(\frac{p_{2k-2}^{[1/3]}}{p_{2k-2}^{[0]}}\right)\left(\frac{q_{2k-2}^{[1/3]}}{q_{2k-2}^{[0]}}\right)^0=\left(\frac{1}{1+1/3}\Big/\frac{1}{1+0}\right)=\frac{3}{4},$$

最後由定理 3.3.4 知

$$\max_{0\le\beta'\le1}\min_{0\le\beta\le1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta'})\right\}=\min_{0\le\beta\le1}\left\{\Phi_\beta\text{-eff}\,(\xi_{\beta^*})\right\}=\min\left\{\Phi_1\text{-eff}\,(\xi_{\beta^*}),\,\Phi_0\text{-eff}\,(\xi_{\beta^*})\right\}=\frac{3}{4}\text{。}$$

參考文獻

Atkinson, A. C. and Cox, D. R. (1974). Planning experiments for discriminating between models (with discussion). *J. Roy. Statist. Soc.* Ser. B, 36, 321-348.

Cook, R. D. and Nachtsheim, C. J. (1982). Model robust, linear optimal designs. *Technometrics*, 24, 49-54.

Dette, H. (1994). Discrimination designs for polynomial regression on compact intervals. *Ann. Statist*, 22, 890-903.

Dette, H. and Studden,W. J. (1997). The theory of canonical moments with applications in statistics, probability, and analysis, Wiley, New York.

Hunter, W. G. and Reiner, A. M. (1965). Designs for discriminating between two rival models. *Technometrics*, 7, 307-323.

Lau, T. S. (1983). Theory of canonical moments and its application in polynomial regression I and II. Technical Reports 83-23 and 83-24, Department of Statistics, PurdueUniversity, Lafayette, IN.

Lau, T. S. (1988). D-optimal designs on the unit q-ball. *J. Statist. Plann. Inference*, 19, 299-315.

Lau, T. S. and Studden, W. J. (1985). Optimal designs for trigonometric and polynomial regression using canonical moments. *Ann. Statist*, 13, 383-394.

Skibinsky, M. (1967). The range of the $(n+1)$ th moment for distributions on $[0,1]$. *J. Appl. Probab*, 4, 543-552.

Skibinsky, M. (1968). Extreme n th moments for distributions on $[0,1]$ and the inverse of a moment space map. *J. Appl. Probab*, 5, 693-701.

Skibinsky, M. (1969). Some striking properties of binomial and beta moments. *Ann.Math. Statist*, 40, 1753-1764.

Skibinsky, M. (1986). Principal representations and canonical moment sequences for distributions on an interval. *J.Math. Anal. Appl*, 120, 95-118.

Stigler, S. M. (1971). Optimal experimental design for polynomial regression. *J. Amer. Statist. Assoc*, 66, 311-318.

Studden, W. J. (1980). D_s-optimal designs for polynomial regression using continued fractions. *Ann. Statist*, 8, 1132-1143.

Studden, W. J. (1982). Some robust-type D-optimal designs in polynomial regression. *J. Amer. Statist. Assoc*, 77, 916-921.

Tsai, M. H. and Zen, M. M. (2004). Criterion-robust optimal designs for model discrimination and parameter estimation : multivariate polynomial regression case, *Statist. Sinica*, 14, 591-601.

Zen, M. M. and Tsai, M. H. (2002). Some criterion-robust optimal designs for the dual problem of model discrimination and parameter estimation. *Sankhyā* Ser. B, 64, 322-338.