

平衡线性混合效应模型的最优设计 *

周晓东

(上海对外经贸大学商务信息学院, 上海, 201620)

岳荣先

(上海师范大学数理学院, 上海, 200234)

摘 要

研究了一般平衡线性混合效应模型下的最优设计问题. 主要关注模型固定效应估计, 随机效应的估计以及对个体未来观察值预测的最优设计. 以de la Garza现象和Loewner偏序为工具降低求解最优设计问题的维度, 用解析方法或数值方法求解最优设计, 并利用等价性定理判断解的最优性.

关键词: de la Garza现象, Loewner偏序, 混合效应模型, 最优设计.

学科分类号: O212.6.

§1. 引 言

混合效应模型被广泛应用于多个领域, 如畜牧养殖、群体药代动力学、个体化医学等. 在过去的几十年间, 许多学者对混合效应模型及其应用做了很好的研究, 部分研究成果可以参看Verbeke等(2000), 但相应的试验设计问题研究却比较滞后. Cheng (1995), Atkins等(1999)研究了随机区组效应模型的设计问题. Abt等(1997, 1998)考虑了带有自相关误差的一阶或二阶多项式回归随机效应增长曲线模型的设计. Ouwens等(2002)和Berger等(2004)建立了随机系数模型的极大极小设计. Schmelter (2007a, 2007b)讨论了单组恒等设计在某特定随机系数模型下的最优性. Debusho等(2008, 2011)考察了一或二阶随机截距模型的最优设计. Graßhoff等(2012)研究了由随机系数所引起的异方差线性回归模型的最优设计. Mielke (2012)导出了稀疏抽样场合下二阶混合效应模型的 D -最优设计. 虽然上述文献中已经得到了一些好的结果, 但仍然有很多问题亟待解决. 原因可能与解决这些问题时遇到的两个难点有关. 一是混合效应模型的信息矩阵和最优设计往往依赖于模型中所含有的未知参数. 在线性模型下表现为对方差分量的依赖. 处理这一问题的一种常用方法是在给定未知参数一个好的猜测值情况下构造局部最优设计(Chernoff, 1953). 二是混合效应模型下的最优设计往往包括两层结构: 对于每一个体, 需要选择变量或协变量的最优水平取值, 以及每个水平组合下观察数的权重; 对于不同个体间, 需要确定每一试验组所包含个体的权重. 这种双层结构使得混合效应模型下的最优设计问题要比固定效应模型下的设计问题更为复杂. 在经典最优设计的理论(Pukelsheim, 1993)框架下Cheng (1995), Atkins等(1999), Debusho等(2008, 2011)给出了一些简单线性混合效应模型下的最优解, 但

*国家自然科学基金项目(11071168, 11141002)、上海对外经贸大学085工程项目(Z08512053)、教育部高校博士点专项科研基金(20103127110002)和上海市教委科研创新重点项目(11zz116)资助.

本文2012年11月20日收到, 2013年1月6日收到修改稿.

对一般的混合效应模型, 相关的结果还比较缺乏. 为降低解决问题的难度或出于实际需要Ouwens (2002), Luoma等(2007), Liski等(2002)提出采用恒等设计的策略, 即所有个体采用同样的试验方案.

不同于以往的几何方法(Elfving, 1952)或经典的最优设计方法(Pukelsheim, 1993), Liski等(2002)利用de la Garaz (DLG)现象作为工具建立随机系数模型下固定效应估计的最优设计. 所谓DLG现象是指: 如果设计模型为 $p-1$ 阶多项式回归模型且误差相互独立, 那么对于任一 n 点设计($n > p$), 存在支撑点个数为 p 的设计, 使得后者的信息矩阵在Loewner偏序意义下不差于前者^[19].

本文运用DLG现象为工具, 对Liski等(2002)中固定效应估计的最优设计部分结论作了推广, 并研究了以往文献中少见的随机效应估计和对个体未来观察值预测的最优设计. 构建不同设计目标下的最优设计准则, 利用解析方法或数值方法求局部最优设计, 并首次提出借助等价性定理验证所求解的最优性.

§2. 平衡线性混合效应模型

考虑一般的平衡线性混合效应模型

$$y_{ij} = \mathbf{f}^T(x_j)\boldsymbol{\beta} + \mathbf{g}^T(x_j)\mathbf{b}_i + e_{ij}, \quad i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, m, \quad (2.1)$$

其中 y_{ij} 为第 i 个个体在试验点 x_j 的观测值, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^T$ 为固定效应, \mathbf{b}_i 为 q 维随机效应, $\mathbf{f}(x) = (f_1(x), \dots, f_p(x))^T$ 和 $\mathbf{g}(x) = (g_1(x), \dots, g_q(x))^T$ 分别为相互线性无关的函数构成的向量, e_{ij} 为观测误差. 假定 $\mathbf{b}_i \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{D})$, $\mathbf{e}_i = (e_{i1}, \dots, e_{im})^T \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_m)$, 其中 \mathbf{D} 为 $q \times q$ 矩阵, 且随机效应与观测误差以及观测误差之间相互独立. 第 i 个个体的 m 个观测值构成的向量可以表示成

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{b}_i + \mathbf{e}_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.2)$$

其中 $\mathbf{y}_i = (y_{i1}, \dots, y_{im})^T$, 而 $\mathbf{X} = (\mathbf{f}(x_1), \dots, \mathbf{f}(x_m))^T$ 和 $\mathbf{Z} = (\mathbf{g}(x_1), \dots, \mathbf{g}(x_m))^T$ 分别为 $m \times p$ 和 $m \times q$ 设计矩阵. 在边际意义下, 观察值向量 \mathbf{y}_i , $i = 1, \dots, n$ 相互独立且服从正态分布, 其期望和方差分别为 $E(\mathbf{y}_i) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ 及 $\text{Cov}(\mathbf{y}_i) = \boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2(\mathbf{Z}\mathbf{D}\mathbf{Z}^T + \mathbf{I}_m)$. 将向量 \mathbf{y}_i 和 \mathbf{e}_i 分别合成 N 维向量 $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1^T, \dots, \mathbf{y}_n^T)^T$ 及 $\mathbf{e} = (\mathbf{e}_1^T, \dots, \mathbf{e}_n^T)^T$, 其中 $N = nk$ 为所有观测个体观察值总数. 整个观测值向量 \mathbf{Y} 的矩阵表示形式为

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{G}\mathbf{b} + \mathbf{e}, \quad (2.3)$$

其中 $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_1^T, \dots, \mathbf{b}_n^T)^T$, $\mathbf{G} = \mathbf{I}_n \otimes \mathbf{Z}$, $\mathbf{F} = \mathbf{1}_n \otimes \mathbf{X}$, 此处 $\mathbf{1}_n$ 是一个所有分量为1的 n 维向量, 记号 \otimes 表示向量或矩阵的Kronecker乘积. 因此有

$$\begin{aligned} E\mathbf{Y} &= \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}, & \text{Cov}(\mathbf{Y}) &= \mathbf{V} = \text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}, \dots, \boldsymbol{\Sigma}), \\ \text{Cov}(\mathbf{b}) &= \mathbf{Q} = \mathbf{I}_n \otimes \sigma^2 \mathbf{D}, & \text{Cov}(\mathbf{e}) &= \sigma^2 \mathbf{I}_N, & \text{Cov}(\mathbf{b}, \mathbf{e}) &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

模型(2.3)中参数 β 的广义最小二乘估计(GLSE)或最优线性无偏估计(BLUE)为

$$\hat{\beta}_{\text{GLS}} = (\mathbf{F}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{y}}, \quad \bar{\mathbf{y}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i. \quad (2.4)$$

估计量 $\hat{\beta}_{\text{GLS}}$ 的协方差阵为

$$\text{Cov}(\hat{\beta}_{\text{GLS}}) = (\mathbf{F}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{F})^{-1} = \frac{1}{n} (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1}. \quad (2.5)$$

引理 2.1 (Rao, 1967) 考虑线性模型 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \mathbf{e}$, 其中 \mathbf{X} 是 $m \times p$ 设计矩阵, \mathbf{e} 为误差向量, $\text{Cov}(\mathbf{e}) = \boldsymbol{\Sigma}$. 如果 \mathbf{K} 是 $m \times (m-p)$ 列满秩矩阵, 且满足 $\mathbf{X}^T \mathbf{K} = \mathbf{0}$, $\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{K} = \mathbf{0}$, 那么 β 的广义最小二乘估计 $\hat{\beta}_{\text{GLS}} = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}$ 与普通最小二乘估计 $\hat{\beta}_{\text{OLS}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ 相同.

记 $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ 和 $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$ 分别为 \mathbf{X} 的列向量张成的空间以及 $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ 的正交补空间.

定理 2.1 对于模型(2.2), 如果 \mathbf{Z} 来自 $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ 或 $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$, 那么 β 的GLSE与普通最小二乘估计相同, 即 $\hat{\beta}_{\text{GLS}} = \hat{\beta}_{\text{OLS}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \bar{\mathbf{y}}$.

证明: 假定 \mathbf{K} 为 $m \times p$ 矩阵且满足 $\mathbf{X}^T \mathbf{K} = \mathbf{0}$. 如果 \mathbf{Z} 的列向量来自 $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, 那么存在矩阵 \mathbf{S} 满足 $\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{S}$, 则我们有 $\mathbf{Z}^T \mathbf{K} = \mathbf{0}$. 如果 \mathbf{Z} 的列向量来自 $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$, 那么我们有 $\mathbf{X}^T \mathbf{Z} = \mathbf{0}$, 且

$$\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{K} = \mathbf{X}^T (\sigma^2 \mathbf{Z} \mathbf{D} \mathbf{Z}^T + \sigma^2 \mathbf{I}_m) \mathbf{K} = \sigma^2 \mathbf{X}^T \mathbf{Z} \mathbf{D} \mathbf{Z}^T \mathbf{K} + \sigma^2 \mathbf{X}^T \mathbf{K} = \mathbf{0}.$$

由引理2.1, 有 $\hat{\beta}_{\text{GLS}}|\mathbf{y}_i = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}_i$ 与 $\hat{\beta}_{\text{OLS}}|\mathbf{y}_i = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}_i$ 相同, 其中 $\hat{\beta}_{\text{GLS}}|\mathbf{y}_i$, $\hat{\beta}_{\text{OLS}}|\mathbf{y}_i$ 分别为基于样本 \mathbf{y}_i 的 β 的GLSE和OLSE. 由于 $\hat{\beta}_{\text{GLS}} = (1/n) \sum_{i=1}^n \hat{\beta}_{\text{GLS}}|\mathbf{y}_i$ 和 $\hat{\beta}_{\text{OLS}} = (1/n) \sum_{i=1}^n \hat{\beta}_{\text{OLS}}|\mathbf{y}_i$, 所以 $\hat{\beta}_{\text{GLS}} = \hat{\beta}_{\text{OLS}}$. \square

下文重点考虑模型(2.2)满足 $\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{S}$ 的一种特殊情况, 其中 \mathbf{S} 为给定的矩阵. 该模型常被用于对纵向数据的分析(Verbeke, 2000). 由定理2.1, 易得下列结果.

定理 2.2 若模型(2.2)满足 $\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{S}$, 则 $\hat{\beta}_{\text{GLS}}$ 的协方差矩阵为

$$\text{Cov}(\hat{\beta}_{\text{GLS}}) = \frac{\sigma^2}{n} [(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} + \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T].$$

§3. 固定效应估计问题的恒等最优设计

考虑模型(2.2)的特殊情形. 假设模型中随机效应参数 \mathbf{b}_i , $i = 1, \dots, n$ 的方差为 $\mathbf{0}$, 即 $\text{Cov}(\mathbf{b}_i) = \mathbf{0}$, $i = 1, \dots, n$, 那么模型(2.2)简化为

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}\beta + \mathbf{e}_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.1)$$

上述模型称为固定效应模型. 定义 m 点精确设计

$$\xi_m = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \cdots & x_k \\ m_1/m & m_2/m & \cdots & m_k/m \end{array} \right\},$$

其中整数 m_i 表示在点 x_i 的重复观察次数, 且满足 $\sum_{i=1}^k m_i = m$. 考虑到优化问题, 放松对 m_i 为整数的限制. 将每一点重复观察次数作为权重记为 w_i , 称下列设计 ξ 为近似设计(连续设计)

$$\xi = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \cdots & x_k \\ w_1 & w_2 & \cdots & w_k \end{array} \right\}, \quad w_i > 0, \sum_{i=1}^k w_i = 1,$$

或记为 $\xi = \{x_1, x_2, \dots, x_k; w_1, w_2, \dots, w_k\}$.

由于在求关于有效估计固定效应 β 的最优设计 ξ 时与 σ^2 和 n 的值无关, 因此以下取 $\sigma^2 = 1$. 记 $\mathcal{I}_F = \mathbf{X}^T \mathbf{X} = m \sum_{i=1}^k w_i \mathbf{f}(x_i) \mathbf{f}(x_i)^T$ 为固定效应模型(3.1)在设计 ξ 下的信息矩阵, $\mathcal{I}_M = ((\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} + \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T)^{-1} = (\mathcal{I}_F^{-1} + \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T)^{-1}$ 为混合效应模型(2.2)在设计 ξ 下的信息矩阵.

记 $\hat{\beta}_1$ 和 $\hat{\beta}_2$ 分别为混合效应模型(2.2)中参数 β 对应于设计 ξ_1 和 ξ_2 下的广义最小二乘估计, \mathbf{X}_1 和 \mathbf{X}_2 为相应的设计矩阵, 则有

$$\text{Cov}(\hat{\beta}_1) \leq \text{Cov}(\hat{\beta}_2) \Leftrightarrow (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \leq (\mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2)^{-1} \Leftrightarrow \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 \geq \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2$$

(这里 $\mathbf{A}_1 \geq \mathbf{A}_2$ 表示 $\mathbf{A}_1 - \mathbf{A}_2$ 是非负定矩阵). 因此我们有

定理 3.1 记 ξ_1 和 ξ_2 为混合效应模型(2.2)的任意两个设计. 设计 ξ_1 在Loewner偏序意义下优于设计 ξ_2 (即 $\mathcal{I}_1 \geq \mathcal{I}_2$, 其中 $\mathcal{I}_i, i = 1, 2$ 为设计 $\xi_i, i = 1, 2$ 在对应模型下的信息矩阵), 当且仅当在相应的固定效应模型(3.1)下 ξ_1 优于 ξ_2 .

类似结论见Liski (2002). 正如Liski (2002) (第23页)和Pukelsheim (1993) (第104页)指出的, 不存在Loewner偏序意义下一致最优的设计 ξ^* . 因此我们建立信息矩阵的单值实函数(下文称设计准则)用以评价不同设计的好坏. 常用最优设计准则有 D -最优, L -最优, G -最优等. 具体地,

- D -最优设计定义为: $\xi_D^* = \arg \min_{\xi \in \Xi} \det(\mathcal{I}_M^{-1})$;
- L -最优设计定义为: $\xi_L^* = \arg \min_{\xi \in \Xi} \text{tr}(\text{Var}(\mathbf{L}^T \hat{\beta})) = \arg \min_{\xi \in \Xi} \text{tr}(\mathbf{L}^T \mathcal{I}_M^{-1} \mathbf{L})$;
- G -最优设计定义为: $\xi_G^* = \arg \min_{\xi \in \Xi} \sup_{x \in \mathcal{Z}} (\text{Var}(\mathbf{f}(x)^T \hat{\beta})) = \arg \min_{\xi \in \Xi} \sup_{x \in \mathcal{Z}} \mathbf{f}(x)^T \mathcal{I}_M^{-1} \mathbf{f}(x)$.

其中 Ξ 为设计空间 \mathcal{X} 上所有可能设计构成的集合, \mathbf{L} 是 $t \times p$ 矩阵, \mathcal{Z} 为感兴趣的预测区域.

注意到混合效应模型(2.2)下的信息矩阵 $\mathcal{I}_M(\xi)$ 和固定效应模型(3.1)下信息矩阵 $\mathcal{I}_F(\xi)$ 之间有 $\mathcal{I}_M^{-1}(\xi) = \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T + \mathcal{I}_F^{-1}(\xi)$, 由此不难得到

$$\text{tr}[\mathbf{L} \mathcal{I}_M^{-1}(\xi) \mathbf{L}^T] = \text{tr}[\mathbf{L} \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T \mathbf{L}^T] + \text{tr}[\mathbf{L} \mathcal{I}_F^{-1}(\xi) \mathbf{L}^T].$$

定理 3.2 设计 ξ^* 是混合效应模型(2.2)参数 β 的线性组合 $L\beta$ 的 L -最优设计, 当且仅当它是固定效应模型(3.1)下的 L -最优设计.

事实上, 上述结论对于线性准则都是成立的, 但对于非线性准则该结论则不一定成立. 例如, 对于文献中经常用到的 D -最优设计准则, 最小化 $\det(\mathcal{I}_M^{-1}(\xi))$ 和 $\det(\mathcal{I}_F^{-1}(\xi))$ 一般会得到不同的结果. 类似地还有 G -最优设计准则. 下面小节讨论一阶和二阶混合效应模型具体准则下的设计求解问题.

3.1 一阶混合效应模型的最优设计

考虑一阶混合效应模型

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \beta_0 + \beta_1 x_j + b_{0i} + b_{1i} x_j + e_{ij} \\ &= \mathbf{f}^T(x_j)\beta + \mathbf{f}^T(x_j)\mathbf{b}_i + e_{ij}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (3.2)$$

其中 $\mathbf{f}(x_j) = (1, x_j)^T$, $\beta = (\beta_0, \beta_1)^T$, $\mathbf{b}_i = (b_{0i}, b_{1i})^T$. 设计点 $x_j \in \mathcal{X} = [0, 1]$, $\mathbf{b}_i \sim N(0, \sigma^2 \mathbf{D})$,

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \dot{\gamma}_0^2 & \rho \dot{\gamma}_0 \dot{\gamma}_1 \\ \rho \dot{\gamma}_0 \dot{\gamma}_1 & \dot{\gamma}_1^2 \end{pmatrix},$$

其中 $\dot{\gamma}_0^2 = \text{Var}(b_{0i})/\sigma^2$, $\dot{\gamma}_1^2 = \text{Var}(b_{1i})/\sigma^2$, $\rho = \text{Corr}(b_{0i}, b_{1i})$.

引理 3.1 (Liski, 2002) 对于一阶混合效应模型(3.2), 存在两点设计 $\xi_2 = \{0, 1; w, 1-w\}$ 一致优于任意 n ($n > 2$)点近似设计 ξ .

引理3.1表明准则下的最优设计容许类为两点设计类 $\xi_2 = \{0, 1; w, 1-w\}$. 容易看出设计 ξ_2 除了与设计准则有关外, 还与方差分量以及相关系数有关. 我们考虑 D -和 G -最优设计准则. 定义矩阵 $\mathbf{D}_w = \text{diag}(w, 1-w)$, $\widetilde{\mathbf{X}}^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. 基于上述两点设计, 参数 β 的最小二乘估计的协方差矩阵如下

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \frac{1}{m} [(\widetilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \widetilde{\mathbf{X}})^{-1} + m \mathbf{D}] = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} \frac{1}{w} + \gamma_0^2 & -\frac{1}{w} + \rho \gamma_0 \gamma_1 \\ -\frac{1}{w} + \rho \gamma_0 \gamma_1 & \frac{1}{w(1-w)} + \gamma_1^2 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

其中 $\gamma_0 = \sqrt{m} \dot{\gamma}_0$, $\gamma_1 = \sqrt{m} \dot{\gamma}_1$.

注记 1 对于混合效应模型, 标准化后的信息矩阵 $(1/m)\mathcal{I}_M(\xi)$ 以及最终的最优设计与试验的总次数 m 有关. 这一点与固定效应模型不同, 但与Bayes框架下的情况类似.

先考虑 D -最优设计. 求下列以 w 为变量的 D -最优设计准则函数的最小值

$$\det[\text{Var}(\hat{\beta})] = \frac{1 + \gamma_0^2 + \gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1}{w} + \frac{1 + \gamma_0^2}{1-w} + (1 - \rho^2)\gamma_0^2\gamma_1^2, \quad (3.4)$$

易得使得函数取最小值的 w 为

$$w^* = \frac{\sqrt{1 + \gamma_0^2 + \gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1}}{\sqrt{1 + \gamma_0^2 + \gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1} + \sqrt{1 + \gamma_0^2}}. \quad (3.5)$$

在模型(3.2)中, 如果 $\gamma_1 = 0$, 则模型(3.2)简化为一阶随机截距模型. 此时最优权重 $w^* = 1/2$ 与 γ_0^2 无关. 如果 $\gamma_0 = 0$, 则模型(3.2)简化为一阶随机斜率模型. 此时最优权重为 $w^* = \sqrt{1 + \gamma_1^2}/(1 + \sqrt{1 + \gamma_1^2})$. 上述结果除一阶随机截距模型外, 其余一阶随机斜率模型和一阶随机系数模型(3.2)的 D -最优设计与方差分量以及相关系数的取值有关.

再考虑 G -最优设计. 求下列 G -最优设计准则函数的最小值

$$\sup_{x \in [0,1]} \mathbf{f}^T(x) \text{Var}(\hat{\beta}) \mathbf{f}(x) = \max \left\{ \frac{1}{w} + \gamma_0^2, \frac{1}{1-w} + \gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1 + \gamma_0^2 \right\}. \quad (3.6)$$

定义下列函数

$$v(w, x) = \mathbf{f}^T(x) \text{Var}(\hat{\beta}) \mathbf{f}(x) = \frac{1}{w} + \gamma_0^2 + 2\left(\frac{1}{w} + \rho\gamma_0\gamma_1\right)x + \left[\frac{1}{w(1-w)} + \gamma_1^2\right]x^2.$$

由于 $v(w, 0) = 1/w + \gamma_0^2$ 是 w 的单调减函数, 而 $v(w, 1) = 1/(1-w) + \gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1 + \gamma_0^2$ 是 w 的单调增函数, 因此 $v(w, x)$ 在 $v(w, 0) = v(w, 1)$ 时取到最小值. 由此求得最优权重为

$$w^* = \frac{1}{2} - \frac{\gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1}{2(2 + \sqrt{4 + (\gamma_1^2 + 2\rho\gamma_0\gamma_1)^2})}. \quad (3.7)$$

如果 $\gamma_1 = 0$, 则 $w^* = 1/2$, 与 D -最优设计相同. 如果 $\gamma_0 = 0$, 最优权重 $w^* = 1/2 - \gamma_1^2/[2(2 + \sqrt{4 + \gamma_1^4})]$. 与 D -最优设计类似 G -最优设计一般也与方差分量以及相关系数有关. 另外, 除随机截距模型外, 在相同条件下 D -最优设计与 G -最优设计一般不同. 这与固定效应模型下 D -最优与 G -最优设计等价结论不同.

3.2 二阶混合效应模型的最优设计

考虑二阶混合效应模型

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \beta_0 + \beta_1 x_j + \beta_2 x_j^2 + b_{0i} + b_{1i} x_j + b_{2i} x_j^2 + e_{ij} \\ &= \mathbf{f}^T(x_j) \boldsymbol{\beta} + \mathbf{f}^T(x_j) \mathbf{b}_i + e_{ij}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (3.8)$$

其中 $\mathbf{f}(x_j) = (1, x_j, x_j^2)^T$, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)^T$, $\mathbf{b}_i = (b_{0i}, b_{1i}, b_{2i})^T$. 假定 $\mathbf{b}_i \sim N(0, \sigma^2 \mathbf{D})$,

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \dot{\gamma}_0^2 & \rho_{01}\dot{\gamma}_0\dot{\gamma}_1 & \rho_{02}\dot{\gamma}_0\dot{\gamma}_2 \\ \rho_{01}\dot{\gamma}_0\dot{\gamma}_1 & \dot{\gamma}_1^2 & \rho_{12}\dot{\gamma}_1\dot{\gamma}_2 \\ \rho_{02}\dot{\gamma}_0\dot{\gamma}_2 & \rho_{12}\dot{\gamma}_1\dot{\gamma}_2 & \dot{\gamma}_2^2 \end{pmatrix},$$

其中 $\dot{\gamma}_0^2 = \text{Var}(b_{0i})/\sigma^2$, $\dot{\gamma}_1^2 = \text{Var}(b_{1i})/\sigma^2$, $\dot{\gamma}_2^2 = \text{Var}(b_{2i})/\sigma^2$, $\rho_{01} = \text{Corr}(b_{0i}, b_{1i})$, $\rho_{02} = \text{Corr}(b_{0i}, b_{2i})$, $\rho_{12} = \text{Corr}(b_{1i}, b_{2i})$. 我们考虑设计区域为非对称区域 $\mathcal{X} = [0, 1]$.

引理 3.2 (Liski, 2002) 对于二阶混合效应模型(3.8), 存在三点设计 $\xi_3 = \{0, \lambda, 1; w, t, r\}$ 一致优于任意 k 点近似设计 ξ .

由引理3.2, 二阶模型下的近似最优设计可以在三点设计类 $\xi_3 = \{0, \lambda, 1; w, t, r\}$ 中寻找. 该设计下估计量 $\hat{\beta}$ 的协方差矩阵为

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \frac{1}{m} [(\tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \tilde{\mathbf{X}})^{-1} + m \mathbf{D}], \quad (3.9)$$

其中 $\mathbf{D}_w = \text{diag}(w, t, r)$, $\tilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & \lambda & \lambda^2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$.

定义 $\gamma_0 = \sqrt{m}\dot{\gamma}_0$, $\gamma_1 = \sqrt{m}\dot{\gamma}_1$, $\gamma_2 = \sqrt{m}\dot{\gamma}_2$. 考虑 D -最优设计准则. 最小化下列 D -最优准则函数

$$|\text{Var}(\hat{\beta})| \propto |\tilde{\mathbf{X}}^T|^{-2} |\mathbf{D}_w^{-1} + \tilde{\mathbf{X}} \mathbf{D} \tilde{\mathbf{X}}^T| = |\tilde{\mathbf{X}}^T|^{-2} \Psi(w, t, r, \lambda) + |\tilde{\mathbf{X}}^T|^{-2} \psi(\lambda), \quad (3.10)$$

其中

$$\begin{aligned} \Psi(w, t, r, \lambda) &= \frac{a}{w} + \frac{b}{t} + \frac{c}{r} + \frac{d}{wt} + \frac{e}{wr} + \frac{f}{tr} + \frac{1}{wtr}, \\ a &= (\gamma_0^2 + \lambda^2 \gamma_1^2 + \lambda^4 \gamma_2^2 + 2\lambda \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + 2\lambda^2 \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + 2\lambda^3 \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2) \\ &\quad \times (\gamma_0^2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + 2\rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + 2\rho_{12} \gamma_1 \gamma_2) \\ &\quad - [\gamma_0^2 + \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + \lambda(\gamma_1^2 + \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2) \\ &\quad + \lambda^2(\gamma_2^2 + \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2)]^2, \\ b &= \gamma_0^2(\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\rho_{12} \gamma_1 \gamma_2) - \gamma_0^2(\rho_{01} \gamma_1 + \rho_{02} \gamma_2)^2, \\ c &= \lambda^2 \gamma_0^2(\gamma_1^2 + 2\lambda \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2 + \lambda^2 \gamma_2^2) - \lambda^2 \gamma_0^2(\rho_{01} \gamma_1 + \lambda \rho_{02} \gamma_2)^2, \\ d &= \gamma_0^2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + 2\rho_{12} \gamma_1 \gamma_2 + 2\rho_{02} \gamma_0 \gamma_2, \\ e &= \gamma_0^2 + 2\lambda \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + 2\lambda^2 \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + \lambda^2 \gamma_1^2 + 2\lambda^3 \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2 + \lambda^4 \gamma_2^2, \\ f &= \gamma_0^2, \end{aligned} \quad (3.11)$$

以及 $\psi(\lambda) = \gamma_0^2 a + 2(\gamma_0^2 + \lambda \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \lambda^2 \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2)(\gamma_0^2 + \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2)[(\gamma_0^2 + \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2) + \lambda(\rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \gamma_1^2 + \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2) + \lambda^2(\rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2 + \gamma_2^2)] - (\gamma_0^2 + 2\lambda \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + 2\lambda^2 \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + \lambda^2 \gamma_1^2 + 2\lambda^3 \rho_{12} \gamma_1 \gamma_2 + \lambda^4 \gamma_2^2)(\gamma_0^2 + \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2)^2 - (\gamma_0^2 + 2\rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + 2\rho_{02} \gamma_0 \gamma_2 + 2\rho_{12} \gamma_1 \gamma_2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2)(\gamma_0^2 + \lambda \rho_{01} \gamma_0 \gamma_1 + \lambda^2 \rho_{02} \gamma_0 \gamma_2)^2$. 固定 λ , 用Lagrange乘法, 求(3.10)在约束条件 $w + t + r = 1$ 下的最小值, 得

$$w^* = a^*/[a^* + b^* + c^*], \quad t^* = b^*/[a^* + b^* + c^*], \quad r^* = c^*/[a^* + b^* + c^*], \quad (3.12)$$

其中

$$a^* = 1 + atr + dr + et, \quad b^* = 1 + bwr + dr + fw, \quad c^* = 1 + cwt + et + fw. \quad (3.13)$$

事实上, 上述最优解 w^*, t^* 和 r^* 仍是 w, t 和 r 的函数. 因此对于给定的 λ , 可以采用迭代算法去求 w^*, t^* 和 r^* . 取 λ 的不同值, 最终可以得到 w, t, r 和 λ 最优值, 进而得到最优解.

考虑模型(3.8)下的一些特殊情形. 情形1, 模型(3.8)中随机系数相互独立场合, 即 $\rho_{01} = \rho_{02} = \rho_{12} = 0$. 在此场合下, (3.11)简化为 $a = \gamma_0^2 \gamma_1^2 (1-\lambda)^2 + \gamma_0^2 \gamma_2^2 (1-\lambda^2)^2 + \gamma_1^2 \gamma_2^2 \lambda^2 (1-\lambda)^2$, $b = \gamma_0^2 (\gamma_1^2 + \gamma_2^2)$, $c = \gamma_0^2 \lambda^2 (\gamma_1^2 + \lambda_2^2 \lambda^2)$, $d = \gamma_0^2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2$, $e = \gamma_0^2 + \gamma_1^2 \lambda^2 + \gamma_2^2 \lambda^4$, $f = \gamma_0^2$, $|\tilde{X}|^{-2} \psi(\lambda) = \gamma_0^2 \gamma_1^2 \gamma_2^2$. 该结论同于Lisiki (2002) (第55页), 所以结论(3.12)可以看成是对Lisiki (2002) (第55页)结论的推广. 情形2, 模型(3.8))为二阶随机截距模型, 即 $\gamma_1^2 = \gamma_2^2 = 0$. 在此场合, 式(3.11)简化为 $a = b = c = 0$, $d = e = f = \gamma_0^2$, $\psi(\lambda) = 0$ 和 $a^* = 1 + \gamma_0^2(r+t)$, $b^* = 1 + \gamma_0^2(r+w)$, $c^* = 1 + \gamma_0^2(w+t)$ 这些量与 λ 无关. 由于 $\det(\tilde{X})^{-2} = 1/(\lambda - \lambda^2)^2$, 因此使得 $|\tilde{X}|^{-2}$ 最小的 λ 值为 $\lambda^* = 0.5$. 情形3, 模型(3.8)为二阶固定效应模型, 即 $\gamma_0^2 = \gamma_1^2 = \gamma_2^2 = 0$. 此时 $w^* = t^* = r^* = 1/3$. 事实上, 该解正是被等价定理所验证了二阶固定效应模型的最优近似设计(Pukelsheim, 1993). 对于上述用数值方法求到的设计的最优性, 我们可以利用等价性定理进行验证.

定理 3.3 对于混合效应模型(2.2)满足 $\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{S}$, 设计 ξ_D^* 为 D -最优设计, 当且仅当

$$d(x, \xi_D^*) = m \mathbf{f}^T(x) \mathcal{I}_F^{-1} \mathcal{I}_M \mathcal{I}_F^{-1} \mathbf{f}^T - \text{tr}[\mathcal{I}_M \mathcal{I}_F^{-1}] \leq 0, \quad \forall x \in \mathcal{X}. \quad (3.14)$$

定理3.3和定理5.1的证明可以参看本文第一作者的博士论文^[21]. 表1给出了部分方差分量已知场合下二阶混合效应模型 D -最优设计. 图1给出了部分场合下由(3.14)定义的函数 $d(x, \xi_D^*)$ 的图像.

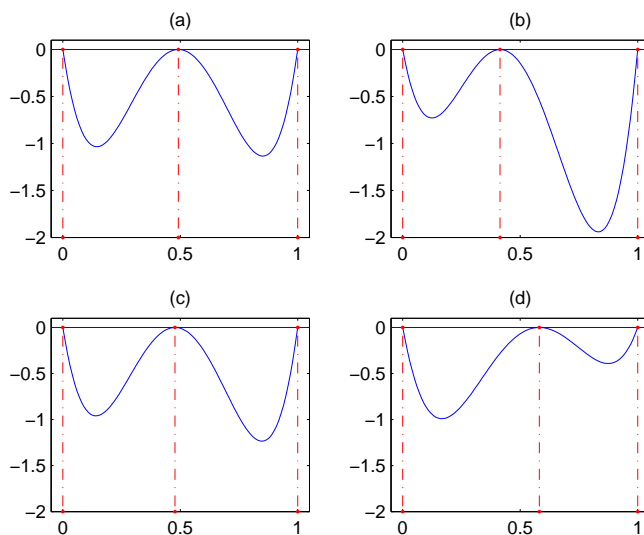


图1 设计区域为 $[0, 1]$ 的二阶混合效应模型由固定效应估计的 D -最优设计确定的函数 $d(x, \xi_D^*)$ 的图像: (a) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (0, 0, 1)$, $(\rho_{01}, \rho_{02}, \rho_{12}) = (0, 0, 0)$; (b) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (0, 100, 0)$, $(\rho_{01}, \rho_{02}, \rho_{12}) = (0, 0, 0)$; (c) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (1, 1, 1)$, $(\rho_{01}, \rho_{02}, \rho_{12}) = (0.5, 0.5, 0.5)$; (d) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (100, 100, 100)$, $(\rho_{01}, \rho_{02}, \rho_{12}) = (-0.5, -0.5, 0.5)$

表1 设计区域为[0, 1]的二阶随机系数模型的D-最优设计

γ_0	γ_1	γ_2	ρ_{01}	ρ_{02}	ρ_{12}	w^*	t^*	r^*	λ^*	RE_D
0	0	0	0	0	0	0.3333	0.3333	0.3333	0.5000	1.000
0	0	1	0	0	0	0.3614	0.3556	0.2830	0.4919	0.9936
0	0	100	0	0	0	0.4997	0.4267	0.0736	0.4145	0.8481
0	1	0	0	0	0	0.3663	0.3447	0.2890	0.4848	0.9944
0	1	1	-0.5	-0.5	-0.5	0.3656	0.3475	0.2869	0.4883	0.9943
0	1	1	0	0	0	0.3829	0.3576	0.2594	0.4806	0.9853
0	1	1	0.5	0.5	0.5	0.3947	0.3643	0.2410	0.4749	0.9769
0	1	100	-0.5	-0.5	-0.5	0.5037	0.4237	0.0725	0.4145	0.8481
0	1	100	0	0	0	0.5050	0.4222	0.0728	0.4145	0.8486
0	1	100	0.5	0.5	0.5	0.5036	0.4230	0.0734	0.4145	0.8489
0	100	0	0	0	0	0.4999	0.3536	0.1465	0.4143	0.9106
0	100	1	-0.5	-0.5	-0.5	0.5026	0.3513	0.1460	0.4143	0.9104
0	100	1	0	0	0	0.5035	0.3510	0.1455	0.4143	0.9100
0	100	1	0.5	0.5	0.5	0.5026	0.3520	0.1455	0.4143	0.9099
0	100	100	-0.5	-0.5	-0.5	0.9391	0.0444	0.0165	0.4263	0.7221
0	100	100	0	0	0	0.9288	0.0539	0.0174	0.4192	0.7271
0	100	100	0.5	0.5	0.5	0.9035	0.0740	0.0225	0.4161	0.7393
1	0	0	0	0	0	0.3333	0.3333	0.3333	0.5000	1.0000
1	0	1	-0.5	-0.5	-0.5	0.3300	0.3467	0.3233	0.5076	0.9994
1	0	1	0	0	0	0.3493	0.3527	0.2980	0.4980	0.9971
1	0	1	0.5	0.5	0.5	0.3635	0.3539	0.2827	0.4900	0.9937
1	0	100	-0.5	-0.5	-0.5	0.4667	0.4488	0.0846	0.4367	0.8802
1	0	100	0	0	0	0.4600	0.4516	0.0884	0.4417	0.8872
1	0	100	0.5	0.5	0.5	0.4673	0.4459	0.0868	0.4370	0.8817
1	1	0	-0.5	-0.5	-0.5	0.3252	0.3496	0.3252	0.5000	0.9994
1	1	0	0	0	0	0.3481	0.3474	0.3045	0.4914	0.9979
1	1	0	0.5	0.5	0.5	0.3662	0.3422	0.2916	0.4854	0.9951
1	1	1	-0.5	-0.5	-0.5	0.2942	0.3344	0.3714	0.5182	0.9947
1	1	1	0	0	0	0.3598	0.3602	0.2800	0.4904	0.9933
1	1	1	0.5	0.5	0.5	0.3884	0.3592	0.2524	0.4778	0.9831
1	1	100	-0.5	-0.5	-0.5	0.4498	0.4656	0.0846	0.4310	0.8762
1	1	100	0	0	0	0.4636	0.4487	0.0877	0.4415	0.8879
1	1	100	0.5	0.5	0.5	0.4760	0.4377	0.0862	0.4384	0.8831
1	100	0	-0.5	-0.5	-0.5	0.4438	0.3899	0.1663	0.4284	0.9375
1	100	0	0	0	0	0.4320	0.3966	0.1715	0.4321	0.9428
1	100	0	0.5	0.5	0.5	0.4449	0.3879	0.1673	0.4289	0.9380
1	100	1	-0.5	-0.5	-0.5	0.4568	0.3791	0.1641	0.4333	0.9378
1	100	1	0	0	0	0.4350	0.3945	0.1705	0.4320	0.9428
1	100	1	0.5	0.5	0.5	0.4439	0.3894	0.1668	0.4271	0.9374
1	100	100	-0.5	-0.5	-0.5	0.9367	0.0443	0.0190	0.4332	0.7233
1	100	100	0	0	0	0.9023	0.0738	0.0240	0.4223	0.8207
1	100	100	0.5	0.5	0.5	0.8789	0.0925	0.0286	0.4198	0.8076
100	100	100	-0.5	-0.5	-0.5	0.0256	0.0441	0.9303	0.5812	0.7267
100	100	100	0	0	0	0.3218	0.4861	0.1922	0.4998	0.9994
100	100	100	0.5	0.5	0.5	0.3241	0.4884	0.1875	0.4982	0.9988

为比较不同设计在估计参数 β 时的效率, 定义设计 ξ 的 D -效率为

$$RE_D = \left(\frac{\det(\text{Cov}(\hat{\beta}(\xi_D^*)))}{\det(\text{Cov}(\hat{\beta}(\xi)))} \right)^{1/p},$$

其中 $\text{Cov}(\hat{\beta}(\xi))$ 是估计量 $\hat{\beta}$ 在设计 ξ 的协方差矩阵. 对于二阶混合效应模型, 我们计算了固定效应模型下的最优设计 $\xi_3 = \{0, 0.5, 1; 1/3, 1/3, 1/3\}$ 的 D -效率, 效率列于表1最后一列. 从表中我们可以看出, ξ_3 的 D -效率与方差分量参数和相关系数的取值有关, 特别是方差分量差异很大时, ξ_3 的 D -效率比较低.

§4. 随机效应估计的最优设计

假定试验者感兴趣的是模型(2.3)中的随机效应参数 b 的估计问题. Verbeke (2000) (第七章)对相关问题背景作了介绍. 我们寻找最优设计使得对 b 的估计越精确越好. 许多方法如经验Bayes方法、Henderson的混合模型方程都可以得到 b 的估计量

$$\hat{b} = QG^T V^{-1}(y - F\hat{\beta}).$$

注意到当 $(Z^T Z)^{-1}$ 存在时, $Z^T \Sigma^{-1} Z = ((Z^T Z)^{-1} + D)^{-1}$, 所以, 容易求得估计量 \hat{b} 的均方误差矩阵为

$$\text{MSE}(\hat{b}) = E(\hat{b} - b)(\hat{b} - b)^T = I_n \otimes D + \left(\frac{1}{n} J_n - I_n \right) \otimes [D((Z^T Z)^{-1} + D)^{-1} D], \quad (4.1)$$

其中 $J_n = \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T$. 使 $\det(\text{MSE}(\hat{b}))$ 达到最小的设计称为随机效应参数 b 估计问题的 D -最优设计. 注意到在模型(2.1)中 $g(x)$ 是多项式时, DLG现象依然存在. 这有助于减轻寻找最优近似设计的困难. 首先, 我们有下列引理.

引理 4.1 令 A 和 B 为 $r \times r$ 矩阵, 那么

$$\det \left(I_n \otimes A + \left(\frac{1}{n} J_n - I_n \right) \otimes B \right) = \det(A) \det(A - B)^{n-1}.$$

该引理的证明是直接的, 故略之. 由(4.1)并利用引理4.1及公式 $(P + Q)^{-1} = P^{-1} - P^{-1}(P^{-1} + Q^{-1})^{-1}P^{-1}$ (P, Q 为可逆阵), 可得

$$\det(\text{MSE}(\hat{b})) = \det(D) \det(Z^T Z + D^{-1})^{-(n-1)}.$$

由上式知, 使 $\det(Z^T Z + D^{-1})$ 达到最大的设计即为估计参数 b 的 D -最优设计. 注意到 $Z^T Z + D^{-1}$ 是模型(2.2)在去掉固定效应项后Bayes框架下估计参数 b 的信息矩阵^[22].

4.1 一阶混合效应模型随机效应估计的D-最优设计

考虑一阶混合效应模型(3.2), 设计区域为 $[0, 1]$. 在该模型中 $\mathbf{Z} = \mathbf{X}$. 对于两点设计 $\xi = \{0, 1; w, 1-w\}$, 经计算可得

$$\begin{aligned} & \det(\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \mathbf{D}^{-1}) \\ &= m^2 \left\{ -(1-w)^2 + \left[1 + \frac{1}{(1-\rho^2)\gamma_0^2} + \frac{2\rho}{\gamma_0\gamma_1(1-\rho^2)} \right] (1-w) + \frac{1+\gamma_0^2}{(1-\rho^2)\gamma_0^2\gamma_1^2} \right\}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

使(4.2)达到最大的 w 为

$$w^* = \begin{cases} \frac{1}{2} - \frac{\gamma_1 + 2\rho\gamma_0}{2(1-\rho^2)\gamma_0^2\gamma_1}, & -1 < \frac{\gamma_1 + 2\rho\gamma_0}{(1-\rho^2)\gamma_0^2\gamma_1} < 1; \\ 0, & \frac{\gamma_1 + 2\rho\gamma_0}{(1-\rho^2)\gamma_0^2\gamma_1} \geq 1; \\ 1, & \frac{\gamma_1 + 2\rho\gamma_0}{(1-\rho^2)\gamma_0^2\gamma_1} \leq -1. \end{cases}$$

特别地, 如果模型中随机截距项和随机斜率项互不相关, 即 $\rho = 0$, 则有

$$w^* = \begin{cases} \frac{1}{2} - \frac{1}{2\gamma_0^2}, & \frac{1}{\gamma_0^2} < 1; \\ 0, & \frac{1}{\gamma_0^2} \geq 1. \end{cases}$$

对于一阶随机截距模型, $\mathbf{Z} = \mathbf{1}_m$, $\mathbf{D} = \gamma_0^2$, 由于D-最优设计准则函数与设计无关, 所以其它设计目标下的最优设计同时也是估计随机效应时的最优设计.

4.2 二阶混合效应模型下估计随机效应的D-最优设计

考虑随机效应互不相关的二阶混合效应模型, 设计区域为 $[0, 1]$. 在该模型中, $\mathbf{Z} = \mathbf{X}$, $\mathbf{D} = \text{diag}\{\gamma_0^2, \gamma_1^2, \gamma_2^2\}$. 对于三点设计 $\xi = \{0, \lambda, 1; w, t, r\}$, 有

$$\det(\widetilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \widetilde{\mathbf{X}} + (m\mathbf{D})^{-1}) \propto \det(\widetilde{\mathbf{X}})^2 \phi(w, t, r) + 1/(\gamma_0^2\gamma_1^2\gamma_2^2),$$

这里 $\phi(w, t, r) = wtr + atr + bwr + cwt + dw + et + fr$, 其中

$$\begin{aligned} a &= \gamma_0^{-2} + \frac{\gamma_1^{-2}(1+\lambda)^2}{\lambda^2} + \frac{\gamma_2^{-2}}{\lambda^2}, & b &= \frac{\gamma_1^{-2} + \gamma_2^{-2}}{(\lambda - \lambda^2)^2}, & c &= \frac{\gamma_1^{-2}\lambda^2 + \gamma_2^{-2}}{(1-\lambda)^2}, \\ d &= \left[\frac{\gamma_1^{-2} + \gamma_2^{-2}}{(\lambda - \lambda^2)^2} \right] \left[\frac{\gamma_1^{-2}\lambda^2 + \gamma_2^{-2}}{(1-\lambda)^2} \right] - \left[\frac{\gamma_1^{-2}\lambda + \gamma_2^{-2}}{\lambda(1-\lambda)^2} \right]^2, \\ e &= \left[\gamma_0^{-2} + \frac{\gamma_1^{-2}(1+\lambda)^2}{\lambda^2} + \frac{\gamma_2^{-2}}{\lambda^2} \right] \left[\frac{\gamma_1^{-2}\lambda^2 + \gamma_2^{-2}}{(1-\lambda)^2} \right] - \left[\frac{\gamma_1^{-2}\lambda(\lambda+1) + \gamma_2^{-2}}{\lambda(1-\lambda)} \right]^2, \\ f &= \left[\gamma_0^{-2} + \frac{\gamma_1^{-2}(1+\lambda)^2}{\lambda^2} + \frac{\gamma_2^{-2}}{\lambda^2} \right] \left[\frac{\gamma_1^{-2} + \gamma_2^{-2}}{(\lambda - \lambda^2)^2} \right] - \left[\frac{\gamma_1^{-2}(\lambda+1) + \gamma_2^{-2}}{\lambda^2(\lambda-1)} \right]^2. \end{aligned}$$

对于给定的 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$ 值, 可通过数值优化方法获得最优设计, 记为 ξ_B^* , 并且, 可用Bayes框架下 D -最优设计的等价性定理判断其最优性, 详见Pilz (1991) (定理11.15). 表2给出了部分设计的结果. 图2是部分结果最优性判断的图示, 其中函数 $d(x, \xi_B^*)$ 定义为

$$d(x, \xi_B^*) = m\mathbf{f}^T(x)\mathcal{I}_B^{-1}\mathbf{f}^T(x) - \text{tr}[\mathcal{I}_B^{-1}\mathcal{I}_F], \quad \mathcal{I}_B^{-1} = \mathcal{I}_F + \mathbf{D}^{-1}.$$

结果表明所求得的设计是 D -最优设计. 表2同时给出了设计 $\xi_3 = \{0, 0.5, 1; 1/3, 1/3, 1/3\}$ 的效率, 该效率定义为

$$\text{RE}_B = \frac{\det(\widetilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \widetilde{\mathbf{X}} + (m\mathbf{D})^{-1}|\xi_3)}{\det(\widetilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \widetilde{\mathbf{X}} + (m\mathbf{D})^{-1}|\xi_B^*)},$$

其中 $\det(\widetilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \widetilde{\mathbf{X}} + (m\mathbf{D})^{-1}|\xi)$ 表示在设计 ξ 下的信息矩阵的行列式.

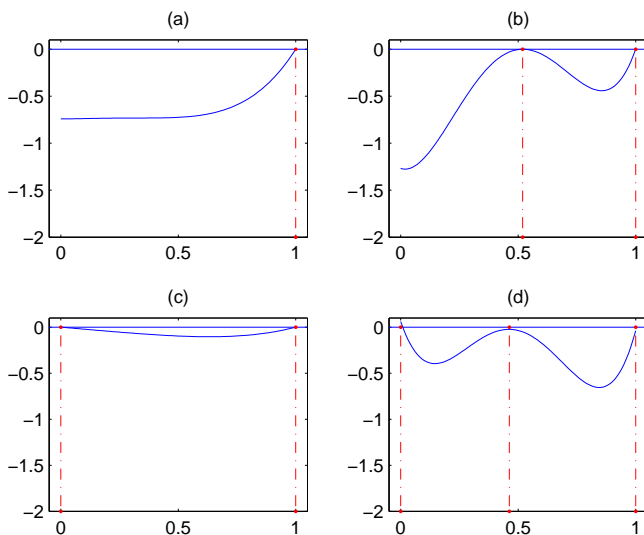


图2 设计区域为 $[0, 1]$ 的二阶混合效应模型由随机效应估计的 D -最优设计确定的函数 $d(x, \xi_B^*)$ 的图像: (a) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (0.5, 1, 10)$; (b) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (0.5, 10, 10)$; (c) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (10, 0.5, 0.5)$; (d) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (10, 10, 10)$

§5. 个体观察值预测的最优设计

本节考虑基于模型(2.1)的个体观测值预测的最优设计问题. 对个体观察值的预测有两类问题需要考虑: 一类是预测新的非试验个体在观测点 x 的观察值 y , 其中 $x \in \mathcal{T} = (h, H]$; 另一类问题类同于第一类问题, 只不过需要预测的个体同时也是被试验的个体. 这里我们假定设计区域为 $\mathcal{X} = [0, h]$. 对于第一类问题, 观察值 y 的一个合理估计是 $\hat{y} = \mathbf{f}^T(x)\hat{\boldsymbol{\beta}}$, 此为群体在 x 的平均观测值. 本节仍假定 $\sigma^2 = 1$. 由定理2.2可得

$$\text{Cov}(\hat{y}) = \frac{1}{n}\mathbf{f}^T(x)(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}\mathbf{f}(x) + \frac{1}{n}\mathbf{f}^T(x)\mathbf{S}\mathbf{D}\mathbf{S}^T\mathbf{f}(x).$$

表2 设计区域为 $[0, 1]$ 的二阶混合效应模型估计随机效应 \mathbf{b} 的 D -最优设计

γ_0	γ_1	γ_2	w^*	t^*	r^*	λ^*	RE_B
0.5	0.5	0.5	0	0	1	1	0.9424
0.5	0.5	1	0	0	1	1	0.8906
0.5	0.5	10	0	0	1	1	0.7421
0.5	1	0.5	0	0	1	1	0.8979
0.5	1	1	0	0	1	1	0.8666
0.5	1	10	0	0	1	1	0.7457
0.5	10	0.5	0	0	1	1	0.7757
0.5	10	1	0	0	1	1	0.7785
0.5	10	10	0	0.3709	0.6291	0.5190	0.8243
1	0.5	0.5	0	0	1	1	0.9698
1	0.5	1	0	0	1	1	0.9381
1	0.5	10	0	0	1	0.7256	0.8174
1	1	0.5	0	0	1	1	0.9423
1	1	1	0	0	1	0.8889	0.9212
1	1	10	0	0	1	0.5589	0.8209
1	10	0.5	0	0	1	1	0.8404
1	10	1	0	0	1	0.8339	0.8434
1	10	10	0	0.3798	0.6202	0.5006	0.8787
10	0.5	0.5	0.4950	0	0.5050	0.0052	0.9885
10	0.5	1	0.4950	0	0.5050	0	0.9765
10	0.5	10	0.4941	0.0009	0.5050	0	0.9023
10	1	0.5	0.4950	0	0.5050	0.3633	0.9739
10	1	1	0.4950	0	0.5050	0.3568	0.9653
10	1	10	0.4949	0	0.5051	0.1689	0.9048
10	10	0.5	0.4950	0	0.5050	0.5159	0.8814
10	10	1	0.4950	0	0.5050	0.5015	0.8844
10	10	10	0.3537	0.2214	0.4249	0.4625	0.9822

通过最小化 $\text{Cov}(\hat{\mathbf{y}})$ 可以求得最优设计. 此时设计与 \mathbf{D} 无关. 因此, 混合效应模型下的最优设计等同于相应固定效应模型下的最优设计. 这类研究结果在Liski (2002)中已做了详细阐述. 因此, 我们主要研究第二类预测的最优设计问题.

在协方差矩阵 \mathbf{D} 已知情况下, 个体 i 在观测点 $x \in \mathcal{T} = (h, H]$ 的观测值 $y_i(x)$ 的BLUP为

$$\tilde{y}_i(x) = \mathbf{f}(x)^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + \boldsymbol{\sigma}_{x \cdot i}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y}_i - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}), \quad (5.1)$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{y}}$, 而 $\boldsymbol{\sigma}_{x \cdot i}$ 是第 j 个分量为 $\text{Cov}(y_i(x), \mathbf{y}_{ij}) = \mathbf{g}(x)^T \mathbf{D} \mathbf{g}(x_i)$ 的

向量. 易证: 任意设计 ξ_P 下 BLUP 的均方误差为

$$\begin{aligned}\text{MSPE}[\tilde{y}_i(x), \xi_P] &= \mathbf{E}[\tilde{y}_i(x) - y_i(x)]^2 \\ &= \frac{n-1}{n} \mathbf{g}^T(x) [(\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}) + \mathbf{D}^{-1}]^{-1} \mathbf{g}(x) + \frac{1}{n} \mathbf{f}^T(x) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(x) + 1.\end{aligned}$$

我们称使下列积分预测均方误差达到最小的设计 ξ_P^* 为 IMSPE-最优设计

$$\begin{aligned}\bar{V}(\xi_P) &= \text{IMSPE}[\tilde{y}_i, \xi_P] = \int_{\mathcal{T}} \sum_{i=1}^n \text{MSPE}[\tilde{y}_i(x), \xi_P] dx \\ &= (n-1) \text{tr}\{[(\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}) + \mathbf{D}^{-1}]^{-1} \mathbf{V}_1\} + \text{tr}[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{V}_2] + n(H-h), \quad (5.2)\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{V}_1 = \int_{\mathcal{T}} \mathbf{g}(x) \mathbf{g}^T(x) dx$, $\mathbf{V}_2 = \int_{\mathcal{T}} \mathbf{f}(x) \mathbf{f}^T(x) dx$.

定理 5.1 对于模型 (2.2), 如果满足 $\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{S}$ 或 $\mathbf{g}^T(x) = \mathbf{f}^T(x)\mathbf{S}$, 则近似设计 ξ_P^* 为 IMSPE-最优设计的充分必要条件为: 对任意 $x \in \mathcal{X}$ 都有

$$\begin{aligned}d(x, \xi_P^*) &= (n-1) m \mathbf{g}^T(x) \mathbf{M} \mathbf{V}_1 \mathbf{M} \mathbf{g}(x) + m \mathbf{f}^T(x) \mathcal{I}_F^{-1} \mathbf{V}_2 \mathcal{I}_F^{-1} \mathbf{f}(x) \\ &\quad - (n-1) \text{tr}\{\mathbf{M} \mathbf{S}^T \mathcal{I}_F \mathbf{S} \mathbf{M} \mathbf{V}_1\} - \text{tr}[\mathcal{I}_F^{-1} \mathbf{V}_2] \leq 0,\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{M} = [\mathbf{S}^T \mathcal{I}_F \mathbf{S} + \mathbf{D}^{-1}]^{-1}$.

5.1 一阶混合效应模型下最优预测设计

与前面讨论过的一阶混合效应模型类似, 此时 $\mathbf{g}(x) = \mathbf{f}(x) = (1, x)^T$, $\mathbf{Z} = \mathbf{X}$. 在设计区域 $\mathcal{X} = [0, h]$ 上, 考虑两点设计 $\xi_P = \{0, h; w, 1-w\}$. 令 $\tilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & h \end{pmatrix}$, $\mathbf{D}_w =$

$$\begin{pmatrix} w & 0 \\ 0 & 1-w \end{pmatrix}, m\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \gamma_0^2 & \rho\gamma_0\gamma_1 \\ \rho\gamma_0\gamma_1 & \gamma_1^2 \end{pmatrix}, \text{ 以及}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{V}_1 = \mathbf{V}_2 = \int_{\mathcal{T}} \mathbf{f}(x) \mathbf{f}^T(x) dx = \begin{pmatrix} H-h & (H^2-h^2)/2 \\ (H^2-h^2)/2 & (H^3-h^3)/3 \end{pmatrix}.$$

因此有

$$\begin{aligned}\bar{V}(\xi_P) &= \frac{n-1}{mn} \text{tr}\{[\tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \tilde{\mathbf{X}} + (m\mathbf{D})^{-1}]^{-1} \mathbf{v}\} + \frac{1}{mn} \text{tr}[(\tilde{\mathbf{X}}^T \mathbf{D}_w \tilde{\mathbf{X}})^{-1} \mathbf{v}] + 1(H-h) \\ &= \frac{n-1}{mn} \frac{(1-w+d_{22})(H-h) - (1-w+d_{12})(H^2-h^2) + (d_{11}+1)(H^3-h^3)/3}{(d_{11}+1)(1-w+d_{22}) - (1-w+d_{12})^2} \\ &\quad + \frac{1}{mn} \left[\frac{H-h}{w} - \frac{H^2-h^2}{w} + \frac{H^3-h^3}{3w(1-w)} \right] + (H-h),\end{aligned}$$

其中

$$d_{11} = \frac{1}{(1-\rho^2)\gamma_0^2}, \quad d_{12} = \frac{-\rho}{(1-\rho^2)\gamma_0\gamma_1}, \quad d_{22} = \frac{1}{(1-\rho^2)\gamma_1^2}.$$

给定参数 $\gamma_0, \gamma_1, \rho, H, h$ 的值, 用最优化数值算法可求最优权重 w^* , 相应的设计记为 ξ_P^* . 利用定理5.1可以判断 ξ_P^* 的最优性. 表3给出当 $n = 30, m = 10, h = 1, H = 2$ 时部分数值结果以及设计 $\xi_2 = \{0, 1; 0.5, 0.5\}$ 的效率. 此处效率计算公式为 $RE_P = \bar{V}(\xi_P^*)/\bar{V}(\xi_2)$.

表3 设计区域为 $[0, 1]$ 的一阶混合效应模型在 $(1, 2]$ 上的IMSPE-最优设计

γ_0	γ_1	ρ	w^*	RE_P	γ_0	γ_1	ρ	w^*	RE_P
0.1	0.1	-0.5	0.2742	0.9985	1.0	1.0	0.5	0.1079	0.9813
0.1	0.1	0.0	0.2739	0.9985	1.0	100	-0.5	0.0665	0.9315
0.1	0.1	0.5	0.2736	0.9985	1.0	100	0.0	0.0680	0.9328
0.1	1.0	-0.5	0.1261	0.9881	1.0	100	0.5	0.0665	0.9315
0.1	1.0	0.0	0.1223	0.9870	100	0.1	-0.5	0.2676	0.9985
0.1	1.0	0.5	0.1192	0.9860	100	0.1	0.0	0.2647	0.9985
0.1	100	-0.5	0.0646	0.9286	100	0.1	0.5	0.2664	0.9985
0.1	100	0.0	0.0646	0.9286	100	1.0	-0.5	0.1206	0.9854
0.1	100	0.5	0.0646	0.9287	100	1.0	0.0	0.1117	0.9821
1.0	0.1	-0.5	0.2838	0.9987	100	1.0	0.5	0.1199	0.9852
1.0	0.1	0.0	0.2671	0.9985	100	100	-0.5	0.2742	0.9701
1.0	0.1	0.5	0.2526	0.9982	100	100	0.0	0.2741	0.9701
1.0	1.0	-0.5	0.1450	0.9912	100	100	0.5	0.2740	0.9701
1.0	1.0	0.0	0.1148	0.9841					

考虑一阶随机截距模型, $\mathbf{Z} = \mathbf{1}_m, g(x) = 1, \mathbf{D} = \gamma_0^2$. 我们有

$$\bar{V}(\xi_P) = \frac{1}{mn} \left[\frac{H-h}{w} - \frac{H^2-h^2}{w} + \frac{H^3-h^3}{3w(1-w)} \right] + c_1, \quad (5.3)$$

其中 c_1 是与 x, w 无关的常数. 最小化 $\bar{V}(\xi_P)$ 得最优权重 w 为

$$w^* = \frac{\sqrt{A-1}}{\sqrt{A-1} + \sqrt{A}},$$

其中 $A = (1 + \phi + \phi^2)/3, \phi = h/H$.

5.2 二阶混合效应模型下最优预测设计

为简单计, 我们考虑随机效应互不相关的二阶混合效应模型, 即 $\mathbf{D} = \text{diag}\{\gamma_0^2, \gamma_1^2, \gamma_2^2\}$, 设计区域为 $\mathcal{X} = [0, h]$. 该场合下 $\mathbf{f}(x) = \mathbf{g}(x), \mathbf{Z} = \mathbf{X}$. 对于三点设计 $\xi_P = \{0, \lambda, h; w, t, r\}$,

$$\widetilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & \lambda & \lambda^2 \\ 1 & h & h^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_w = \begin{pmatrix} w & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}, \quad m\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \gamma_0^2 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_2^2 \end{pmatrix}.$$

$$\text{此时 } \mathbf{V}_1 = \mathbf{V}_2 = \int_{\mathcal{T}} \mathbf{f}(x) \mathbf{f}^T(x) dx = \begin{pmatrix} H-h & (H^2-h^2)/2 & (H^3-h^3)/3 \\ (H^2-h^2)/2 & (H^3-h^3)/3 & (H^4-h^4)/4 \\ (H^3-h^3)/3 & (H^4-h^4)/4 & (H^5-h^5)/5 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \bar{V}(\xi_P) &= \frac{n-1}{mn} \text{tr} \left[\begin{pmatrix} w+t+r+\gamma_0^{-2} & t\lambda+rh & t\lambda^2+rh^2 \\ t\lambda+rh & t\lambda^2+rh^2+\gamma_1^2 & t\lambda^3+rh^3 \\ t\lambda^2+rh^2 & t\lambda^3+rh^3 & t\lambda^4+rh^4+\gamma_2^{-2} \end{pmatrix}^{-1} \mathbf{V}_1 \right] \\ &+ \frac{1}{mn} \text{tr} \left[\begin{pmatrix} w+t+r & t\lambda+rh & t\lambda^2+rh^2 \\ t\lambda+rh & t\lambda^2+rh^2 & t\lambda^3+rh^3 \\ t\lambda^2+rh^2 & t\lambda^3+rh^3 & t\lambda^4+rh^4 \end{pmatrix}^{-1} \mathbf{V}_1 \right] + (H-h). \end{aligned}$$

对于给定的 γ 值, 采用数值优化算法计算到最优权重 w^*, t^*, r^* . 当 $n = 30, m = 10, h = 1, H = 2$ 时部分结果及设计 $\xi_3 = \{0, 0.5, 1; 1/3, 1/3, 1/3\}$ 的效率列于表4. 效率的计算公式为 $RE_P = \bar{V}(\xi_P^*)/\bar{V}(\xi_3)$. 图3给出的函数 $d(x, \xi_P^*)$ 的图像表明所求设计是IMSPE-最优设计.

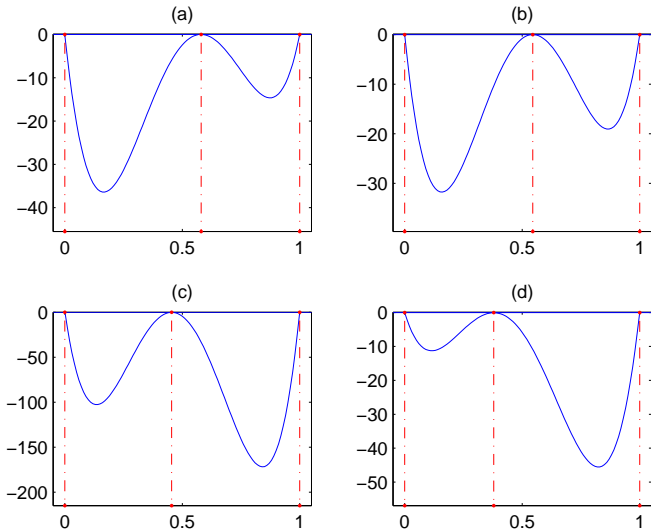


图3 设计区域为 $[0, 1]$ 的二阶混合混合效应模型在 $(1, 2]$ 上的IMSPE-最优设计确定的函数 $d(x, \xi_P^*)$ 的图像: (a) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (0.1, 1, 100)$; (b) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (1, 1, 100)$; (c) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (1, 100, 100)$; (d) $(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = (100, 0.1, 100)$

§6. 结 论

本文研究了混合效应模型下的恒等最优设计. 具体研究了混合效应模型下恒等最优设计与对应固定效应模型下最优设计的关系, 指出在线性最优设计准则下两者等同, 但对非线性最优设计准则如 D -最优和 G -最优等两者可能差异很大. 数值结果表明如果忽略随机效

表4 设计区域为 $[0, 1]$ 的二阶随机系数模型在 $(1, 2]$ 上的IMSPE-最优设计

γ_0	γ_1	γ_2	w^*	t^*	r^*	λ^*	RE_P
0.1	0.1	0.1	0.1616	0.4512	0.3872	0.5010	0.9904
0.1	0.1	1	0.1169	0.3725	0.5106	0.5397	0.9853
0.1	1	0.1	0.1389	0.4295	0.4316	0.5224	0.9888
0.1	1	1	0.1057	0.3569	0.5374	0.5508	0.9806
0.1	1	100	0.0619	0.2256	0.7125	0.5803	0.9059
0.1	100	0.1	0.0854	0.3484	0.5662	0.5793	0.9606
0.1	100	1	0.0866	0.3283	0.5851	0.5729	0.9615
0.1	100	100	0.0418	0.5347	0.4235	0.4361	0.8983
1	0.1	0.1	0.1607	0.4508	0.3885	0.5016	0.9907
1	0.1	1	0.1178	0.3739	0.5082	0.5381	0.9852
1	1	0.1	0.1348	0.4291	0.4361	0.5258	0.9880
1	1	1	0.1095	0.3581	0.5324	0.5463	0.9815
1	1	100	0.0724	0.2111	0.7165	0.5450	0.9131
1	100	0.1	0.0885	0.3272	0.5843	0.5764	0.9609
1	100	1	0.0896	0.3125	0.5980	0.5683	0.9615
1	100	100	0.0403	0.5293	0.4304	0.4547	0.9048
100	0.1	0.1	0.1605	0.4504	0.3891	0.5021	0.9910
100	0.1	1	0.1207	0.3769	0.5024	0.5350	0.9853
100	0.1	100	0.2223	0.2234	0.5543	0.3788	0.9474
100	1	0.1	0.1317	0.4294	0.4390	0.5283	0.9873
100	1	1	0.1194	0.3622	0.5184	0.5357	0.9833
100	1	100	0.2093	0.2350	0.5557	0.3740	0.9473
100	100	0.1	0.2086	0.2495	0.5419	0.5051	0.9771
100	100	1	0.1996	0.2503	0.5501	0.4950	0.9760
100	100	100	0.1597	0.4507	0.3895	0.5010	0.9619

应的存在, 采用固定效应模型下的最优设计来进行试验, 效率可能会比较差. 在寻找具体准则下的最优设计时, 利用DLG现象和Loewner偏序作为工具将最优设计简化到一容许类内, 然后用解析方法或数值方法求最优解. 最优设计的解析解一般比较少, 我们只在一些比较简单模型简单问题下可以求到, 大部分情况只能用数值优化的手段来求最优设计的数值解. 解的最优性与数值优化算法和参数条件有一定关系. 尽管如此对所求数值解是否是真正的最优解, 我们可以采用等价性定理这一有效的工具来进行验证.

本文所求到的设计都是局部最优设计. 如果所给参数的估计值远远偏离真实值, 则这种设计效率可能会比较差, 因此如何利用本文的工具构造更复杂的设计准则如Bayes设计, Maximin设计等, 使得最优设计比较稳健是我们以后进一步需要探讨的话题. 另外本文在解决线性混合效应模型下的最优设计时, DLG现象对简化问题的讨论发挥了很大的作用.

对于非线性回归模型, Yang (2010)发现了在一定条件下这一现象也是成立的. 因此笔者希望能将本文提出的方法推广至非线性混合效应模型.

参 考 文 献

- [1] Verbeke, G. and Molenberghs, G., *Linear Mixed Models for Longitudinal Data*, New York: Springer-Verlag, 2000.
- [2] Cheng, C.S., Optimal regression designs under random block-effects models, *Statistica Sinica*, **5**(2) (1995), 485–497.
- [3] Atkins, J.E. and Cheng, C.S., Optimal regression designs in the presence of random block effects, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **77**(2)(1999), 321–335.
- [4] Abt, M., Liski, E.P., Mandal, N.K. and Sinha, B.K., Optimal designs in growth curve models: Part I Correlated model for linear growth: optimal designs for slope parameter estimation and growth prediction, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **64**(1)(1997), 141–150.
- [5] Abt, M., Gaffke, N., Liski, E.P. and Sinha, B.K., Optimal designs in growth curve models – II Correlated model for quadratic growth: optimal designs for parameter estimation and growth prediction, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **67**(2)(1998), 287–296.
- [6] Ouwens, M.J.N.M., Tan, P.E.S. and Berger, M.P.F., Maximin D-optimal designs for longitudinal mixed effects models, *Biometrics*, **58**(4)(2002), 735–741.
- [7] Berger, M.P.F. and Tan, P.E.S., Robust designs for linear mixed effects models, *Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)*, **53**(4)(2004), 569–581.
- [8] Schmelter, T., The optimality of single-group designs for certain mixed models, *Metrika*, **65**(2) (2007a), 183–193.
- [9] Schmelter, T., Considerations on group-wise identical designs for linear mixed models, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **137**(12)(2007b), 4003–4010.
- [10] Debusho, L.K. and Haines, L.M., V- and D-optimal population designs for the simple linear regression model with a random intercept term, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **138**(4)(2008), 1116–1130.
- [11] Debusho, L.K. and Haines, L.M., D- and V-optimal population designs for the quadratic regression model with a random intercept term, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **141**(2)(2011), 889–898.
- [12] Graßhoff, U., Doeblér, A., Holling, H. and Schwabe, R., Optimal design for linear regression models in the presence of heteroscedasticity caused by random coefficients, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **142**(5)(2012), 1108–1113.
- [13] Mielke, T., D-optimal designs for paired observations in quadratic regression with mixed effects, *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, **41**(7)(2012), 1107–1119.
- [14] Chernoff, H., Locally optimal designs for estimating parameters, *The Annals of Mathematical Statistics*, **24**(4)(1953), 586–602.
- [15] Pukelsheim, F., *Optimal Design of Experiments*, Wiley, New York, 1993.
- [16] Luoma, A., Nummi, T. and Sinha, B.K., Optimal designs in random coefficient cubic regression models, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **137**(11)(2007), 3611–3617.

- [17] Liski, E.P., Mandal, N.K., Shah, K.R. and Sinha, B.K., *Topics in Optimal Design*, New York: Springer-Verlag Inc., 2002.
- [18] Elfving, G., Optimum allocation in linear regression theory, *The Annals of Mathematical Statistics*, **23**(2)(1952), 255–262.
- [19] De la Garza, A., Spacing of information in polynomial regression, *The Annals of Mathematical Statistics*, **25**(1)(1954), 123–130.
- [20] Rao, C.R., Least squares theory using an estimated dispersion matrix and its applications to measurement of signals, *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability 1*, University of California Press, 1967, 355–372.
- [21] 周晓东, 线性混合效应模型的最优设计与稳健设计, 上海师范大学博士论文, 上海, 2012.
- [22] Pilz, J., *Bayesian Estimation and Experimental Design in Linear Regression Models*, New York: Wiley, 1991.
- [23] Yang, M., On the de la Garza phenomenon, *The Annals of Statistics*, **38**(4)(2010), 2499–2524.

Optimal Designs for Balanced Linear Mixed-Effects Regression Models

ZHOU XIAODONG

(International Business and Information School, Shanghai University of International Business and Economics, Shanghai, 201620)

YUE RONGXIAN

(Mathematics and Sciences College, Shanghai Normal University, Shanghai, 200234)

The paper investigates the problem of optimal balanced designs in general linear regression models with mixed effects. The interest lies in estimating fixed effects, random effects and prediction of the future observation of an individual, respectively. By using the de la Garza phenomenon and Loewner order domination, the dimension of determining the optimal designs are reduced. The optimal designs are derived by using analytical or numerical methods, and their optimalities are verified through the general equivalence theorems.

Keywords: de la Garza phenomena, Loewner order domination, mixed effects model, optimal design.

AMS Subject Classification: 62K05.