مقایسه و بررسی عملکرد پیش‌بینی طرح‌های بهینه برای مدل لجستیک در نمونه‌های کوچک

فریده جدی [۱] و هوشنگ طالبی [۲]

چکیده:

داده‌های دودوئی در بسیاری از تحقیقات علمی مورد توجه هستند. مرسوم‌ترین مدل برای بررسی این داده‌ها مدل لجستیک است که در خانواده مدل‌های خطی تعمیم‌یافته قرار دارد. معیارهای بهینگی برای یافتن طرح‌های بهینه معمولاً بر اساس ماتریس کوواریانس و خواص مجانبی این ماتریس بنا نهاده شده است. خواص مجانبی این ماتریس از جمله نااریبی عناصر تا زمانی که نمونه بزرگ باشد برقرار است. لذا در نمونه‌های کوچک، بحث اریبی برآورد پارامترها مطرح می‌شود و در این صورت، استفاده از معیارهای ذکرشده کفایت نمی‌کند. رابینسون و خوری [۷] بررسی و مقایسه طرح‌ها برای مدل‌های لجستیک را برای نمونه‌های کوچک مورد مطالعه قرار دادند. در این مقاله با استفاده از روش گرافیکی و شهودی رابینسون و خوری [۷] نشان می‌دهیم عملکرد پیش‌بینی طرح‌های بهینه مینی—ماکس بهتر از پیش‌بینی طرح‌های بهینه موضعی و ضعیف‌تر از طرح‌های بهینه بیزی است.

واژه‌های کلیدی: داده‌های دودوئی، مدل‌های خطی تعمیم‌یافته، طرح بهینه، معیار بهینگی، معیار میانگین مربعات خطای پیش‌بین.

۱ مقدمه

مدل‌های خطی تعمیم‌یافته که بوسیله دابسون [۴] فرمول‌بندی شده دربرگیرنده متغیرهای پاسخ با توزیع‌های غیرنرمال مانند پواسن و دوجمله‌ای هستند. تئوری طرح‌های بهینه برای داده‌های شمارشی و دودوئی بر پایه این مدل‌ها بنا نهاده شد. منظور از طرح، انتخاب مناسب مقادیر x و تعداد تکرار آنهاست. برای هر طرح، مشاهدات y را بدست آورده و از روی مشاهدات استنباط روی پارامترهای مجهول مدل صورت می‌گیرد. در این راستا، طرح‌های بهینه را تعریف کرده‌اند. منظور از طرح‌های بهینه آن است که چه مقادیری از x را با چند تکرار باید انتخاب کرد تا براساس معیاری، که تابعی از مشاهدات y مربوط به این نقاط است، برآوردگر پارامترهای مجهول دارای خواص بهینه باشند. برخلاف مدل‌های خطی، معیارهای بهینگی برای طرح‌ها در مدل‌های خطی تعمیم‌یافته به پارامترهای نامعلوم بستگی دارند که این وابستگی مشکل بزرگی در راه ساختن و ارزیابی طرح‌ها بوجود می‌آورد. برای رفع این مشکل، روش‌های مختلفی مدنظر قرار گرفته‌اند که منتج به طرح‌های بهینه موضعی، دنباله‌ای، بیزی و مینی—ماکس می‌شود. این

[۱] گروه آمار دانشگاه اصفهان
[۲] گروه آمار دانشگاه اصفهان

طرح‌ها به معیار و رویکرد تعیین آنها بستگی دارد و یکتا نیستند. رابینسون و خوری [۳] [۷] بررسی و مقایسه طرح‌ها برای مدل‌های لجستیک را برای نمونه‌های کوچک مورد مطالعه قرار دادند. از آنجایی که برآوردهای پارامترها برای مدل لجستیک در نمونه‌های کوچک اریب هستند، آنها میانگین مربعات خطای پیش‌بین را به عنوان معیاری برای مقایسه طرح‌ها بکار بردند. این معیار، همچون هر معیار طرح دیگری، در مدل‌های خطی تعمیم‌یافته به پارامترهای نامعلوم مدل بستگی دارد. برای رفع این مشکل وابستگی به پارامترهای نامعلوم مدل مؤلفین اخیر روشی شهودی و گرافیکی، براساس نمودارهای پراکندگی چندک‌های [۴] $(QDGs)$ برای میانگین مربعات خطای پیش‌بین مقیاس‌شده $(SMSEP)$ معرفی کردند. این روش شهودی تلفیق دو نموداری است که خوری و لی [۵] [۵] برای مدل‌های غیرخطی معرفی کردند. هم‌چنین این نمودارها قادر هستند توانایی پیش‌بینی کلی طرح داده‌شده را ارزیابی کنند. در این مقاله با استفاده از روش گرافیکی و شهودی رابینسون و خوری [۷] نشان می‌دهیم از نظر میانگین مربعات پیش‌بینی طرح‌های بهینه بیزی برتر از طرح‌های بهینه مینی—ماکس و این طرح اخیر برتر از طرح‌های بهینه موضعی است. در حقیقت، این مقایسه کارآیی روش بیزی را نسبت به روش مینی—ماکس و کارآیی روش مینی—ماکس را نسبت به روش موضعی در طرح‌های بهینه نمایش می‌دهد.

مقاله حاضر به شکل زیر تنظیم شده است. در بخش ۲ این مقاله، طرح بهینه و معیار بهینگی در مدل‌های خطی تعمیم‌یافته مرور می‌شود. در بخش ۳ معیار میانگین مربعات خطای پیش‌بین مقیاس‌شده برای مدل‌های خطی تعمیم‌یافته تشریح می‌شود. در بخش ۴ نمودارهای چندک‌های میانگین مربعات خطای پیش‌بین مقیاس‌شده ارائه می‌گردد و با استفاده از روش شهودی و گرافیکی رابینسون و خوری [۷] کارآیی روش بیزی را نسبت به روش مینی—ماکس و کارآیی روش مینی—ماکس را نسبت به روش موضعی نمایش می‌دهیم. نتایج به دست آمده را در بخش ۵ مورد بحث قرار خواهیم داد.

۲ طرح بهینه در مدل‌های خطی تعمیم‌یافته

اگر $y_۱, y_۲, ..., y_n$ متغیرهای پاسخ مستقل به ترتیب با میانگین $\mu_۱, \mu_۲, ..., \mu_n$ باشند، آنگاه مدل خطی تعمیم‌یافته را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned}\eta_i &= g(\mu_i), \quad i = ۱, ..., n\\ \eta_i &= x_i\beta,\end{aligned}$$

که در آن x_i بردار متغیرهای پیش‌بین، β بردار پارامترها با ضرایب رگرسیون و $g(.)$ تابعی یکنوا و مشتق‌پذیر است که تابع رابط [۶] نامیده می‌شود. درنظر گرفتن توابع رابط مختلف، مدل‌های متفاوتی را نتیجه می‌دهد. از جمله رابط همانی [۷] مدل رگرسیون خطی چندگانه و رابط لجستیک، مدل لجستیک را نتیجه می‌دهد. هدف در این مدل‌ها، برآورد β (بردار پارامترهای مدل) است، البته به

[۳] Robinson and Khuri
[۴] Quantile Dispersion Graphs
[۵] Khuri and Lee
[۶] link function
[۷] Identity link

گونه‌ای که این برآورد دارای خواص بهینه باشد.
* اما سؤالی که در این‌جا مطرح می‌شود، این است که برای آن که برآورد β دارای خواص بهینه باشد، باید از چه طرحی استفاده شود؟
طرحی که در آن برآورد پارامترهای مدل دارای خواص بهینه باشد، طرح بهینه نامیده می‌شود. برای دست‌یابی و ساختن طرح بهینه از معیارهایی که معیارهای بهینگی نامیده می‌شوند، استفاده می‌شود. عموماً این معیارها، تابعی از ماتریس کوواریانس بردار برآوردگر پارامترها (β) هستند. این معیارها با دو مسئله روبرو هستند:
۱) ماتریس کوواریانس بسیار پیچیده است و معمولاً فرم بسته‌ای نیز ندارد.
برای نمونه‌های بزرگ از وارون ماتریس اطلاع فیشر به عنوان کوواریانس مجانبی $\hat{\beta}$ استفاده می‌شود.
۲) در مدل‌های خطی تعمیم‌یافته، ماتریس کوواریانس به پارامترهای نامعلوم مدل بستگی دارد.

۱.۲ طرح بهینه موضعی

نخستین راه‌کار برای حل این مسئله، یافتن طرح‌های بهینه موضعی [8] است. این موضوع اولین بار توسط چرنف [9] [۳] مطرح گردید. برای به دست آوردن این طرح پارامترهای مجهول مدل در معیارهای بهینگی را با یک مقدار مناسب اولیه جایگزین می‌کنند.

۲.۲ طرح بهینه بیزی

ایده اصلی در طرح‌های بیزی استفاده از یک تابع چگالی پیشین برای پارامترهای مدل، به جای یک مقدار اولیه است. چالونر و لارنتز[10] [۲] با درنظر گرفتن توزیع پیشین یکنواختمستقل برای پارامترهای مدل لجستیک دوپارامتری طرح بهینه را برای این مدل به دست آوردند. معیار بیهنگی آنها ماکزیمم‌کردن میانگین لگاریتم دترمینان ماتریس اطلاع بر روی تابع چگالی پیشین بود. آن‌ها نشان دادند که با افزایش عدم قطعیت در توزیع پیشین تعداد نقاط طرحی نیز افزایش می‌یابد.

۳.۲ طرح بهینه مینی—ماکس

آخرین روش ارائه‌شده در غلبه بر مشکل وابستگی ماتریس اطلاع در مدل‌های خطی تعمیم‌یافته به پارامترهای مجهول مدل، روش مینی—ماکس [11] است. این روش نخستین بار توسط سیتر [12] [۸] در مورد مدل لجستیک بکار رفت. ایده اصلی در این روش کمینه‌کردن بدترین حالات در کارآیی طرح روی ناحیه‌ای معین برای پارامترها است. در این روش ابتدا فضایی را برای پارامتر نامعلوم انتخاب می‌کنند و بدترین حالت را در این فضا درنظر می‌گیرند و سپس طرحی که در این فضای محدودشده پارامتر بهتر عمل کند را به عنوان طرح بهینه معرفی می‌کنند. این روش جامع‌تر از طرح بهینه موضعی است اما به جامعیت روش بیزی نیست.

[8] Local Optimal Design
[9] Chernoff
[10] Chaloner and Larntz
[11] Minimax Optimal Design
[12] Sitter

۳ معیار میانگین مربعات خطای پیش‌بین مقیاس‌شده برای مدل لجستیک

تمام معیارهایی که در بخش ۲ برای یافتن طرح‌های بهینه به آنها اشاره شد براساس ماتریس اطلاع به عنوان وارون ماتریس کوواریانس برآورد پارامترها بنانهاده شده‌اند. این از خواص مجانبی برآوردگر β است و تا زمانی که نمونه بزرگ باشد برقرار باشد. از این رو، در نمونه‌های کوچک علاوه بر تردید در برقراری این خاصیت، بحث اریبی برآورد پارامترها نیز مطرح می‌شود. در این صورت، استفاده از معیارهای ذکرشده کفایت نمی‌کند. از آنجایی که برآوردگر پارامترها برای مدل لجستیک در نمونه‌های کوچک اریب هستند، نویسندگان متعددی از میانگین مربعات خطای پیش‌بین به عنوان معیاری برای مقایسه طرح‌ها استفاده کرده‌اند.

فرض کنید متغیر پاسخ برنولی، با مشاهده موفقیت یا شکست به ترتیب، مقادیر ۱ و یا ۰ را دریافت کند. هم‌چنین فرض کنید r_u تعداد موفقیت‌های مشاهده‌شده از m_u آزمایش اجراشده در u—امین نقطه باشد. اگر آزمایش‌ها مستقل از هم و احتمال موفقیت در هر آزمایش، π_u ثابت باشد، آنگاه r_u دارای توزیع دوجمله‌ای، $Bin(m_u,\pi_u)$ است.

فرض می‌شود $r_1,...,r_n$ مستقل از هم باشند. حال اگر برای هر u قرار دهیم $y_u=\frac{r_u}{m_u}$، آنگاه تابع چگالی احتمال y_u، در خانواده توزیع‌های نمایی، به صورت زیر نوشته می‌شود

$$f(y_u,\pi_u)=exp\left[m_u y_u \log\left(\frac{\pi_u}{1-\pi_u}\right)+\right.$$

$$\left.m_u\log(1-\pi_u)+\log\begin{pmatrix} m_u \\ m_u y_u\end{pmatrix}\right),$$

$$E(r_u)=m_u\pi_u,\quad u=1,...,n,$$

$$Var(r_u)=m_u\pi_u(1-\pi_u),\quad u=1,...,n$$

حال x را برداری سطری به عنوان اجرای طرحی (ترکیب تیماری) درنظر می‌گیریم. (به این ترتیب بردار سطری، یک نقطه در فضای آزمایش، R، است). برای u—امین اجرای آزمایش، $x=x_u$، y_u را خروجی مشاهده‌شده متناظر با آن درنظر بگیرید. احتمال موفقیت در x را با $\pi(x)$ نمایش می‌دهیم. حال با فرض رابط لجستیک برای $\pi(x)$ بر حسب x داریم:

$$\eta(x)=\log\left[\frac{\pi(x)}{1-\pi(x)}\right]=f^T(x)\beta.$$

بنابراین داریم

$$\hat{\pi}(x)=\frac{exp[f^T(x)\hat{\beta}]}{1+exp[f^T(x)\hat{\beta}]},$$

که در آن $\hat{\beta}$، برآوردگر حداکثر درستنمایی β در مدل لجستیک $\hat{\mu}(x)=\hat{\pi}(x)$ و $a(\phi)=1$ است. بنابراین داریم:

$$\theta_u=m_u\log\left(\frac{\pi_u}{1-\pi_u}\right)\quad,\quad u=1,...,n,$$

یعنی

$$\pi_u=\frac{exp(\frac{\theta_u}{m_u})}{1+exp(\frac{\theta_u}{m_u})}\quad,\quad u=1,...,n.$$

بنابراین

$$\frac{\partial\pi_u}{\partial\eta_u}=\frac{1}{\frac{\partial\eta_u}{\partial\pi_u}}=\pi_u(1-\pi_u)\ ,\ \ u=1,...,n.\qquad(1)$$

هم‌چنین ماتریس کوواریانس—واریانس بردار برآوردگر $\hat{\beta}$ برابر است با:

$$Var(\hat{\beta}) = \frac{1}{a(\phi)}(X^TWX)^{-1},$$

که در آن X یک ماتریس $n \times p$ است، به طوری که $f^T(x_u)$ سطر u—ام آن $(u = 1, ..., n)$ و ماتریس قطری W با درایه u—ام زیر است

$$w_u = \frac{1}{\nu_u}\left(\frac{\partial \pi_u}{\partial \eta_u}\right)^2 m_u\pi_u(1-\pi_u).$$

اریبی برآوردگر $\hat{\beta}$ برابر مقدار زیر است:

$$Bias(\hat{\beta}) = -(2a(\phi))^{-1}(X^TWX)^{-1}X^TZ_dF1_n.$$

که در آن $z_d = diag(z_{11}, ..., z_{nn})$ که z_{uu}، u—امین درایه‌ی قطری ماتریس $Z = X(X^TWX)^{-1}X^T$ و $F = diag(f_{11}, ..., f_{nn})$ وقتی

$$f_{uu} = \frac{1}{\nu_u}\left[\frac{\partial^2 \pi_u}{\partial \eta_u^2}\right]\left[\frac{\partial \pi_u}{\partial \eta_u}\right], \quad u = 1, ..., n,$$

و $\nu_u = \frac{\partial \pi_u}{\partial \theta_u}$.

با مشتق‌گیری از (۱) و با استفاده از قاعده زنجیره‌ای داریم:

$$\frac{\partial^2 \pi_u}{\partial \eta_u^2} = \partial\partial\eta_u(\pi_u(1-\pi_u)),$$

$$\frac{\partial(\pi_u(1-\pi_u))}{\partial \eta_u} = \frac{\partial(\pi_u(1-\pi_u))}{\partial \pi_u} \times \frac{\partial \pi_u}{\partial \eta_u}$$

$$\frac{\partial^2 \pi_u}{\partial \eta_u^2} = (1-2\pi_u)\pi_u(1-\pi_u), \quad u = 1, ..., n. \quad (2)$$

براساس روابط (۱) و (۲) داریم:

$$f_{uu} = m_u\pi_u(1-\pi_u)(1-2\pi_u), \qquad (3)$$

$$u = 1, ..., n.$$

بنابراین، می‌توان فرمول اریبی را به شکل ساده‌تر زیر بیان کرد

$$Bias(\hat{\beta}) = (X^TWX)^{-1}X^TW\xi,$$

وقتی $\xi = \frac{-1}{2a(\phi)}W^{-1}Z_dF$.

با توجه به (۳)، u—امین مؤلفه در ξ برابر مقدار زیر است:

$$\xi_u = \frac{-1}{2}\left[\frac{1}{m_u\pi_u(1-\pi_u)}\right]Z_{uu}[m_u\pi_u(1-\pi_u)(1-2\pi_u)],$$

$$\xi_u = Z_{uu}(\pi_u - 0/5), \quad u = 1, ..., n.$$

حال میانگین مربعات خطای پیش‌بین در x برابر است با:

$$MSE[\hat{\pi}(x)] = var[\hat{\pi}(x)] + \{Bias(\hat{\pi}(x))\}^2,$$

که در آن

$$var[\hat{\pi}(x)] = \left[\frac{\partial \pi(x)}{\partial \eta(x)}\right]^2 f^T(x)(X^TWX)^{-1}f(x) = \{\pi(x)(1-\pi(x))\}^2 f^T(x)(X^TWX)^{-1}f(x), \quad (4)$$

$$Bias[\hat{\pi}(x)] = Bias[\hat{\eta}(x)]\frac{\partial \pi(x)}{\partial \eta(x)} + \frac{1}{2}var[\hat{\eta}(x)]\frac{\partial^2 \pi(x)}{\partial \eta^2(x)} = Bias[\hat{\eta}(x)]\pi(x)(1-\pi(x)) + \frac{1}{2}f^T(x)(X^TWX)^{-1} f(x)(1-\pi(x))(1-2\pi(x)), \qquad (5)$$

به طوری که

$$Bias[\hat{\eta}(x)] = f^T(x)(X^TWX)^{-1}X^Tw\xi.$$

با قراردادن (۴) و (۵) در $MSE[\hat{\pi}(x)]$ داریم:

$$MSE[\hat{\pi}(x)] = \pi^2(x)(1-\pi(x))^2 f^T(x) \times (X^TWX)^{-1}f(x) + \{f^T(x)Bias(\hat{\beta})\pi(x) \times (1-\pi(x)) + \frac{1}{2}f^T(x)(X^TWX)^{-1}\frac{1}{2}f^T(x) \times (X^TWX)^{-1}f(x)\pi(x)(1-\pi(x))(1-2\pi(x))\}^2 \quad (6)$$

به طوری که $w_u = m_u \pi_u(1 - \pi_u)$ و ξ یک بردار $n \times 1$ که u—امین درایه آن $z_{uu}(\pi_u - \frac{1}{2})$ است.

تذکر: میانگین مربعات خطای پیش‌بین مقیاس‌شده ($SMSEP$) با یک تغییر مقیاس روی میانگین مربعات خطای پیش‌بین به دست آمده و آن را با $SMSEP(\hat{\pi}(x))$ نمایش داده و به شکل زیر می‌نویسند:

$$SMSE(\hat{\pi}(x)) = \frac{N}{\pi(x)(1 - \pi(x))} MSE(\hat{\pi}(x)) \quad (۷)$$

که در آن $N = \sum_{u=1}^{n} m_u$ و $\pi(x)(1 - \pi(x))$ بیانگر تابع واریانس r_u در نقطه x است. در حقیقت، $SMSEP$ تغییرات نسبی $MSEP$ را نسبت به واریانس اندازه‌گیری کرده و نشان می‌دهد که تغییرات اریبی در $MSEP$ نسبت به واریانس چند درصد است. این متوسط تغییرات ناشی از یک مشاهده است و بنابراین حاصل‌ضرب این متوسط در N جمع کل تغییرات را برای کل مشاهدات نشان می‌دهد. در این‌جا می‌توان $SMSEP$ را برای مقایسه طرح‌های رقیب مورد استفاده قرار داد. باید توجه داشت که $MSEP$ و در نتیجه $SMSEP$ در مدل‌های غیرخطی و مدل‌های خطی تعمیم‌یافته، هر دو توابعی از پارامترها هستند که از طریق x به طرح بستگی دارند.

برای رفع این مشکل وابستگی این معیار به پارامترهای نامعلوم مدل، رابینسون و خوری [۷] روشی شهودی و گرافیکی بر اساس نمودارهای پراکندگی چندک‌های [۱۳] ($QDGs$) میانگین مربعات خطای پیش‌بین مقیاس‌شده را معرفی کردند. برای مقایسه طرح‌ها تعریف زیر ارائه شده است.

تعریف ۱ در مدل‌های غیرخطی و مدل‌های خطی تعمیم‌یافته گوییم طرح D_1 بهتر از طرح D_2 عمل می‌کند اگر میانگین خطای پیش‌بین طرح D_1 کمتر از میانگین مربعات خطای پیش‌بین طرح D_2 باشد.

با توجه به وابستگی $SMSEP$ به پارامتر β، برای نقطه x در ناحیه مورد علاقه آزمایش مقادیر $SMSEP$ را با $\tau_D(x, \beta)$ نشان می‌دهیم. حال مقایسه دو طرح داده‌شده را بر پایه مقادیر $\tau_D(x, \beta)$، وقتی هیچ برآوردی از β در دسترس نباشد، دنبال می‌کنیم. برای این منظور زیرمجموعه C از فضای پارامتر β را درنظر می‌گیریم، بنابراین توزیع $\tau_D(x, \beta)$ روی ناحیه مورد علاقه آزمایش، به عنوان یک ملاک مطلوب می‌تواند توانایی پیش‌بینی طرح را ارزیابی کند.

به طور خاص‌تر توزیع $\tau_D(x, \beta)$ روی ناحیه مورد علاقه آزمایش را می‌توان با استفاده از توزیع تجربی و برحسب چندک‌هایش معین کرد. به این ترتیب، برای یک طرح داده‌شده D، β تعیین‌شده در C، $Q_D(P, \beta)$، P—امین چندک توزیع مقادیر $\tau_D(x, \beta)$ روی ناحیه مورد علاقه آزمایش نمایش می‌دهد.

با استفاده از نمودار چندک‌ها می‌توان اطلاعات جامع‌تری در مقایسه با تابع تجربی $SMSEP$ روی ناحیه مورد علاقه آزمایش به دست آورد. هم‌چنین، در حالی که نمودارهای جعبه‌ای تنها مقادیر خاصی از این توزیع مثل مقادیر ماکزیمم، مینیمم، میانه و میانگین $SMSEP$ را ارائه می‌کند نمودارهای چندک‌ها علاوه بر این اطلاعات در مورد سایر نقاط میانی تابع توزیع تجربی $SMSEP$ اطلاعاتی به دست می‌دهد. بنابراین استفاده از این

[۱۳] Quantile Dispersion Graphs

نمودارها برای پیش‌بینی توانایی طرح داده‌شده و ارزیابی طرح‌ها مناسب‌ترند. برای این منظور تعریف زیر ارائه می‌شود.

تعریف ۲ اگر P–امین چندک طرح D_1 برای یک نقطه داده‌شده کوچکتر از P–امین چندک طرح D_2 باشد، گوییم طرح D_1 توانایی پیش‌بینی بهتری نسبت به طرح D_2 دارد.

وابستگی چندک‌ها به پارامترهای نامعلوم مدل باعث می‌شود که $Q_D(P,\beta)$ برای چندین مقادیر β به دست آید و درنتیجه نمودارهای پراکندگی چندک‌های $SMSEP$ را برای دامنه تغییرات این مقادیر به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$Q_D^{Max}(P) = Max_{\beta \in C}\{Q_D(P,\beta)\}, \qquad (۸)$$

$$Q_D^{min}(P) = min_{\beta \in C}\{Q_D(P,\beta)\}. \qquad (۹)$$

۴ ارزیابی و مقایسه مدل‌ها در مدل لجستیک

رابینسون و خوری [۷] استفاده از نمودارهای $SMSEP$ که خود معرفی کرده بودند، را با مثال‌های عددی طرح‌های بهینه موضعی متعادل و غیرمتعادل مقایسه کردند. در این مقاله با استفاده از این نمودارها، ارزیابی و مقایسه را به دسته‌های بزرگ‌تری از طرح‌های بهینه تعمیم داده‌ایم. نتایج این کار در این بخش ارائه شده است. در حقیقت، با استفاده از نمودار چندک‌های $SMSEP$ به طور شهودی نشان می‌دهیم که توانایی پیش‌بینی طرح‌های بهینه مینی–ماکس از توانایی پیش‌بینی طرح‌های بهینه موضعی بیشتر و از طرح‌های بهینه موضعی کمتر است.

مدل لجستیک بخش ۳ برای احتمال موفقیت $\pi(x,\beta)$ بر حسب دو پارامتر β و μ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\pi(x,\beta) = \frac{1}{1 + exp(-\beta(x-\pi))}. \qquad (۱۰)$$

پارامتر μ مقداری از متغیر x است که احتمال پیروزی متغیر پاسخ در آن برابر $\frac{1}{2}$ است.

هدف از این بهش مقایسه توانایی پیش‌بینی دو طرح زیر است

$$D_1 : x = -۰/۴۳۶(۰/۲۶۹), ۰(۰/۴۶۲), ۰/۴۳۶(۰/۲۶۹),$$

$$D_2 : x = -۰/۳۰۸(۰/۳۶۸), ۰(۰/۲۶۴), ۰/۳۰۸(۰/۳۶۸).$$

طرح D_1، طرح D–بهینه مینی–ماکس است که توسط کینگ و وونگ [۶] معرفی گردید. طرح D_2، طرح بهینه بیزی با معیار D–بهینگی است که توسط چالونر و لارنتز [۲] معرفی شده است. این دو طرح به وسیله مقادیر (نقاط) x و وزن هریک (در پرانتز) ارائه شده‌اند. باید یادآوری کنیم که سیتر [۸] فاصله‌ای را برای هریک از پارامترهای مجهول مدل درنظر گرفت در صورتی که چالونر و لارنتز [۲] توزیع پیشین یکنواخت (ناآگاهی‌بخش) را برای این پارامترها فرض کردند. برای مقایسه طرح‌های D_1 و D_2 بر پایه مقادیر $SMSEP$ در (۷)، که با $\tau_D(x,\beta)$ نمایش دادیم، به صورت زیر عمل می‌کنیم. زمانی که $\beta = (\mu,\beta)$ مجهول است، فرض کنید C زیرمجموعه‌ای از فضای پارامتر بردار β باشد که آن را

به صورت زیر درنظر می‌گیریم

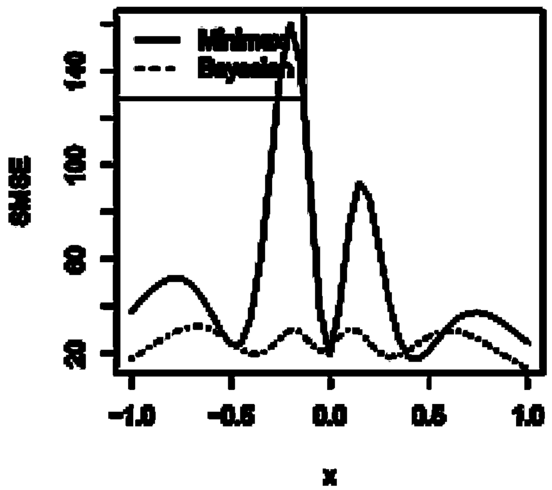
$$C = \{\beta | -۰/۳ < \mu < ۰/۳, ۶ < \beta < ۸\}.$$

سپس برای هر دو طرح $D_۱$ و $D_۲$ و هر $x = ۱/۵(۰/۰۵)۱/۵-$، ماکزیمم و مینیمم مقادیر $\tau_{D_i}(x,\beta)$ را برای $i = ۱,۲$ بر روی $\beta \in C$ به صورت زیر به دست می‌آوریم.

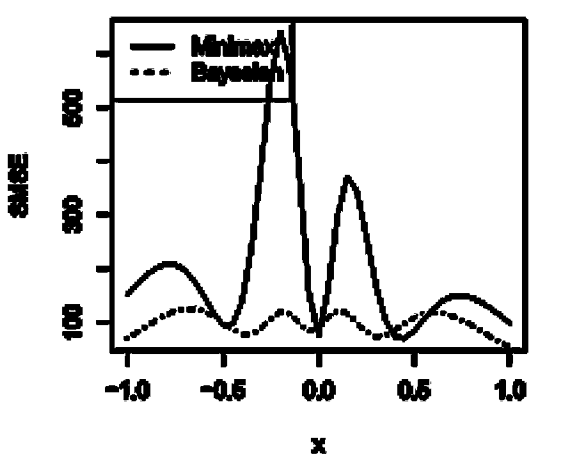
$$h_{D_i}(x) = Max_{\beta \in C}\{\tau_{D_i}(x,\beta)\}, \quad i = ۱,۲,$$

$$g_{D_i} = min_{\beta \in C}\{\tau_{D_i}(x,\beta)\}, \quad i = ۱,۲.$$

شکل (۱) نمودارهای مقادیر $h_{D_i}(x)$ برای $i = ۱,۲$ بر حسب x با حجم نمونه ۱۰ را نمایش می‌دهد. همان‌گونه که از شکل نمایان است طرح $D_۲$ دارای مقادیر $SMSEP$ کمتر از طرح $D_۱$ است. بنابراین با توجه به تعریف براساس معیار $SMSEP$ طرح بهینه بیزی چالونر و لارنتز [۲] بهتر از طرح D-بهینه مینی-ماکس کینگ و وونگ [۶] است.

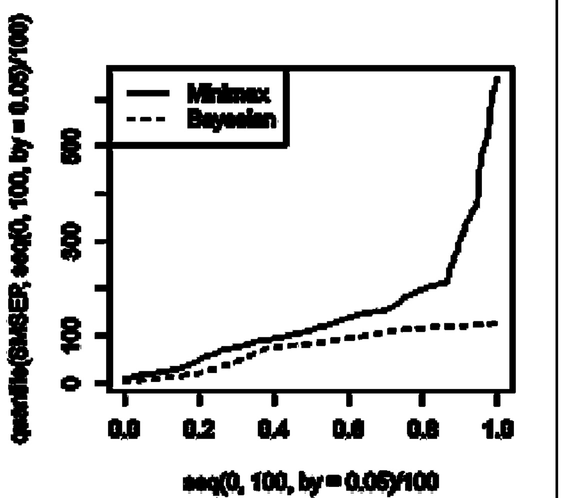


شکل ۱: نمودار ماکزیمم $SMSEP$ طرح‌های $D_۱$ و $D_۲$$(n = ۱۰)$



شکل ۲: نمودار ماکزیمم $SMSEP$ طرح‌های $D_۱$ و $D_۲$$(n = ۴۰)$

با توجه به شکل (۲) هرچه حجم نمونه افزایش یابد، برای مثال $n = ۴۰$، نوسانات هر دو طرح بیشتر می‌شود. هم‌چنین در شکل (۳) ترکیب نمودارهای پراکندگی چندک‌های میانگین مربعات خطای پیش‌بینی مقیاس‌شده برای دو طرح $D_۱$ و $D_۲$ با توجه به روابط (۸) و (۹) نمایش داده شده است. واضح است طبق توانایی پیش‌بینی طرح $D_۲$ بهتر از توانایی پیش‌بینی طرح $D_۱$ است. در حقیقت این شکل، کارآیی روش بیزی ارائه‌شده را نسبت به روش مینی-ماکس نمایش می‌دهد. این درحال است که این طرح بهینه مینی-ماکس نسبت به طرح بهینه موضعی بهتر عمل می‌کند، که در ادامه با مثال عددی، به آن می‌پردازیم. برای این منظور طرح‌های $D_۱$



شکل ۳: ترکیب نمودارهای پراکندگی چندک‌های $SMSEP$ برای دو طرح D_1 و D_2 $(n = ۴۰)$

$$D_1 : x = ۳۱/۷۲, ۳۴/۴۸, ۳۷/۲۴, ۴۰, ۴۲/۷۶, ۴۵/۵۲$$

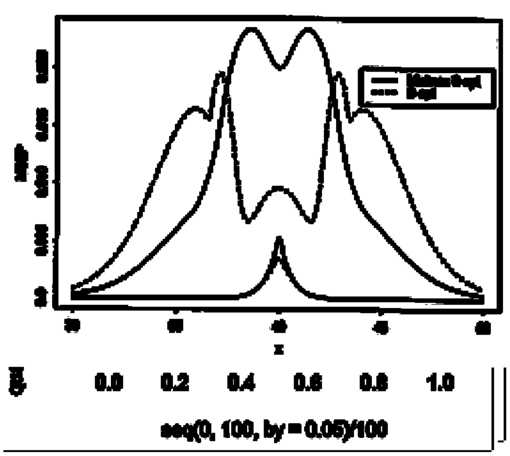
$$D_2 : x = ۳۸/۲۸, ۴۱/۷۲$$

طرح D_1، طرح بهینه مینی–ماکس است که توسط سیتر [۸] معرفی گردید و طرح D_2، طرح D–بهینه موضعی است که توسط اتکینسن [14] [۱] معرفی شده است. در این دو طرح مقادیر (نقاط) x داده‌شده بطوری که تعداد مشاهدات در هر نقطه یکسان با حجم نمونه ۳۸۲ است. برای مقایسه طرح D_1 و D_2 بر پایه مقادیر $SMSEP$ در (۷)، که بوسیله $\tau_D(x, \beta)$ تعریف می‌شود، به صورت زیر عمل می‌کنیم. زمانی که $\beta = (\mu, \beta)$ مجهول است، فرض کنید C زیرمجموعه‌ای از فضای پارامترهای β باشد که آن را به صورت زیر درنظر می‌گیریم

$$c = \{\beta |\ ۳۸ \leq \mu \leq ۴۲ \ \ , \ \ ۰/۵ \leq \beta \leq ۱/۲۵\}.$$

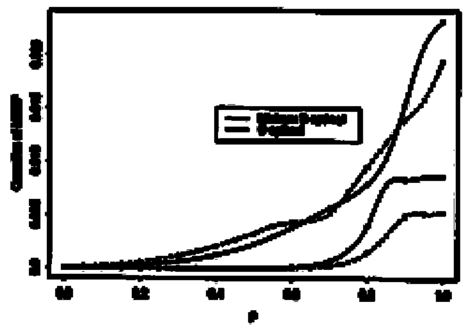
سپس برای هر دو طرح و هر $۳۰ \leq x \leq ۵۰$، ماکزیمم و مینیمم مقادیر $\tau_{D_i}(x, \beta)$ را برای $i = ۱, ۲$ بر روی $\beta \in C$ به دست می‌آوریم.

شکل (۴) نمودارهای ماکزیمم و مینیمم $SMSEP$ را برای دو طرح D_1 و D_2 نشان می‌دهد. واضح است که طبق تعریف در مرکز ناحیه آزمایش، طرح D_2 بهتر از طرح D_1 عمل می‌کند در حالی که در اطراف ناحیه آزمایش، طرح D_1 بهتر از طرح D_2 است. در شکل (۵) ترکیب نمودارهای پراکندگی چندک‌های $SMSEP$ با توجه به روابط (۸) و (۹) برای دو طرح D_1 و D_2 نمایش داده شده است. واضح است که طبق تعریف توانایی پیش‌بینی طرح D_1 کمی بهتر از توانایی پیش‌بینی طرح D_2 است. به این ترتیب همان‌گونه که اشاره شد، با روش شهودی و گرافیکی رابینسون و خوری [۷] نشان دایدم که توانایی پیش‌بینی طرح بهینه مینی–ماکس مابین توانایی طرح بهینه موضعی و بیزی است. همچنین می‌توان نشان داد، در حالتی که n بزرگ است و مستقیماً از ماتریس اطلاع استفاده می‌شود، روی نتیجه مقایسه طرح‌های بهینه تأثیرگذار نیست.



شکل ۴: ترکیب نمودارهای پراکندگی چندک‌های $SMSEP$ برای دو طرح D_1 و D_2

[14] Atkinson



شکل ۵: ترکیب نمودارهای پراکندگی چندک‌های $SMSEP$
برای دو طرح D_1 و D_2 $(n = 40)$

مراجع

[1] Atkinson, A.C. (1995). Some Topics in Optimum Experimental Design for Generalized Linear Models, in *Statistical Modelling Springer Lecture Notes in Statistics* 104,Eds. G.U.H. Seeber, B.J. Francis, R. Hatzinger, and G. Steckel-Berger, New York: Springer-Verla , 11-18.

[2] Chaloner, K. and Larntz, K. (1989). Optimal Bayesian Experimental Design Applied to Logistic Regression Experiments, *Journal of Statistical Planning and Inference*, 21, 191-208.

[3] Chernoff, H. (1953). Local Optimal Designs for Estimating Parameters, *Annals of Mathematical Statistics*, 24, 586-602.

[4] Dobson, A.J. (1945). An Introduction to Generalized Linear Models, Chapman and Hall.

[5] Khuri, A.I. and Lee, J. (1998). A Graphical Approach for Evaluating and Comparing Designs for Nonlinear Models, *Computational Statistics Data Analysis*, 27, 433-443.

[6] King, J. and Wong, W.K. (2000). Minimax D-Optimal Designs for the Logistic Model, *Biometrica*, 56, 1263-1267.

[7] Robinson, K. and Khuri, A.I. (2003). Quantile Dispersion Graphs for Evaluating and Comparing Designs for Logistic Regression Models, *Computational Statistics Data Analysis*, 43, 47 - 62.

[8] Sitter, R. R. (1992). Robust Designs for Binary Data, *Biometrica*, 48,1145-1155.