

國立臺北大學統計學系  
碩士論文

指導教授：陳秉洋 博士

以合成最佳化演算法生成加速壽命試驗之  
模型辨識設計

Model Discrimination Design Generation  
for Accelerated Life Testing Experiments  
via Hybridized Optimization Algorithms

研究生：林貫原

中華民國 一 一 四 年 六 月

# 國立臺北大學碩士學位論文

## 考試委員會審定書

以合成最佳化演算法生成加速壽命試驗之模型辨識設計  
Model Discrimination Design Generation for Accelerated Life Testing  
Experiments via Hybridized Optimization Algorithms

本論文係 林貫原 於國立臺北大學統計學系完成之  
碩士學位論文，於中華民國 114 年 6 月 6 日承下列考試委  
員審查通過及口試合格，特此證明

論文考試委員簽名：

委員(召集人)

張升乾

委員(指導教授)

陳秉璋

委員

李宜真

委員

楊鈞樞

委員

系(所)主任簽名：

蘇南誠

## 國立臺北大學一一三學年度第二學期碩士學位論文提要

論文題目: 以合成最佳化演算法生成加速壽命試驗之模型辨識設計

論文頁數: 97

所組別: 統計學系碩士班 系(所)        組(學號: 711233119 )

研究生: 林貫原 指導教授: 陳秉洋

論文提要內容: 本研究旨在探討加速壽命試驗中，當存在多個候選模型可描述產品失效機制時，如何建構最適模型辨識設計。在此，於實驗設計的考量上，相較於對各候選模型參數的精準估計，如何能夠有效區分模型，確保所選模型貼近產品真實的失效機制，應為首要目標。加速壽命試驗透過施加高於正常使用條件的應力，以加速產品失效並在有限時間內取得壽命資料。然而，儘管進行加速，試驗結束時仍可能有樣本未發生失效，導致資料中出現設限現象。此類設限資料的特性，在既有模型辨識實驗設計的文獻中尚缺乏系統性的探討。本研究首先探討在樣本可能為設限資料的情況下，如何建構最適模型辨識準則，基於改良後的 Kullback-Leibler 散度、Lin-Wong 散度、Chi-Square 距離與 Bhattacharyya 距離，提出 CKL-、CLW-、 $C\chi^2$ - 及 CB-最適模型辨識設計準則，以因應不同資料特性與應用需求。另外，由於設計準則之數學結構複雜且為最大最小化的巢狀優化問題，不易推導最適設計之封閉解，本研究結合粒子群優化與梯度下降優化方法，構建一套高效的數值搜尋演算法，以尋找具最大模型辨識效力的實驗配置。為驗證方法之穩定性與有效性，本研究舉可靠度研究中常用的失效模型為案例進行數值實驗，考慮不同情境的失效機制與機率分布假設之候選模型，比較所提出之各種設計準則之模型辨識設計結果及效果，期望為後續可靠度試驗的實驗設計提供理論依據與實務參考。

關鍵詞: 模型辨識設計、加速壽命試驗模型、粒子群優化演算法

# ABSTRACT

## MODEL DISCRIMINATION DESIGN GENERATION FOR ACCELERATED LIFE TESTING EXPERIMENTS VIA HYBRIDIZED OPTIMIZATION ALGORITHMS

by

LIN, KUAN-YUAN

June 2025

ADVISOR: Dr. CHEN, PING-YANG

DEPARTMENT: DEPARTMENT OF STATISTICS

MAJOR: STATISTICS

DEGREE: MASTER OF SCIENCE

This study aims to investigate the construction of optimal model discrimination designs in Accelerated Life Testing (ALT) when multiple candidate models are available to describe the product's failure mechanism. In this context, rather than focusing on the precise estimation of parameters within each candidate model, the primary objective of experimental design should be to effectively distinguish between competing models and ensure that the selected model closely reflects the true underlying failure behavior of the product. Accelerated Life Testing accelerates product failure by applying stress levels beyond normal use conditions, thereby enabling lifespan data to be collected within a limited timeframe. However, even under such accelerated conditions, some units may not fail by the end of the test, resulting in Type I censored data. The presence of censoring introduces unique data characteristics that have not been systematically addressed in the existing literature on model discrimination design. To address this gap, the present study first explores how to construct optimal model discrimination criteria under the possibility of Type I censored observations. Based on modified forms of Kullback–Leibler divergence, Lin–Wong divergence, Chi-square distance, and Bhattacharyya distance, we propose four new design criteria tailored for model discrim-

ination under censoring: the CKL-, CLW-,  $C\chi^2$ -, and CB-optimal criteria. These criteria are designed to accommodate varying data characteristics and practical application needs. Due to the mathematical complexity of the proposed design criteria, each involving a nested max – min optimization problem, deriving closed-form solutions is generally intractable. To this end, we develop a computationally efficient numerical algorithm that combines Particle Swarm Optimization with gradient-based optimization methods to search for the optimal model discrimination designs. To validate the effectiveness of the proposed approach, we conduct numerical studies using commonly adopted failure models in reliability research. Through various scenarios of failure behavior and underlying probability distribution assumption of the candidate models, we show for each proposed criterion the resulting model discrimination designs and discuss their performances. The results are intended to provide both theoretical guidance and practical reference for experimental planning in future reliability studies.

KEY WORDS: Model Discrimination Design, Accelerated Life Testing Model, Particle Swarm Optimization



# 目 錄

<b>1 緒論</b>	<b>1</b>
<b>2 文獻回顧</b>	<b>3</b>
2.1 加速壽命試驗	3
2.2 模型辨識設計	8
2.3 尋找模型辨識設計的數值方法	10
2.4 現有應用於 ALT 的模型辨識設計方法	13
<b>3 方法論</b>	<b>19</b>
3.1 KL-optimal 準則	19
3.2 在 Type I 設限資料下模型辨識準則	23
3.3 透過數值積分以計算準則值	26
3.4 用於模型辨識設計生成的 PSO-QN 演算法	27
<b>4 數值研究</b>	<b>31</b>
4.1 透過非設限範例進行整合方法比較	31
4.2 Type I 設限下給定對立模型變異數之模型辨識設計	40
4.3 Type I 設限下對立模型變異數參數化之模型辨識設計	48
4.3.1 相同分佈假設下競爭平均反應函數之變異參數化	48
4.3.2 競爭分佈假設下相同平均反應函數之應力相依變異	53
<b>5 結論與未來研究方向</b>	<b>57</b>
5.1 研究結論與貢獻	57

5.2 未來研究建議 .....	58
參考文獻	61
A 模型辨識設計結果之方向導數圖	65
B R 實作範例說明	81
C Shiny 介面展示與功能說明	91





## 圖目錄

2.1	PSO 速度運動示意圖 . . . . .	12
2.2	PSO 流程圖 . . . . .	13
2.3	ALT 概念圖 (Nasir and Pan, 2015) . . . . .	14
4.1	針對平均反應函數為 MMM 與 MM 模型並假設皆為對數 常態分佈之情境，所產生之模型辨識設計的方向導數圖 . .	35
4.2	針對平均反應函數為 MMM 與 MM 模型並假設皆為韋伯 分佈之情境，所產生之模型辨識設計的方向導數圖 . . . . .	39
4.3	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之對數 常態分佈情境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。 . . . .	49
4.4	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之韋伯 分佈情境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。 . . . . .	50
A.1	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情 境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.1。 . . . . .	66
A.2	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數 常態分佈情境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。相關 結果列於表 4.2。 . . . . .	67
A.3	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之韋伯 分佈情境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果 列於表 4.2。 . . . . .	68

A.4	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之 $\xi_{CLW}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.3。	69
A.5	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之 $\xi_{CLW}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.4。	70
A.6	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之 $\xi_{CLW}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.4。	71
A.7	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之 $\xi_{CB}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.5。	72
A.8	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之 $\xi_{CB}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.6。	73
A.9	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數韋伯分佈情境，所產生之 $\xi_{CB}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.6。	74
A.10	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之 $\xi_{C\chi^2}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.7。	75
A.11	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之 $\xi_{C\chi^2}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.8。	76
A.12	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之韋伯分佈情境，所產生之 $\xi_{C\chi^2}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.8。	77

A.13 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依、假設真實模型為對數常態分佈之情境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.12。 . . . . .	78
A.14 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依、假設真實模型為韋伯分佈之情境，所產生之 $\xi_{CKL}^*$ 設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.12。 . . . . .	79
B.1 由程式碼範例產生的方向導數圖以驗證設計最佳性 . . . . .	89
C.1 主介面總覽圖 . . . . .	92
C.2 選擇散度計算方法 . . . . .	93
C.3 選擇模型分配假設 . . . . .	93
C.4 演算法設定選項 . . . . .	94
C.5 使用者設定參數的摘要表 . . . . .	95
C.6 設定設限時間 . . . . .	95
C.7 Arrhenius 分頁下之選擇散度衡量方法 . . . . .	96
C.8 Meeker 分頁下之模型分配選項 . . . . .	96



## 表目錄

4.1	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之境，所產生之 CKL-optimal 設計的結果。 . . . . .	44
4.2	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之境，所產生之 CKL-optimal 設計的結果。 . . . . .	44
4.3	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之境，所產生之 CLW-optimal 設計的結果。 . . . . .	45
4.4	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之境，所產生之 CLW-optimal 設計的結果。 . . . . .	45
4.5	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之境，所產生之 CB-optimal 設計的結果。 . . . . .	46
4.6	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之境，所產生之 CB-optimal 設計的結果。 . . . . .	46
4.7	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之境，所產生之 $C\chi^2$ -optimal 設計的結果。 . . . . .	47
4.8	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之境，所產生之 $C\chi^2$ -optimal 設計的結果。 . . . . .	47
4.9	針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之境，給定變異數與變異數參數化所產生之 CKL-optimal 設計的設計點、權重、在設限時間前產品失效之累積機率 ( $\sigma = 0.9780103$ )。 . . . . .	52

4.10 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，給定變異數與變異數參數化所產生之 CKL-optimal 設計的設計點、權重、在設限時間前產品失效之累積機率 ( $\sigma = 1.4780103$ )。	52
4.11 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依時之模擬設定	55
4.12 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依時之情境，所產生之 CKL-optimal 設計的結果。	55



# 第一章

## 緒論

在加速壽命試驗 ( Accelerated Life Testing, ALT ) 研究中，實驗設計的主要目標通常是提高參數估計的精度，例如透過  $c$ -optimal 設計來最小化參數估計的變異。然而，當存在多個候選模型時，僅關注參數估計可能不足以確保模型的正確性。我們關注的核心問題是：如何設計實驗，使所收集的數據能有效區分不同的加速壽命模型，進而選擇最能反映產品實際失效行為的模型？這正是模型辨識設計 ( Model Discrimination Design ) 所要解決的關鍵挑戰。

可靠度試驗是產品壽命分析中的重要環節，而 ALT 是透過施加高於正常使用條件的應力 ( 如溫度、濕度、震動等 ) 來加速產品老化，使研究人員能在有限時間內觀察失效現象。多數 ALT 模型以 Arrhenius 模型為基礎，假設壽命與溫度呈指數關係。然而，在實際應用中，可能存在多個結構不同但皆合理的模型，導致無法單靠既有經驗選定最佳模型。因此，如何透過設計適當的實驗條件，以產生能夠有效區分模型的資料，是 ALT 設計的重要議題。另一方面，即使在加速條件下進行試驗，產品仍可能未於測試期間發生失效，導致資料呈現 Type I 設限 ( Type I censored ) 現象。此時，研究者需設定合理的設限時間 ( censoring time )，以控制試驗成本與時程，同時確保資料仍具備足夠資訊進行分析。因此，在考慮模型辨識設計時，設限資料的特性亦須一併納入評估。

雖然模型辨識設計在其他領域已有所研究，但在 ALT 中仍相對較少受到關注。例如，[Nasir and Pan \(2015\)](#) 提出的模型辨識方法主要基於貝葉斯最佳化策略，透過 Hellinger 距離來評估模型區分能力。然而，該方法在計算成本與結果穩定性方面仍存在挑戰，且主要聚焦於特定測試條件，未廣泛考慮不同類型的距離衡量準則。因此，本研究希望進一步探索加速試驗下的模型辨識問題，並考慮 Type I 設限數據 (censored data) 對實驗設計的影響。

此研究第一個主要貢獻，在於提出四種基於不同散度的模型辨識設計方法，分別為 CKL-、CLW-、CB- 與  $C\chi^2$ -optimal，這些準則皆針對設限情境下的實驗資料進行調整，期望提供更具彈性與準確性的模型選擇依據。

如何生成模型辨識是這項研究的另一個關鍵。由於涉及的最佳化問題是嵌套的，並且通常缺乏目標函數的封閉解，我們進一步提出了一種高效的混合搜索演算法，結合粒子群優化 (PSO) 和基於牛頓法的方法，例如 L-BFGS 算法，以提高計算效率和收斂穩定性。我們展示了這種方法如何在合理的計算時間內識別出具有高模型區分能力的實驗設計，並通過數值模擬驗證其性能。

本論文的架構如下：章節 2 回顧相關文獻，探討模型辨識設計的發展與現有最佳化標準。章節 3 提出我們的設計準則與最佳化演算法。章節 4 展示數值實驗結果，並比較不同設計標準在不同情境下的表現。章節 5 則總結主要發現並提出了可能的未來研究方向。



## 第二章

## 文獻回顧

### 2.1 加速壽命試驗

生產高可靠性產品一直是製造業的重要目標之一。在產品研發的初期階段，確認產品壽命是否符合既定標準至關重要。然而，當預期壽命遠遠超過可測試的時間時，常用的方法是進行加速壽命試驗 (Accelerated Life Testing, ALT)。該方法通過改變環境條件（例如提高溫度、增加振動頻率等）來加速產品的老化過程，並通過設定不同的應力條件來收集數據，結合數學模型外推產品在正常使用條件下的壽命分佈。例如，藥品穩定性試驗通常需在幾週內完成。根據 [Guideline et al. \(2003\)](#) 指導文件，建議在高溫、高濕環境中進行加速測試，以 Pfizer 為例，在新藥研發中，該公司會通過加速穩定性試驗模擬 2 至 5 年的儲存條件。同樣地，電動車電池的目標壽命通常為 8 至 10 年或 100,000 公里以上，但由於實際測試無法覆蓋這麼長的時間，研究人員通常通過估計電池容量隨時間的衰減曲線，進一步外推電池在實際使用條件下的壽命。[Uddin et al. \(2017\)](#) 在不同溫度與充放電速率下的加速試驗結果來模擬長期使用情境，用於預測鋰電池在實際駕駛條件下的性能衰退。

[Arrhenius \(1889\)](#) 提出的 Arrhenius 模型為化學反應動力學奠定了理論基礎，並被廣泛應用於可靠度分析和 ALT 等領域。該模型描述了溫度對化學反應速率或產品壽命的影響，並假設產品的失效過程遵循

Arrhenius 方程。該方程表示為：

$$t(T) = A \cdot \exp\left(\frac{E_a}{K \cdot Temp}\right), \quad (2.1)$$

其中：

- $t(T)$ ：在溫度  $Temp$  下產品的壽命；
- $A$ ：頻率因子 ( Pre-exponential Factor )，與產品的內在性質相關，是常數；
- $E_a$ ：活化能 ( Activation Energy )，表示驅動失效過程所需的能量，單位為電子伏特；
- $K$ ：玻爾茲曼常數 ( Boltzmann Constant,  $8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$  )；
- $Temp$ ：克爾文溫度 ( Kelvin,  $^{\circ}\text{C} + 273.15$  )。

該模型假設失效速率與溫度之間呈指數關係，表示在高溫條件下，失效速率顯著加快。這一特性使得 Arrhenius 模型成為 ALT 中的核心工具，透過高溫數據的收集，可以外推產品在正常使用條件下的壽命。然而，在實務應用中，模型的準確性受多種因素影響，特別是在實驗設計、參數估計與模型辨識方面存在挑戰。

首先，溫度點的選擇是 ALT 中影響結果準確性的關鍵因素。如果所選的測試溫度過低，需要耗費大量時間和成本進行測試才能觀察到產品失效，無法有效縮短測試週期；反之，若溫度過高，雖可加速產品失效，但可能導致實驗條件與實際使用情境落差過大，降低結果的外推性與實用性。因此，如何在有限次數內選擇合適的溫度點成為一個重要課題。

其次，在參數估計方面，活化能  $E_a$  和頻率因子  $A$  的準確性對於壽命預測至關重要。傳統上，透過最小平方估計 ( Least Squares Estimation, LSE ) 或最大概似估計 ( Maximum Likelihood Estimation, MLE ) 來推算參數。然而，在 ALT 中，設限數據 ( censored data ) 是

無可避免的，因為測試時間有限，部分產品在測試結束時仍未失效。因此，標準估計方法可能不適用，必須考慮設限數據下的修正概似函數 ( Modified Likelihood Function )，確保參數估計在 ALT 框架下的統計合理性。

在 MLE 框架下，假設我們對  $j$  個不同的溫度 ( 應力 )  $T_j$  下的樣本進行測試，並測量  $n$  個個別樣本的壽命，所以我們記錄溫度  $T_j$  下，第  $i$  個樣本的壽命，記作  $t_{ij}$ 。我們認為壽命  $t_{ij}$  服從  $Weibull(\lambda, \beta)$ ，其中  $\lambda_j$  是對應溫度  $T_j$  的尺度參數，因此需透過 Arrhenius 模型來決定， $\beta$  是形狀參數 ( 通常假設所有溫度條件下形狀參數相同 )：

$$f(t_{ij}; \lambda_j, \beta) = \beta \lambda_j t_{ij}^{\beta-1} \exp(-\lambda_j t_{ij}^\beta)$$

其中：

1.  $\lambda_j$  由 Arrhenius model 決定：

$$\lambda_j = A^{-1} \exp\left(-\frac{E_a}{KT_j}\right)$$

2.  $\beta$  是 Weibull 形狀參數 ( 通常已知或額外估計 )。

若所有產品皆失效 ( 無 Type I 設限數據 )，則概似函數 ( Likelihood Function ) 為：

$$L(A, E_a, \beta) = \prod_j \prod_{i=1}^{n_j} f(t_{ij}; \lambda_j, \beta)$$

對數概似函數 ( Log-Likelihood Function ) 為：

$$\ell(A, E_a, \beta) = \sum_j \sum_{i=1}^{n_j} \left[ \ln \beta + (\beta - 1) \ln t_{ij} - \ln A - \frac{E_a}{KT_j} - A^{-1} e^{-\frac{E_a}{KT_j}} t_{ij}^\beta \right]$$

然而，在 ALT 中，部分樣本因時間限制而未失效，形成 Type I 設限數據，這時概似函數需考慮存活函數 ( Survival Function )：

$$S(t; \lambda_j, \beta) = \exp(-\lambda_j t^\beta)$$

因此，修正後的概似函數為：

$$\begin{aligned} L(A, E_a, \beta) &= \prod_j \prod_{i \in \text{失效}} f(t_{ij}; \lambda_j, \beta) \times \prod_{i \in \text{設限}} S(t_{ij}; \lambda_j, \beta) \\ &= \prod_j \prod_{i \in \text{失效}} \beta \lambda_j t_{ij}^{\beta-1} \exp(-\lambda_j t_{ij}^\beta) \times \prod_{i \in \text{設限}} \exp(-\lambda_j t_{ij}^\beta) \end{aligned}$$

取對數後，修正後的對數概似函數為：

$$\begin{aligned} \ell(A, E_a, \beta) &= \sum_j \sum_{i \in \text{失效}} \left[ \ln \beta + (\beta - 1) \ln t_{ij} - \ln A - \frac{E_a}{KT_j} - A^{-1} e^{-\frac{E_a}{KT_j}} t_{ij}^\beta \right] \\ &\quad - \sum_j \sum_{i \in \text{設限}} A^{-1} e^{-\frac{E_a}{KT_j}} t_{ij}^\beta \end{aligned}$$

換句話說，ALT 中的參數估計必須與 Type I 設限數據對應的概似函數共同調整，才能獲得穩健的結果。目標是估計影響產品壽命的關鍵參數  $A$ 、 $E_a$  和  $\beta$ ，我們需要尋找修正後對數概似函數達到最大值的參數估計值  $\hat{A}, \hat{E}_a, \hat{\beta}$ ：

為了得到最適合 ALT 數據的參數估計值，我們透過解以下方程組來估計：

$$\frac{\partial \ell}{\partial A} = 0, \quad \frac{\partial \ell}{\partial E_a} = 0, \quad \frac{\partial \ell}{\partial \beta} = 0$$

透過 MLE 獲得的參數  $\hat{A}, \hat{E}_a, \hat{\beta}$  能夠確保 ALT 模型的準確性，進而有效推估產品在正常操作條件下的壽命。

在過去的研究中， $c$ -optimal 設計被廣泛應用，其主要目標是透過選擇最佳的實驗條件（如溫度點），最小化關鍵參數的估計變異。特別是在 ALT 研究中， $c$ -optimal 設計被廣泛用於提高活化能  $E_a$  的估計精度，以確保壽命模型的可靠性。

例如：

1. [Lu et al. \(2019\)](#) 提出了一種基於雙重目標的貝葉斯序貫設計方法，結合 D-optimal 和  $c$ -optimal 準則，前者應用於實驗的早期階段，

以快速提高模型參數估計的精度，後者則在後期階段專注於最小化特定壽命分位數（如第  $p$  百分位壽命）的估計變異，確保壽命預測的穩定性與準確性。

2. [Abd El-Raheem \(2020\)](#) 探討了  $c$ -optimal 設計在多重加速壽命試驗（Multiple ALT）中的應用，並比較了不同最佳化準則（D-,  $c$ -, A-optimal）在實驗設計效能上的表現，同時進行了敏感性分析（sensitivity analysis）來評估錯誤參數設定對設計結果的影響。
3. [Newer et al. \(2024\)](#) 研究了  $c$ -optimal 設計在 ALT 中的應用，特別是在漸進 Type-I 設限（Progressive Type-I Censoring, PTIC）條件下。他們比較了多種最佳化準則（D-, E-, T-,  $c$ -, R-, P-optimal），並發現  $c$ -optimal 方法能夠有效最小化壽命分佈的特定參數（如 Weibull 分佈中的尺度參數  $\lambda_0$ ）的估計變異。研究結果顯示， $c$ -optimal 設計在步進應力加速壽命試驗（SALT）中，能夠在測試資源有限的條件下，提高壽命分佈關鍵參數的估計精度。

最後，在 ALT 研究中，模型辨識問題往往被忽視。雖然 Arrhenius 模型在許多溫度加速試驗中廣泛應用，但在某些產品或材料中，高溫可能會觸發額外的物理或化學機制，導致失效模式發生變化。例如，在某些電子元件中，高溫可能不僅加速老化，還可能引發電遷移（Electromigration）或介電層破壞（Dielectric Breakdown），這些失效機制未必能完全由 Arrhenius 模型準確描述。因此，如何透過實驗數據檢驗 Arrhenius 模型的適用性，並考慮可能的替代模型，是 ALT 設計中不可忽視的課題。

然而，我們發現現有研究多關注於提升參數估計的精度，例如透過  $c$ -optimal 設計來提高模型參數的估計效率，但較少考慮當兩個模型同樣基於 Arrhenius 框架，但其數學結構存在差異時，如何設計實驗來有效區分這些模型。這引出了另一個重要問題：是否能夠透過實驗設計，使未來的數據能夠有效區分這類競爭模型？這類方法被稱為模型辨識設計

( Model Discrimination Design )，其核心目標是選擇合適的實驗條件，使不同模型在觀測數據上的行為產生顯著差異，從而提升模型選擇的準確性。

## 2.2 模型辨識設計

在實務應用上，無論是科技業、製造業，或其他快速發展的領域，其發展變化的速度往往呈現指數級增長。在此背景下，原本所採用的模型可能因環境變化而逐漸失去適用性，導致模型的預測準確度下降，甚至影響決策的有效性。因此，如何判斷應該繼續沿用現有模型，還是更新為更能反映當前環境的新模型，成為一項重要課題。為了做出最佳決策，模型辨識設計可用來比較不同模型的適用性。在面對新的環境變數時，決策者不應單純地捨棄舊模型或全面採用新模型，而應透過嚴謹的統計方法，客觀評估各種模型的適用性，確保選擇的模型能夠有效反映當前情境，進而提升決策的準確性與可靠性。

Atkinson and Fedorov (1975a,b) 提出了用於區分兩個對立模型的實驗設計方法，假設模型服從常態分佈，並提出了 T-optimal 設計。假設現在有兩個高斯模型，它們具有相同的變異數  $\sigma^2$  但不同的平均反應函數，分別為  $\eta_1(x, \theta_1)$  和  $\eta_2(x, \theta_2)$ 。希望比較這兩個模型。在實務中，第一個模型通常被認為是已知的，可能來自於專家的意見或基於過往經驗的現有現狀。因此，我們假設第一個模型是真實模型，並記其參數為已知的  $\theta_1 = \theta_{tr}$ ，即  $\eta_{tr}(x) = \eta_1(x, \theta_{tr})$ 。第二個模型則是對立模型，記為  $\eta_r(x, \theta_2) = \eta_2(x, \theta_2)$ ，其中  $\theta_2 \in \Theta_2$  是未知的。

為了在沒有資料的情況下進行模型辨識，採用了 T-optimal 設計標準，其目標函數如公式 (2.2) 所示：

$$T_{2,tr}(\xi) = \min_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_X \Delta_{2,tr}(x, \theta_2) \xi(dx) \quad (2.2)$$

其中， $\Delta_{2,tr}(x, \theta_2) = [\eta_{tr}(x) - \eta_2(x, \theta_2)]^2$ ， $\xi$  是實驗設計的分佈。我們的目標是選擇一個設計分佈  $\xi$ ，使得當我們最小化  $\theta_2$  引起的模型差異後，兩



個模型的差異仍然足夠大，以便後續的數據分析能清楚地區分這兩個模型。

然而，T-optimal 設計的目標僅僅是在最小化兩個模型對應於  $\theta_2$  的差異情況下進行設計，但我們希望進一步確保所選設計在未來收集到數據後，兩個模型的差異只會更加顯著。因此，我們提出一個基於最大化策略的設計方法，這導致了目標函數的調整，如公式 (2.3) 所述：

$$\max_{\xi \in \Xi} T_{2,tr}(\xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_X \Delta_{2,tr}(x, \theta_2) \xi(dx) \quad (2.3)$$

這一方法的核心思想是在選擇設計分佈  $\xi$  時，先針對每個可能的  $\theta_2$  找到模型間差異的最小值，然後在所有可能的設計中選擇能最大化該最小差異的  $\xi$ 。此設計目標的意圖在於，無論未來收集到的數據如何影響  $\theta_2$  的估計，兩個模型之間的實際差異只會比設計階段考慮的最小差異更大。因此，這樣的設計不僅有助於解決當前的模型辨識問題，還能提高未來實驗數據的利用效率，為模型選擇提供更強的支持。

**定理 1.** 為了驗證找到的設計  $\xi_T^*$  是否為最佳設計，我們使用等價定理 (Equivalence Theorem, (Atkinson and Fedorov, 1975a,b))，如公式 (2.4) 所示：

$$\psi_T(x, \xi_T^*) = \Delta_{2,tr}(x, \hat{\theta}_2(\xi_T^*)) - T_{2,tr}(\xi_T^*) \leq 0, \quad (2.4)$$

其中：

- 第一項  $\Delta_{2,tr}(x, \hat{\theta}_2(\xi_T^*))$  表示在設計空間  $\mathcal{X}$  的每一點  $x$  上，針對所有可能的  $\theta_2 \in \Theta_2$  計算模型差異的最小值。
- 第二項  $T_{2,tr}(\xi_T^*)$  是基於所選設計  $\xi_T^*$  計算出的模型差異的最小值，這是經由「max-min」最佳化過程確定的全域最佳標準。

如果對於所有  $x \in \mathcal{X}$ ，不等式  $\psi_T(x, \xi_T^*) \leq 0$  成立，則可以確認  $\xi_T^*$  是 T-optimal 設計。這表明，在任何設計點上，局部模型差異的最大值都不會超過全局模型差異，從而確保設計的最佳性。

然而，[Atkinson and Fedorov \(1975a,b\)](#) 提出的 T-optimal 設計旨在通過最大化模型之間差異平方和，實現對模型的有效辨識。然而，該方法在某些應用情境下存在限制。例如，當兩個模型的變異不同或誤差項不符從常態分佈時，僅考慮差異平方和可能不足以充分反映模型之間的差異。此時應考慮分佈整體形狀的差異，這可以通過 Kullback-Leibler 散度（KL Divergence）來衡量模型之間的資訊損失。[López-Fidalgo et al. \(2007\)](#) 針對此類情況提出了 KL-optimal 設計，並通過模擬不同條件下的情境，尋找適用於模型辨識的有效設計。

### 2.3 尋找模型辨識設計的數值方法

在尋找最佳化的過程中，[Atkinson and Fedorov \(1975a,b\)](#) 採用了類似交換演算法的增量式設計。然而，在處理連續型設計空間時，該方法通常需先設定一組基準設計（例如隨機選取三個設計點）作為起始點。接著，演算法會從預先離散化的設計空間中（例如每隔 50 或 100 單位切分）選出候選點，逐一嘗試加入目前設計中，觀察是否能提升準則值，若有提升則保留該點。經過反覆遞迴後，最終設計可能出現多個非零權重的支撐點，甚至集中於部分區段，導致支撐點總數超出原本預期（例如原本為三點設計）。此外，若鄰近點如 99、100、101 皆帶有小權重，可能在圖形上呈現「多點集中於一區」的特性。這些現象使得交換演算法在支撐點數量與設計可解釋性上較難控制。

此外，綜合上述前人研究的成果與分析，以及不論是 T-optimal 設計還是 KL-optimal 設計，其極值求解過程可能耗費大量時間，對計算效率提出了挑戰。因此，採用更加高效的連續型優化演算法是一個值得探索的方向。近十年來的研究顯示，粒子群優化（Particle Swarm Optimization, PSO）在處理實驗設計問題上具有顯著優勢，能夠解決許多過去理論或傳統演算法無法有效解決的問題。因此，本研究將採用 PSO 演算法作為求解工具，以提升計算效率與結果的準確性。值得一提的是，[Chen et al. \(2020\)](#) 已成功應用 PSO 演算法於模型辨識問題，啟發



了本研究嘗試將此方法套用於可靠度領域中最常見的 Arrhenius 模型，以探索其在該領域的應用潛力。

Eberhart and Kennedy (1995) 首次提出粒子群優化方法，這是一種啟發式優化演算法，靈感來自於自然界中魚群與鳥群的集體行為。PSO 將每隻鳥或每條魚視為一個粒子，每個粒子代表一個候選解。通過結合自身歷史最佳解（Local Best, LBest）和群體全局最佳解（Global Best, GBest）的資訊，接著持續調整速度與位置，最終逐漸收斂至全局最佳解。針對不同類型的最佳化設計，已有眾多文獻應用 PSO 方法進行研究。例如，Chen et al. (2011) 探討了 A-optimal、D-optimal 和 Minimax 設計；Lukemire et al. (2016) 將 PSO 用於尋找 D-optimal 設計；Walsh and Borkowski (2022) 則研究了 G-optimal 設計等。

PSO 的迭代過程包含兩個主要步驟，首先初始化粒子的速度與位置，然後根據公式 (2.5) 計算粒子的速度，接著利用公式 (2.6) 更新粒子的位置。在這一過程中，粒子的運動由三個關鍵組成部分構成，概念如圖 2.1 所示：

- (A)：慣性項，表示粒子的運動趨勢，通過延續前一次的速度影響當前速度。
- (B)：個體學習項，通過粒子自身的歷史最佳位置 ( $\xi_L^t$ , LBest) 引導粒子向更好的解移動。
- (C)：群體學習項，通過群體的全局最佳位置 ( $\xi_G^t$ , GBest) 協助粒子向全局最佳解靠近。

粒子  $i$  在時間  $t$  和  $t+1$  的運動由以下公式控制：

$$v_i^{t+1} = \underbrace{\varphi_t v_i^t}_{(A)} + \underbrace{\gamma_1 \beta_1 \otimes [\xi_L^t - \xi_i^t]}_{(B)} + \underbrace{\gamma_2 \beta_2 \otimes [\xi_G^t - \xi_i^t]}_{(C)} \quad (2.5)$$

和

$$\xi_i^{t+1} = \xi_i^t + v_i^{t+1}, \quad \text{for } i = 1, \dots, N. \quad (2.6)$$

在公式 (2.5) 中， $v_i^t$  和  $v_i^{t+1}$  分別代表粒子  $i$  在時間  $t$  和  $t+1$  的速度； $\varphi_t$  是慣性權重，其值介於 0 和 1 之間，可以是常數，也可以是隨時間遞減的函數。通常，在算法初期，較大的慣性權重有助於提升全局搜索能力，防止粒子過早陷入局部最佳解；而在算法後期，使用較小的慣性權重則有助於粒子進行精細搜索，提高解的精度並加速收斂。學習因子  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  分別對應個體學習和群體學習，控制粒子向 LBest 和 GBest 的移動權重，兩者通常設定為常數。而隨機數  $\beta_1$  和  $\beta_2$  是從均勻分佈  $U(0,1)$  中隨機生成的，用於引入隨機性，增加粒子搜索的多樣性。

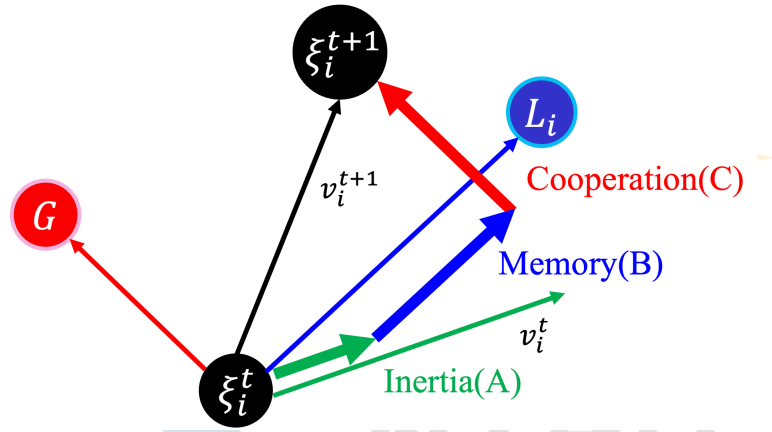


圖 2.1: PSO 速度運動示意圖

PSO 演算法流程：( 可參考圖 2.2 )

1. 初始化粒子：

- 生成粒子群，包含  $n$  個粒子。
- 初始化粒子的位置  $\xi_i$  和速度  $v_i$ ，其中  $i = 1, \dots, n$ 。
- 確認每個粒子的自身歷史最佳解 ( $\xi_L^t$ , LBest) 以及群體全局最佳解 ( $\xi_G^t$ , GBest)。

2. 迭代過程：

- 運用公式 (2.5) 計算每個粒子的速度。

- 運用公式 (2.6) 更新粒子的位置。
- 每個粒子基於優化目標函數計算適應度值，並更新其 LBest 和 GBest。
- 判斷是否滿足停止條件（如達到迭代次數或適應度收斂），否則重複上述步驟。

### 3. 輸出結果：

- 以群體全局最佳解（GBest）作為最終結果。

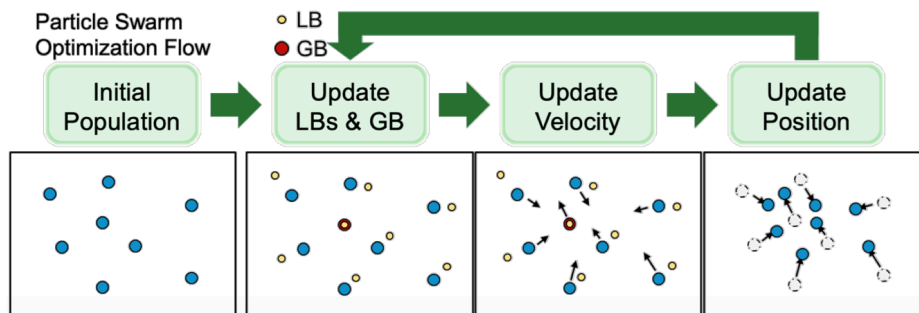


圖 2.2: PSO 流程圖

## 2.4 現有應用於 ALT 的模型辨識設計方法

在 ALT 研究中，模型辨識問題相對較少被探討，而 [Nasir and Pan \(2015\)](#) 是其中較具代表性的研究之一。該研究針對 ALT 中的模型辨識問題，提出了一種基於貝葉斯方法（Bayesian Approach）的最佳化實驗設計策略，重點在於如何透過實驗設計來區分競爭模型，特別是在壽命與應力變數之間的關係可能為線性或非線性，且結構不確定的情境。他們採用 Hellinger 距離（Hellinger distance）衡量不同模型預測分佈之間的差異，並透過數值模擬來驗證該設計的有效性。

首先，透過圖 2.3 簡要說明 ALT 的概念。假設目前有兩個模型  $M_1$  和  $M_2$ ，目標是預測產品的壽命第  $p$  百分位數（ $\tau_p$ ）。然而，當產品在正常使用條件下的壽命過長，難以在短時間內獲得失效數據時，通常會透過提高應力（stress）來加速產品故障，以縮短測試時間。

在實驗設計中，設定兩個應力水準，分別為低應力 ( $S_{Low}$ ) 和高應力 ( $S_{High}$ )，並在這些條件下測試產品的失效數據分佈。接著，利用外推方法預測在實際使用應力  $S_{UC}$  下的失效分佈，進而推估產品的壽命。

圖中橫軸代表應力，縱軸代表產品壽命，兩者皆取對數，主要是因為許多壽命模型（如 Arrhenius 模型）呈現非線性關係，透過對數轉換可將其轉換為線性關係，便於進行統計推論。此外，在高應力條件下，產品壽命的變異性較大，數據分佈可能呈現高度偏態 (Skewed)，而對數變換後，壽命數據通常更接近常態分佈，有助於提高模型的適用性與參數估計的穩定性。因此，對  $M_1$  和  $M_2$  進行相同的實驗測試，觀察它們在不同應力條件下的壽命第  $p$  百分位數 ( $\tau_p$ )，並分析兩者的對數變換後的壽命分佈變化  $\Delta\hat{\tau}_p$ ，使不同模型在不同應力條件下的行為變化更直觀，進而幫助進行模型辨識。以下將依序描述該研究中模擬步驟的詳細資訊。

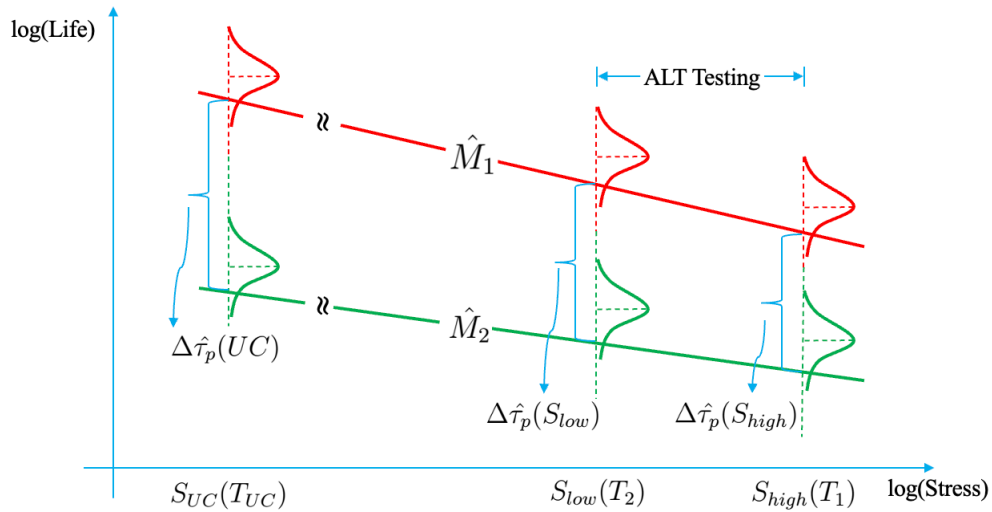


圖 2.3: ALT 概念圖 (Nasir and Pan, 2015)

目前的情境是，可靠度工程師對研究半導體組裝中 Au-Al 介面的金屬間化合物 (IMC) 生長感興趣。已知該故障機制會受到溫度應力的影響，因此需要進行加速壽命測試來估計設備的使用壽命，計劃能夠在溫

度應力下區分線性模型  $M_1$  和二次加速模型  $M_2$ ，其參數分別為  $\theta_1$  和  $\theta_2$

。實驗的設備與測試條件如下：

- 烘烤室有效期：總測試時間為 42 天，即最長可達 1008 小時。
- 可使用的兩種烤箱類型：
  - 低應力烤箱：溫度範圍為 60°C 至 115°C。
  - 高應力烤箱：溫度範圍為 100°C 至 250°C。
- 實驗成本限制：最多可進行 20 次實驗。

本研究基於其論文中的真實工業案例，並提供詳細的模擬設置，包括以下所有要點。

#### I. 調整模型形式並設定欲比較的模式：

首先，我們將 Arrhenius 模型（式 (2.1)）線性化，以建立模型。

$$\begin{aligned}
 t(T) &= A \exp\left(\frac{E_a}{K \times Temp}\right) \\
 \Rightarrow \log(t(T)) &= \log(A) + \frac{E_a}{K \times Temp} \\
 \Rightarrow \underbrace{\log(t(T))}_{\mu} &= \underbrace{\log(A)}_{\beta_0} + \underbrace{\frac{E_a}{K}}_{\beta_1} \times \underbrace{\frac{1}{Temp}}_x
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

接著，對加速變數進行標準化，式 (2.7) 可以擴展為：

$$\underbrace{\log(t(T))}_{\mu} = \underbrace{(\beta_0 + \beta_1 x_{low})}_{\gamma_0} + \underbrace{[\beta_1 (x_{high} - x_{low})]}_{\gamma_1} \underbrace{\left(\frac{x - x_{low}}{x_{high} - x_{low}}\right)}_{\xi} \tag{2.8}$$

加入二次項，以捕捉可能的非線性加速效應，可表示為：

$$\mu = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 \tag{2.9}$$

將式 (2.9) 的加速變數進行標準化後，擴展為：

$$\begin{aligned} \overbrace{\log(t(T))}^{\mu} = & \overbrace{(\beta_0 + \beta_1 x_{low})}^{\gamma_0} + \overbrace{[\beta_1(x_{high} - x_{low})]}^{\gamma_1} \overbrace{\left(\frac{x - x_{low}}{x_{high} - x_{low}}\right)}^{\xi} \\ & + \underbrace{[\beta_2(x_{high}^2 - x_{low}^2)]}_{\gamma_2} \underbrace{\left(\frac{x - x_{low}}{x_{high} - x_{low}}\right)^2}_{\xi^2} \end{aligned} \quad (2.10)$$

綜合上述推導，方程式 (2.8) 嵌入於 (2.10) 之中，表示  $M_2$  是  $M_1$  的一個特例。因此，我們定義  $M_1$  和  $M_2$  如下：

$$M_1 : \mu_1 = \gamma_0 + \gamma_1 \xi + \gamma_2 \xi^2 \quad (2.11)$$

$$M_2 : \mu_2 = \gamma_0 + \gamma_1 \xi \quad (2.12)$$

另外，可靠度工程師認為 Weibull 分佈能充分描述半導體封裝中 Au-Al 金屬間化合物的生長壽命及其失效機制。因此，他們假設壽命  $T$  服從 Weibull 分佈， $T \sim Weibull(\alpha, \beta)$ ，其中  $\alpha$  為尺度參數， $\beta$  為形狀參數。進一步透過對數轉換，將壽命轉換為最小極值分佈 (SEV)， $\log(t) \sim SEV(\mu, \sigma)$ ，其中  $\sigma = \frac{1}{\beta}$  且  $\mu = \log(\alpha)$ 。

對於兩個模型，對於 Type I 設限資料的情況下，超過時間  $t_c$  的生存機率可表示為：

$$Pr(t > t_c) = \exp \left[ - \left( \frac{t_c}{\alpha} \right)^\beta \right], t_c > 0 \quad (2.13)$$

## II. 機率分佈的距離測度：

該研究採用 Hellinger 距離測量圖 2.3 中的  $\Delta \hat{\tau}_p(S_{Low})$  和  $\Delta \hat{\tau}_p(S_{High})$  的距離，假設目前兩個模型的壽命數據分別為  $Y_1 = (y_{11}, y_{21}, \dots, y_{N1})$  和  $Y_2 = (y_{12}, y_{22}, \dots, y_{N2})$ ，且兩者皆有  $N$  筆資料。Hellinger 距離的定義如下：

$$D_H(Y_1, Y_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sum_{i=1}^N (\sqrt{y_{i1}} - \sqrt{y_{i2}})^2} \quad (2.14)$$

III. 效用函數定義：研究進一步定義需最大化的效用函數，該函數考慮了在高應力和低應力下的實驗情境，並利用兩個模型的數據  $Y_1$  和  $Y_2$  進行綜合評估。

$$u_{2|1} = D_{S_{Low}}(\hat{\tau}_{p,(M_2|Y_1)}, \hat{\tau}_{p,(M_1|Y_1)}) + D_{S_{High}}(\hat{\tau}_{p,(M_2|Y_1)}, \hat{\tau}_{p,(M_1|Y_1)}) \quad (2.15)$$

$$u_{1|2} = D_{S_{Low}}(\hat{\tau}_{p,(M_1|Y_2)}, \hat{\tau}_{p,(M_2|Y_2)}) + D_{S_{High}}(\hat{\tau}_{p,(M_1|Y_2)}, \hat{\tau}_{p,(M_2|Y_2)}) \quad (2.16)$$

IV. 效用函數的期望調整：由於在設計實驗時尚未觀察到真實數據，因此透過數據的抽樣分佈  $p(y_1|\theta_1)$  和  $p(y_2|\theta_2)$ ，搭配參數的先驗分佈  $\pi(\theta_1)$  和  $\pi(\theta_2)$ ，計算效用函數的期望值：

$$E(u_{2|1}) = \int \int u_{2|1} p(y_1|\theta_1) \pi(\theta_1) d_{y_1} d_{\theta_1} \quad (2.17)$$

$$E(u_{1|2}) = \int \int u_{1|2} p(y_2|\theta_2) \pi(\theta_2) d_{y_2} d_{\theta_2} \quad (2.18)$$

V. 模型權重與最終效用函數：由於尚不清楚哪個模型是真實的，因此引入模型權重的先驗分佈  $\tau(M_1)$  和  $\tau(M_2)$ ，最終效用函數  $U(\xi)$  可表示為：

$$U(\xi) = \tau(M_1)E(u_{2|1}) + \tau(M_2)E(u_{1|2}) \quad (2.19)$$

透過最大化  $U(\xi)$ ，可以確保設計能夠最大化兩個模型之間的差異性。

VI. 給定先驗分佈：

- 假設兩個模型的初始可信度相等，設定  $\tau(M_1) = \tau(M_2) = 0.5$ 。
- 假設活化能遵循均勻分佈， $E_a \sim U(1.0, 1.05)$ ，表示其可能值範圍在 1.0 到 1.05 eV 之間，並且各值的機率相同。
- 假設  $\beta_0$  服從平均數為 0、變異數為  $1000^2$  的常態分佈， $\beta_0 \sim N(0, 1000^2)$ ，反映對該參數高度不確定的假設。
- 同樣假設二次項  $\beta_2$  服從  $\beta_2 \sim N(0, 1000^2)$ ，允許其具有廣泛的可能值。

- 假設壽命數據遵循 Weibull 分佈，其形狀參數  $\beta$  服從伽瑪分佈， $\beta \sim \text{Gamma}(1, 2)$ 。

他們採用了基於貝葉斯方法的模擬技術，通過不斷抽取資料來估計經驗分佈的形狀，進而計算不同分佈之間的差異。在此過程中，他們使用了馬可夫鏈蒙地卡羅（Markov Chain Monte Carlo, MCMC）方法中的 Gibbs 抽樣，並利用 WinBUGS 軟體來計算  $\hat{\tau}_p$ ，同時模擬最大化效用函數以找到最佳設計  $\xi^*$ 。

然而，該方法存在兩個主要缺點。首先，計算過程極為耗時，特別是在高維數據或大規模樣本情況下會顯著增加計算成本。其次，由於方法本身的隨機性，每次模擬的結果可能有所差異，導致難以復現先前的結果，這進一步限制了該方法的應用範圍。

Nasir and Pan (2015) 在其研究中探討了模型辨識設計在可靠度測試中的應用。然而，綜上所述，其方法仍有許多待改進之處。因此，本研究將以該文獻的改進方向為出發點，進行深入探討。



## 第三章

### 方法論

本研究將著重在實驗設計中具有高度實用性的近似設計 ( Approximation Designs )。這是一種基於設計空間  $\mathcal{X}$  上的機率測度方法，用於在特定設計點之間合理分配有限的觀測次數。假設反應變數為  $y$ ，其機率分佈由條件分佈  $f(y | x, \theta, \sigma^2)$  給出， $x$  為來自設計空間的設計點 ( Support Point )，其中  $x \in \mathcal{X}$ ， $\theta$  代表所有未知參數， $\sigma^2$  是誤差的變異數，可視為干擾參數。

當設計點為  $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathcal{X}$  時，近似設計  $\xi$  可表示為：

$$\xi = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ w_1 & w_2 & \dots & w_n \end{array} \right\}$$

其中， $w_i$  是分配至設計點  $x_i$  的權重，且滿足  $0 < w_i < 1$  及  $\sum_{i=1}^n w_i = 1, i = 1, 2, \dots, n$ 。若總樣本數為  $N$ ，則分配到設計點  $x_i$  的觀測次數約為  $N \cdot w_i$ ，在實務中通常會將此值四捨五入至整數。此外，近似設計的目標常基於凸函數或凹函數，可通過演算法高效尋找最佳化設計，記為  $\xi^*$ 。為了驗證所獲設計是否為最佳解，本研究將使用等價定理 ( Equivalence Theorem ) 進行檢驗。

#### 3.1 KL-optimal 準則

當兩個模型的變異不同或誤差項不符合常態分佈時，[López-Fidalgo et al. \(2007\)](#) 針對此類情況提出了 KL-optimal 設計，通過 Kullback-

Leibler 散度 (KL Divergence) 來衡量模型之間的資訊損失，該散度也可稱為相對熵 (Relative Entropy)、資訊散度 (Information Divergence) 或資訊增益 (Information Gain)，顧名思義會與熵有關係，以下會依序介紹不同的指標：

Shannon (1948) 提出資訊熵 (Information Entropy)，用來衡量機率分佈的不確定性或所含的信息量。資訊量 (Information Content,  $I(x)$ ) 可被視為驚訝指數：當事件發生的機率  $P(x)$  很低時，事件的發生會讓我們感到驚訝 (資訊量高)；相反地，當  $P(x)$  很高，事件的發生在預期之中，因此資訊量較低。

例如：

- 沙漠明天出大太陽 → 這是預期內的事情，因為機率很高 (接近 1)，所以資訊量很低。
- 沙漠裡明天下雨 → 這是罕見事件，機率很低 (接近 0)，所以資訊量很高。

因此，當  $P(x)$  接近 0 時，表示事件極不可能發生，驚訝程度大，則資訊量的數值必須要很大；當  $P(x)$  接近 1 時，資訊量的數值必須要很小。

資訊量的定義為：

$$I(x) = -\log P(x) \quad (3.1)$$

而熵則代表的是平均資訊量，因為事件通常不會只有一件，所以需要綜合考量。假設我們考慮第一個模型 (真實模型)  $f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)$ ，則其資訊熵定義為：

$$H(f_{tr}) = - \int f_{tr}(y | x, \sigma_1^2) \log \{f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)\} dy \quad (3.2)$$

當  $H(f_{tr})$  值較大時，表示該機率分佈的變異性較高，對應的事件發生時，能夠獲得較多的信息。從直覺上來看，資訊熵可理解為事件發生

後帶來的信息量。由於機率值介於 0 到 1 之間，對數運算後為負數，因此公式前加上負號，使得  $H(f_{tr})$  仍為非負值。資訊熵數值越大，代表該機率分佈的變異性較大，事件發生後提供的資訊也越多，反之則資訊量較少。

交叉熵 (Cross Entropy) 用於衡量觀測到的預測機率分佈與真實機率分佈之間的差異。直觀來說，交叉熵評估的是當我們使用一個模型來描述真實分佈時，所承受的額外資訊損失。假設考慮第一個模型 (真實模型)  $f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)$  和第二個模型 (對立模型)  $f_r(y | x, \theta_2, \sigma_2^2)$ ，則交叉熵定義為：

$$H(f_{tr}, f_r) = - \int f_{tr}(y | x, \sigma_1^2) \log \{f_r(y | x, \theta_2, \sigma_2^2)\} dy \quad (3.3)$$

交叉熵衡量當我們希望用  $f_r(y | x, \theta_2, \sigma_2^2)$  來近似  $f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)$  時，所產生的平均資訊損失。當兩者的差異較大時，代表對立模型與真實分佈之間的不匹配程度較高，亦即不確定性更大，因此交叉熵的值也會較高，需要更多資訊量來描述  $f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)$ 。反之，若兩個分佈相似，則交叉熵的值會較低，表示對立模型對真實分佈的描述較為準確，但要注意的是，交叉熵值最小值通常不為 0，當兩模型完全吻合，則交叉熵  $H(f_{tr}, f_r)$  等於熵  $H(f_{tr})$ 。

KL 散度 (Kullback-Leibler Divergence) 用於衡量兩個機率分佈之間的相似程度。本質上，它可以透過資訊熵與交叉熵來推導，鑑於交叉熵的最小值會等於熵值，為了確保將測度最小值控制在 0，造就了 KL 散度，描述當我們使用對立模型  $f_r(y | x, \theta_2, \sigma_2^2)$  來近似真實模型  $f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)$  時，與真實分佈相比，所損失的額外資訊量。KL 散度的推

導過程如下：

$$\begin{aligned}
KL \text{ Divergence} &= \text{Cross Entropy} - \text{Information Entropy} \\
D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) &= (3.3) - (3.2) \\
&= H(f_{tr}, f_r) - H(f_{tr}) \\
&= \int f_{tr}(y | x, \sigma_1^2) \log \left\{ \frac{f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)}{f_r(y | x, \theta_2, \sigma_2^2)} \right\} dy \quad (3.4)
\end{aligned}$$

KL 散度的值反映了兩個機率分佈之間的差異：

- 當兩個模型的機率分佈越接近時， $D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2)$  會越小。
- 若兩個模型完全相同，則  $D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) = 0$ ，表示沒有資訊損失。

由於 KL 散度是不對稱的（即  $D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) \neq D_{KL}(f_r, f_{tr}, x, \theta_2)$ ），它不能作為正式的距離度量，但仍然是機率分佈比較中常用的衡量標準。

López-Fidalgo et al. (2007) 提出的 KL-optimal 設計準則基於公式 (3.4)，其目標函數定義如公式 (3.5) 所示：

$$KL_{2,tr}(\xi) = \min_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_X D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) \xi(dx) \quad (3.5)$$

與 T-optimal 設計不同，KL-optimal 設計標準不僅基於模型誤差來衡量區分能力，而是透過 KL 散度來評估兩個模型在機率分佈上的資訊差異。這種設計標準特別適用於當兩個模型具有不同變異數，或誤差分佈不符合常態假設的情況，能夠提供更靈活的實驗設計方法。

然而，KL-optimal 設計的目標是在所有可能的設計分佈  $\xi$  中，選擇一個能夠最大化資訊區別能力的設計，使得即便在最不利的  $\theta_2$  估計情境下，模型仍然能夠被有效區分。因此，我們對目標函數進行調整，如公式 (3.6) 所示：

$$\max_{\xi \in \Xi} KL_{2,tr}(\xi) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_X D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) \xi(dx) \quad (3.6)$$

這與 T-optimal 設計透過最大化最小誤差來選擇設計的原理類似，但 KL-optimal 設計是透過最大化 KL 散度來確保模型的可辨識性。

**定理 2.** 為了驗證找到的設計  $\xi_{KL}^*$  是否為最佳設計，我們使用等價定理 ( *Equivalence Theorem*, ( [Atkinson and Fedorov, 1975a,b](#) ) )，如公式 (3.7) 所示：

$$\psi_{KL}(x, \xi_{KL}^*) = D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \hat{\theta}_2(\xi_{KL}^*)) - KL_{2,tr}(\xi_{KL}^*) \leq 0 \quad (3.7)$$

其中：

- 第一項  $D_{KL}(f_{tr}, f_r, x, \hat{\theta}_2(\xi_{KL}^*))$  表示在設計空間  $\mathcal{X}$  中，針對所有可能的  $\theta_2 \in \Theta_2$ ，每個設計點  $x$  處所計算的最小 KL 散度值。
- 第二項  $KL_{2,tr}(\xi_{KL}^*)$  則是針對所選設計  $\xi_{KL}^*$  所獲得的最小 KL 散度值。

若對所有  $x \in \mathcal{X}$ ，不等式  $\psi_{KL}(x, \xi_{KL}^*) \leq 0$  成立，則可證明  $\xi_{KL}^*$  是 KL-optimal 設計，這表示在任何設計點上，局部的 KL 散度最大值不會超過全局的最小 KL 散度，確保所選設計能夠有效區分模型。

### 3.2 在 Type I 設限資料下模型辨識準則

在可靠度與存活分析中，Type I 設限資料是一種常見情境，但原有的數學公式通常無法滿足這項限制。[Park and Shin \(2014\)](#) 改良了 KL 散度的計算方法，提出了兩種適用於 Type I 設限資料的公式，並對其在不同情境下的性能進行了比較分析，證明這些公式保留了 KL 散度的非負性、單調性及其他核心性質。在此基礎上，[Pakgohar et al. \(2019\)](#) 提出了額外的散度，包括 KL 散度、Lin-Wong (LW) 散度、Bhattacharyya (B) 距離測度以及卡方 ( $\chi^2$ ) 距離測度，並系統性地比較了這些測度在 Type I 設限資料中的表現，證明其在實際應用中的一致性與可靠性。其中，KL 散度是一種基於信息理論的測度，與 Shannon 熵 (Entropy) 密切相關，用於量化兩個分佈之間的相對信息損失。其核心概念在於衡量

一個分佈相對於另一個分佈所需的額外信息量，是模型辨識與信息理論中的重要工具。然而，KL 散度對偏態數據較為敏感，且在極端情況下可能產生無窮大值，這成為其在某些應用中的限制。為克服此問題，LW 散度因此而生，該測度通過改良對數函數的應用，整合 Type I 設限資料中的分佈差異和存活函數信息，以有限性和非負性為特點，能有效避免 KL 散度的無窮大問題，並展現出更高的穩健性。Bhattacharyya 距離則著眼於分佈間的重疊區域，適合衡量相似性，但對分佈細微變化的靈敏度不如 KL 散度和 LW 散度。卡方 ( $\chi^2$ ) 測度則透過比值來衡量分佈差異，這使得卡方測度對於大樣本數據尤為適用，但在分佈差異極小時可能會低估其影響。本研究將採用 [Park and Shin \(2014\)](#) 中表現較佳的 KL 散度公式，以及 [Pakgohar et al. \(2019\)](#) 提出的三種散度，應用於模型辨識的實驗設計。

在下一節的結果分析中，Div 代表散度標準。我們考慮四種不同的散度，並假設第一個模型（真實模型  $M_1$ ）的條件機率密度函數為  $f_{tr}(y | x, \sigma_1^2)$ ，第二個模型（對立模型  $M_2$ ）的條件機率密度函數為  $f_r(y | x, \theta_2, \sigma_2^2)$ 。對應的累積機率分佈函數分別為  $F_{tr}(C | x, \sigma_1^2)$  和  $F_r(C | x, \theta_2, \sigma_2^2)$ ，其中  $C$  表示設限點。此外，存活函數（Survival Function）定義為：

$$\bar{F}_{tr}(C) = 1 - F_{tr}(C), \quad \bar{F}_r(C) = 1 - F_r(C).$$

散度定義：

- Censored Kullback-Leibler (CKL) 散度:

$$D_{CKL}(f_{tr}, f_r) = \int_{-\infty}^C f_{tr} \log \left\{ \frac{f_{tr}}{f_r} \right\} dy + \bar{F}_{tr}(C) \log \left\{ \frac{\bar{F}_{tr}(C)}{\bar{F}_r(C)} \right\}. \quad (3.8)$$

- Censored Lin-Wong (CLW) 散度:

$$D_{CLW}(f_{tr}, f_r) = \int_{-\infty}^C f_{tr} \log \left\{ \frac{2f_{tr}}{f_{tr} + f_r} \right\} dy + \bar{F}_{tr}(C) \log \left\{ \frac{2\bar{F}_{tr}(C)}{\bar{F}_{tr}(C) + \bar{F}_r(C)} \right\}. \quad (3.9)$$

- Censored Bhattacharyya (CB) 距離測度:

$$D_{CB}(f_{tr}, f_r) = \int_{-\infty}^C \sqrt{f_{tr} \cdot f_r} dy + \sqrt{\bar{F}_{tr}(C) \cdot \bar{F}_r(C)}. \quad (3.10)$$

- Censored Chi-Square ( $C\chi^2$ ) 距離測度:

$$D_{C\chi^2}(f_{tr}, f_r) = \int_{-\infty}^C \frac{(f_{tr})^2}{f_r} dy + \frac{(\bar{F}_{tr}(C))^2}{\bar{F}_r(C)} - 1. \quad (3.11)$$

為了進一步擴展此框架，我們提出四種新的最佳化設計，將 Type I 設限時間 ( $C$ ) 納入最佳化過程，分別為：CKL-、CLW-、CB- 和  $C\chi^2$ -optimal 設計。這些設計對應於 KL 散度、Lin-Wong 散度、Bhattacharyya (B) 距離測度與卡方 ( $\chi^2$ ) 距離測度的 Type I 設限版本。透過將設限因素納入最佳化框架，這些新方法旨在提供更強大且更具實務意義的實驗設計，特別適用於設限數據影響顯著的情境。

定義  $C^*$  是透過最佳化演算法（如 PSO、L-BFGS）所獲得的最佳準則值，用於衡量設計的有效性。而  $\hat{C}$  則是基於最佳化後的設計  $\xi^*$  和估計參數  $\hat{\theta}$  重新計算後的準則值，用於檢驗最佳化過程的穩定性。最佳化準則值的數學定義如下：

$$C^* = \max_{\xi \in \Xi} \min_{\theta_r \in \Theta_r} \left\{ \int_X \text{Div}(M_1(x, \theta_{tr}), M_2(x, \theta_r)) \xi(dx) \right\}. \quad (3.12)$$

其中：

- $\xi \in s$  表示所有可能的實驗設計，我們希望在這個集合中尋找最佳化設計  $\xi^*$ 。
- $\min_{\theta_r \in \Theta_r}$  表示最壞情境下的對立模型參數，即在所有可能的  $\theta_r$  中，找到一個使得模型區別能力最弱的參數設定。
- $\text{Div}(M_1, M_2)$  是散度，衡量真實模型  $M_1$  與對立模型  $M_2$  之間的區別能力，可以是 CKL 散度、CLW 散度、CB 距離測度或  $C\chi^2$  距離測度。



公式 (3.12) 採用「max-min」的策略，首先針對每個設計  $\xi$  計算模型辨識能力的最小值（即在最不利的  $\theta_r$  下的識別能力），然後選擇能最大化該最小值的  $\xi^*$ 。換句話說，這樣的設計確保即便在最壞情境下，我們仍能獲得最有區別性的實驗數據。

**假說 1.** 設  $\xi^* \in \Xi$  為一個正規的散度最佳化設計（Divergence-optimal 設計）。

(a) 當且僅當對所有  $x \in \mathcal{X}$  滿足  $\psi(x; \xi^*) \leq 0$ ，則設計  $\xi^*$  為散度下的最佳化設計，其中

$$\psi(x; \xi) = \text{Div}(M_1(x, \theta_{tr}), M_2(x, \hat{\theta}_r)) - \int_{\mathcal{X}} \text{Div}(M_1(u, \theta_{tr}), M_2(u, \hat{\theta}_r)) \xi(du) \quad (3.13)$$

且  $\hat{\theta}_r$  為以下內層最佳化問題的唯一解：

$$\hat{\theta}_r = \arg \min_{\theta_r \in \Theta_r} \int_{\mathcal{X}} \text{Div}(M_1(x, \theta_{tr}), M_2(x, \theta_r)) \xi(dx) \quad (3.14)$$

(b) 函數  $\psi(x; \xi^*)$  的最大值會出現在最佳化設計  $\xi^*$  的設計點上。

此一猜想將 KL 最佳化設計下的等價定理（Equivalence Theorem）推廣至更廣泛的發散量度準則，包括 CKL、CLW、CB、 $C\chi^2$  等指標。

在實務應用中，此最佳化問題通常會透過粒子群優化（PSO）或 L-BFGS 等數值方法來求解，從而獲得最適合的  $\xi^*$ 。下一節將展示基於此設計準則所產生的數值模擬結果。

### 3.3 透過數值積分以計算準則值

在本研究中，數值積分為進行模型辨識準則計算之核心工具。由於推導出的積分式（如公式 (3.8) 至 (3.11)）皆涉及設限修正項與對數運算，這類型積分在多數情況下難以取得封閉解（Closed-Form Solution），使得封閉解的推導不具實用性。因此，我們改採數值積分方法進行近似計算，本研究中使用的是 R 語言內建的 `integrate()` 函數。



數值積分的基本思想來自黎曼和 ( Riemann Sum ) 的概念，即將積分區間切割為多個小區段，並以各區段內函數值乘以區間寬度進行近似。傳統方法如梯形法與辛普森法皆為此原理之延伸。不過，在實際應用中，固定切割區間往往無法應對被積函數出現快速變動、尖峰或設限特性等情形。為提升準確度與效率，`integrate()` 採用的是自適應積分演算法 ( Adaptive Quadrature )，可根據函數變化動態調整切割區間與評估點 (Davis and Rabinowitz, 2007)。

其原理為：初步對積分區間進行粗略評估後，根據誤差估計自動將誤差較大的區段進一步細分，形成不等寬的子區間。這種方法可大幅減少不必要的運算，並將計算資源集中於函數變動劇烈的區域。在 R 語言中，`integrate()` 的實作融合了 Romberg 積分與遞迴式細分邏輯，在實務中能提供穩定而準確的近似值 (Stoer et al., 1980)。

本研究在推導模型辨識準則的積分表達式時，經適當轉換與設限處理後，可化為一維定積分問題，故可直接套用 `integrate()` 處理。其在實作上不僅語法簡潔，且運算時間短，亦可設定誤差上限與積分上下界，在準確度與操作性之間取得良好平衡，成為本研究中進行積分運算的主要工具。

### 3.4 用於模型辨識設計生成的 PSO-QN 演算法

在本研究中，我們採用結合粒子群優化 ( PSO ) 與有限記憶 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno ( L-BFGS ) 的 PSO-QN 演算法來解決嵌套的最佳化問題。該方法最早由 Chen et al. (2020) 提出，旨在解決傳統 Nested-PSO 演算法 (Chen et al., 2015) 所面臨的高計算成本問題。

傳統的 Nested-PSO (Chen et al., 2015) 同時使用 PSO 處理外層與內層的優化問題，雖然能有效搜尋全域最佳解，但在高維數據或大規模樣本的情境下，計算成本極為昂貴。為此，Chen et al. (2020) 提出的 PSO-QN 演算法針對內層問題進行了改良，結合 PSO 進行外層全域搜

尋，並使用 L-BFGS 來處理內層的可微分目標函數，使優化過程更高效且穩健。

我們發現，本研究所探討的最佳化標準目標函數具備嵌套的數學結構：

- 內層問題：對參數  $\theta_2$  可微，且內部函數為凸函數。
- 外層問題：目標函數可能具有多個局部極值點，甚至呈現非凸性。

由於內層函數的良好數學性質，我們可以使用基於梯度的數值最佳化方法來尋找最佳解。例如，L-BFGS 可利用一階與近似二階導數資訊，加速收斂，並在高維問題中具備較低的記憶體需求與較高的計算效率。因此，當 PSO 找到全域最佳解的候選解後，我們進一步使用 L-BFGS 進行局部精細優化，使收斂更快速且穩定。

這類嵌套結構的最佳化問題，以有設限時間條件下的 KL-optimal 為範例，可表示為以下式 (3.15)：

$$\max_{\xi \in \Xi} CKL_{2,tr}(\xi) = \overbrace{\max_{\xi \in \Xi} \min_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_X D_{CKL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) \xi(dx)}^{\text{PSO} \text{ (L-BFGS)}} \quad (3.15)$$

在此公式中：

- 外層問題（由 PSO 負責）： $\max_{\xi \in \Xi} CKL_{2,tr}(\xi)$  用於搜尋全域最佳設計  $\xi^*$ 。
- 內層問題（由 L-BFGS 處理）： $\min_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_X D_{CKL}(f_{tr}, f_r, x, \theta_2) \xi(dx)$  對內層可微分目標函數進行局部最小化，以計算外層問題的配適值。

換句話說，PSO 負責全域搜尋來處理外層最佳化，而 L-BFGS 則負責局部搜尋來精細調整內層可微分函數，這樣的組合能有效提升最佳化效率與結果的穩定性。

此方法已被成功應用於模型辨識設計問題，特別是在區分兩個競爭模型的情境下展現出優異的性能。然而，針對不同的散度指標，仍需進一步模擬測試，以評估其適用性與穩健性。





## 第四章

### 數值研究

#### 4.1 透過非設限範例進行整合方法比較

在正式進行實驗設計的比較之前，我們首先重現 [López-Fidalgo et al. \(2007\)](#) 提出的 KL-optimal 設計範例，以驗證我們的方法能夠產生與其一致的數值結果。這一過程有助於確保計算的穩定性，並作為後續研究的基準。以下將先介紹該範例的實驗背景。

在實務應用中，藥代動力學模型 ( Pharmacokinetic Model ) 的誤差通常被認為服從對數常態分佈 ( Log-Normal Distribution )。該研究考慮的模型為經典的 Michaelis-Menten (MM) 模型以及一種針對特定應用場景進行修正的 Modified Michaelis-Menten (MMM) 模型，其定義如下：

$$\begin{cases} \text{MMM} : y = \frac{Vx}{K+x} + Fx + \epsilon \\ \text{MM} : y = \frac{Vx}{K+x} + \epsilon \end{cases}, x \in X = [aK, bK] \quad (4.1)$$

其中：

- $x$  代表底物濃度，如血漿中藥物濃度或藥物劑量。
- $y$  代表化學反應中產物形成的速率。
- $V$  代表最大反應速率 ( Maximum Reaction Rate )。

- $K$  代表 Michaelis 常數 ( Michaelis Constant,  $K_m$  )，即達到最大反應速率一半時的  $x$  值。
- $\epsilon$  為誤差項，此處假設服從對數常態分佈。

López-Fidalgo and Wong (2002) 建議設定  $b = 5$ ，並且在該條件下， $a = 0.1$  通常被視為最小濃度值。由於原研究採用了封閉解 ( Closed-Form Solution ) 計算 KL 散度，因此我們首先透過數學推導，以最基本的符號進行一般性公式推導，確保關鍵步驟清晰易懂。接著，為了更貼合本研究的應用情境，我們將該公式帶回模型辨識的實際框架，例如， $\sigma_1$  會進一步具體化為  $\sigma_1(x, \theta_1)$ 。這樣的處理方式能夠確保數學推導的可讀性，並使後續應用更加直觀。

假設我們有兩個隨機變數  $P$  和  $Q$ ，它們分別服從平均數  $\mu_1$  和  $\mu_2$  以及標準差  $\sigma_1$  和  $\sigma_2$  的對數常態分佈，其機率密度函數為：

$$p(y) = \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} \quad (4.2)$$

$$q(y) = \frac{1}{y\sigma_2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2}} \quad (4.3)$$

則 Kullback-Leibler ( KL ) 散度可寫為：

$$\begin{aligned} D_{KL}(P \parallel Q) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(y) \log \left( \frac{p(y)}{q(y)} \right) dy \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} \log \left( \frac{\frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}}}{\frac{1}{y\sigma_2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2}}} \right) dy \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} \left( \log \left( \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) + \frac{(\log y - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} - \frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2} \right) dy \\ &= \log \left( \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} dy}_1 + \frac{1}{2\sigma_2^2} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} (\log y - \mu_2)^2 dy}_{\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2} \\ &\quad - \frac{1}{2\sigma_1^2} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} (\log y - \mu_1)^2 dy}_{\sigma_1^2} \\ &= \log \left( \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) + \frac{\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} - \frac{1}{2} \\ &= \log \left( \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) + \frac{\sigma_1^2 - \sigma_2^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \\ &= \log \left( \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) - \frac{\sigma_2^2 - \sigma_1^2 + (\mu_2 - \mu_1)^2}{2\sigma_2^2} \end{aligned}$$

第一項積分為：

$$\int_0^\infty \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} dy = 1, \text{ 該結果來自對數常態分佈的機率密度函數積分為 } 1。$$

第二項積分為：

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \frac{1}{y\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\log y - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} (\log y - \mu_2)^2 dy \\ &= E[(\log y - \mu_2)^2] \\ &= E[(\log y - \mu_1 + \mu_1 - \mu_2)^2] \\ &= E(\log y - \mu_1)^2 + 2E[(\log y - \mu_1)(\mu_1 - \mu_2)] + E[(\mu_1 - \mu_2)^2] \\ &= \sigma_1^2 + 2(\mu_1 - \mu_2)E(\log y - \mu_1) + (\mu_1 - \mu_2)^2 \\ &= \sigma_1^2 + 2(\mu_1 - \mu_2) \underbrace{[E(\log y) - \mu_1]}_{=\mu_1 - \mu_1 = 0} + (\mu_1 - \mu_2)^2 \\ &= \sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2 \end{aligned}$$

最後，將上述推導結果應用於最初的模型辨識情境，即比較兩個競爭模型 MMM 和 MM 在不同設計點  $x$  下的區分能力。假設  $\eta_j(x, \theta_j)$  和  $v_j^2(x, \theta_j)$  分別為兩個競爭對數常態分佈模型的平均數及變異數，而  $\mu_j(x, \theta_j)$  和  $\sigma_j^2(x, \theta_j)$  則分別為觀測值對數的常態分佈的平均數及變異數，其中  $j = 1, 2$ 。定義如下：

$$E(y) = \eta_j(x, \theta_j) = \exp\left\{\frac{\sigma_j^2(x, \theta_j)}{2} + \mu_j(x, \theta_j)\right\} \quad (4.4)$$

$$Var(y) = v_j^2(x, \theta_j) = \eta_j^2(x, \theta_j) [\exp\{\sigma_j^2(x, \theta_j)\} - 1] \quad (4.5)$$

因此，我們可以將  $\mu_j(x, \theta_j)$  和  $\sigma_j^2(x, \theta_j)$  進一步表達為：

$$\mu_j(x, \theta_j) = \log \left[ \frac{\eta_j(x, \theta_j)}{\{1 + v_j^2(x, \theta_j)\eta_j(x, \theta_j)^{-2}\}^{1/2}} \right] \quad (4.6)$$

$$\sigma_j^2(x, \theta_j) = \log \{1 + v_j^2(x, \theta_j)\eta_j(x, \theta_j)^{-2}\} \quad (4.7)$$

接著，依據先前的推導結果，KL 散度可以表示為：

$$D_{KL}(M_1, M_2, x, \theta_1, \theta_2) = \log \left( \frac{\sigma_2(x, \theta_2)}{\sigma_1(x, \theta_1)} \right) - \frac{\sigma_2^2(x, \theta_2) - \sigma_1^2(x, \theta_1) + (\mu_2(x, \theta_2) - \mu_1(x, \theta_1))^2}{2\sigma_2(x, \theta_2)^2} \quad (4.8)$$

由於 MM 模型是 MMM 模型的嵌套版本，因此在該研究中，真實模型需假設為 MMM 模型，並且其參數已知。舉例來說，令  $\theta_1 = (V, K, F) = (1, 1, 1)$ ，並假設兩個模型具有相同的變異數，即  $v_1^2(x) = v_2^2(x, \theta_2) = 1$ 。然而，文獻中並未明確設定  $\theta_2$  的範圍，因此在此假設  $\theta_2 \in [0.1, 100] \times [0.1, 100]$ 。在本設計情境中，預先設定使用三個設計點，接著利用先前所推導的目標函數封閉解形式進行計算，所得 KL-optimal 設計為：

$$\xi_{KL-c}^* = \begin{Bmatrix} 0.1 & 2.5 & 5 \\ 0.538 & 0.329 & 0.133 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為 0.0149，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{KL-c}^*) = (18.200, 11.053)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解（圖 4.1a），結果顯示其確實滿足最佳性條件，且與文獻中的結果高度一致。PSO-QN (Chen et al., 2020) 的具體設定為：PSO 使用 64 個粒子，迭代 200 次，而 L-BFGS 進行 2 次迭代。總計算時間為 39 秒。

從上述例子可見，若需透過推導目標函數的封閉解來計算 KL-optimal 設計，過程將會相當複雜，且在許多情境下可能無法獲得封閉解，進而產生諸多限制。因此，我們希望直接採用數值積分的方式來進行計算。這種方法的優勢在於能夠適用於各種模型假設與分佈，而不受封閉解推導的限制。然而，其主要缺點是相較於封閉解，數值積分的計算時間較長。為此，以下將展示在相同情境下，直接使用數值積分所得的結果，所得 KL-optimal 設計為：

$$\xi_{KL-n}^* = \begin{Bmatrix} 0.1 & 2.5 & 5 \\ 0.538 & 0.329 & 0.133 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為 0.0149，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{KL-n}^*) = (18.200, 11.053)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解（圖 4.1b），結果顯示其確實滿足最佳性條件，且與使用封閉解方法結果高度一致，這也證明我們採用的方法是可行的。PSO-QN 的具體設



定為：PSO 使用 64 個粒子，迭代 200 次，而 L-BFGS 進行 2 次迭代。總計算時間為 5165 秒。

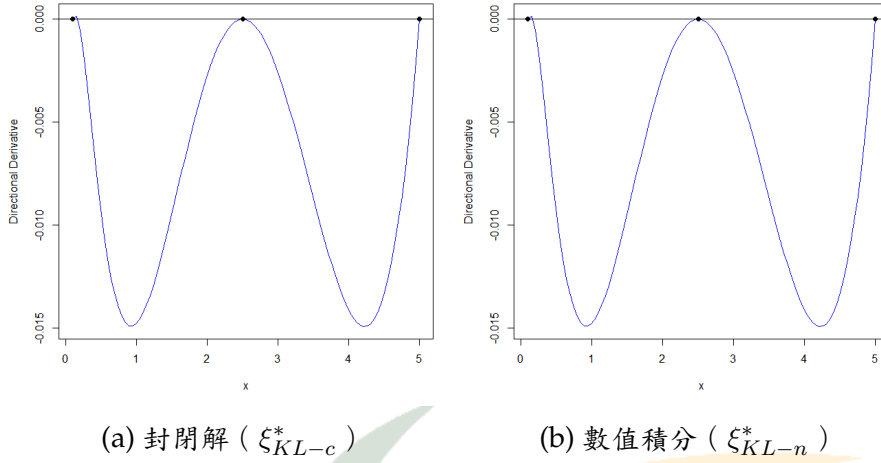


圖 4.1: 針對平均反應函數為 MMM 與 MM 模型並假設皆為對數常態分佈之情境，所產生之模型辨識設計的方向導數圖

López-Fidalgo et al. (2007) 以對數常態分佈為例，探討 KL-optimal 設計的計算方法，並透過封閉解進行最佳化。該研究主要關注藥代動力學模型，其誤差結構適合採用對數常態分佈來建模。然而，在可靠度測試領域，韋伯分佈被廣泛應用於描述產品壽命，特別是在 ALT 中的故障時間建模中具有優勢。因此，為了將模型辨識設計應用於可靠度領域，本研究進一步探討相同情境下，但誤差結構採用韋伯分佈的 KL-optimal 設計。我們將遵循相同的方法論，先以基本數學符號推導 KL 散度的一般性公式，並嘗試利用目標函數的封閉解尋找最佳化設計。

假設我們有兩個隨機變數  $P$  和  $Q$ ，它們分別服從形狀參數  $k_1$  和  $k_2$  以及比例參數  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  的韋伯分佈，其機率密度函數為：

$$p(y) = \frac{k_1}{\lambda_1} \left( \frac{y}{\lambda_1} \right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \quad (4.9)$$

$$q(y) = \frac{k_2}{\lambda_2} \left( \frac{y}{\lambda_2} \right)^{k_2-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_2}\right)^{k_2}} \quad (4.10)$$

在下面的積分計算中， $\gamma$  是 Euler-Mascheroni 常數，設

$$u = \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1} \Rightarrow y = \lambda_1 u^{\frac{1}{k_1}} \Rightarrow du = \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} dy$$

則 Kullback-Leibler (KL) 散度可寫為：

$$\begin{aligned} D_{KL}(P \parallel Q) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(y) \log \left( \frac{p(y)}{q(y)} \right) dy \\ &= \int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \log \left( \frac{\frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}}}{\frac{k_2}{\lambda_2} \left(\frac{y}{\lambda_2}\right)^{k_2-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_2}\right)^{k_2}}} \right) dy \\ &= \log \left( \frac{k_1}{k_2} \right) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} dy}_1 + \log \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} dy}_1 \\ &\quad + (k_1 - 1) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \log \left( \frac{y}{\lambda_1} \right) dy}_{-\frac{\gamma}{k_1}} - \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1} dy}_1 \\ &\quad - (k_2 - 1) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \log \left( \frac{y}{\lambda_2} \right) dy}_{\log\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right) - \frac{\gamma}{k_1}} + \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \left(\frac{y}{\lambda_2}\right)^{k_2} dy}_{\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{k_2} \Gamma\left(\frac{k_2}{k_1} + 1\right)} \\ &= \log \left( \frac{k_1}{k_2} \right) + \log \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) - \frac{k_1 - 1}{k_1} \gamma - 1 - (k_2 - 1) \log \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) + \frac{k_2 - 1}{k_1} \gamma + \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{k_2} \Gamma \left( \frac{k_2}{k_1} + 1 \right) \end{aligned}$$

第一項及第二項積分為：

$$\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} dy = 1, \text{ 該結果來自韋伯分佈的機率密度函數積分為 } 1。$$

第三項積分為：

$$\begin{aligned} &\int_0^{\infty} \frac{k_1}{\lambda_1} \left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \log \left( \frac{y}{\lambda_1} \right) dy \\ &= \int_0^{\infty} e^{-u} \log \left( u^{\frac{1}{k_1}} \right) du \\ &= \frac{1}{k_1} \int_0^{\infty} e^{-u} \log(u) du \\ &= \frac{1}{k_1} - \gamma \end{aligned}$$

第四項積分為：

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \frac{k_1}{\lambda_1} \left( \frac{y}{\lambda_1} \right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \left( \frac{y}{\lambda_2} \right)^{k_2} dy \\
 &= \int_0^\infty u e^{-u} du \\
 &= \int_0^\infty u^{2-1} e^{-u} du \\
 &= \Gamma(2) \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

第五項積分為：

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \frac{k_1}{\lambda_1} \left( \frac{y}{\lambda_1} \right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \log \left( \frac{y}{\lambda_2} \right) dy \\
 &= \int_0^\infty e^{-u} \log \left( \frac{\lambda_1 u^{\frac{1}{k_1}}}{\lambda_2} \right) du \\
 &= \int_0^\infty e^{-u} \log \lambda_1 du + \int_0^\infty e^{-u} \log \left( u^{\frac{1}{k_1}} \right) du - \int_0^\infty e^{-u} \log \lambda_2 du \\
 &= \log \lambda_1 (-e^{-u} |_0^\infty) + \frac{1}{k_1} \int_0^\infty e^{-u} \log u du - \log \lambda_2 (-e^{-u} |_0^\infty) \\
 &= \log \lambda_1 + \frac{1}{k_1} - \gamma - \log \lambda_2 \\
 &= \log \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) - \frac{\gamma}{k_1}
 \end{aligned}$$

第六項積分為：

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \frac{k_1}{\lambda_1} \left( \frac{y}{\lambda_1} \right)^{k_1-1} e^{-\left(\frac{y}{\lambda_1}\right)^{k_1}} \left( \frac{y}{\lambda_2} \right)^{k_2} dy \\
 &= \int_0^\infty e^{-u} \left( \frac{\lambda_1 u^{\frac{1}{k_1}}}{\lambda_2} \right)^{k_2} du \\
 &= \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{k_2} \int_0^\infty u^{\frac{k_2}{k_1}+1-1} e^{-u} du \\
 &= \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{k_2} \Gamma \left( \frac{k_2}{k_1} + 1 \right)
 \end{aligned}$$

假設  $\eta_j(x, \theta_j)$  為兩個競爭韋伯分佈模型的平均數，其中  $j = 1, 2$ 。定義如下：

$$E(y) = \eta_j(x, \theta_j) \quad (4.11)$$

$$\lambda_j(x, \theta_j) = \frac{\eta_j(x, \theta_j)}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{k_j}\right)} \quad (4.12)$$

令  $\theta_1 = (V_1, K_1, F_1) = (1, 1, 1)$ ，並假設兩個模型具有相同的變異數，即  $v_1^2(x) = v_2^2(x, \theta_2) = 1$ ，且  $\theta_2 = (V_2, K_2) \in [0.1, 100] \times [0.1, 100]$ 。我們採用重新參數化的韋伯分佈，其尺度參數設定為  $\lambda = \exp(\mu)$ ，形狀參數設定為  $k = 1/\sigma$ ，使得  $\mu$  和  $\sigma$  分別可近似代表對數平均數與對數變異程度。此種參數化方式有助於提高模型的可解釋性與數值穩定性，且其概念與極值理論中常見的 log-Weibull 結構相近 (Coles et al., 2001)。在此設計情境中，最佳化設計限定採用三個支持點，即指定實驗條件的數量。利用前述封閉解目標函數進行數值計算，所得 KL-optimal 設計為：

$$\xi_{KL-c}^* = \begin{Bmatrix} 0.504 & 2.989 & 5 \\ 0.570 & 0.310 & 0.120 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為 0.00392，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{KL-c}^*) = (22.502, 14.580)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解 (圖 4.2a)，結果顯示其確實滿足最佳性條件。PSO-QN 的具體設定為：PSO 使用 64 個粒子，迭代 200 次，而 L-BFGS 進行 5 次迭代。總計算時間為 40 秒。

相較於第一個例子，本例中推導封閉解的難度更高。因此，我們也在相同情境下透過數值積分獲得結果，並將其與使用目標函數的封閉解設計進行比較。所得 KL-optimal 設計為：

$$\xi_{KL-n}^* = \begin{Bmatrix} 0.507 & 2.991 & 5 \\ 0.570 & 0.310 & 0.120 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為 0.00389，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{KL-n}^*) = (22.548, 14.622)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最

佳解 (圖 4.2b)，結果顯示其確實滿足最佳性條件，且與使用封閉解方法結果高度一致，這也證明我們採用的方法是可行的。PSO-QN 的具體設定為：PSO 使用 64 個粒子，迭代 200 次，而 L-BFGS 進行 5 次迭代。總計算時間為 102768 秒。

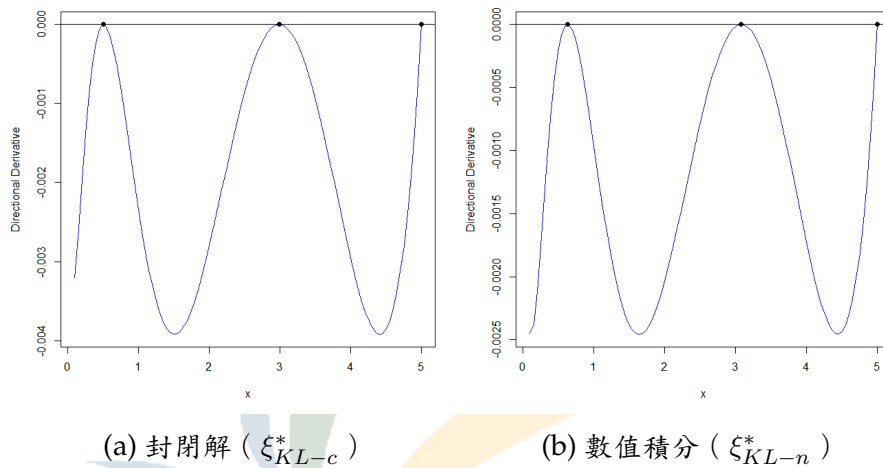


圖 4.2: 針對平均反應函數為 MMM 與 MM 模型並假設皆為韋伯分佈之情境，所產生之模型辨識設計的方向導數圖

透過上述兩個例子，我們驗證了使用數值積分取代封閉解的可行性，並比較了數值積分方法與文獻中封閉解方法的結果，發現兩者在設計點與準則值上高度一致。此外，由於本研究的計算過程與原作者可能存在細節上的差異，因此我們通過測試來確認所實施的方法是否能夠穩定重現已發表結果。實驗結果顯示，我們的方法不僅能夠成功復現文獻中的 KL-optimal 設計，且在不同的分佈假設下皆展現良好的穩定性與適用性。因此，我們確信該方法適用於更廣泛的模型辨識問題，並可應對大部分的情境。

在確認方法的可行性與穩定性後，接下來將進入本研究的核心部分，探討如何在加速壽命試驗 (ALT) 中應用模型辨識設計，並結合不同的散度準則來優化實驗設計。

## 4.2 Type I 設限下給定對立模型變異數之模型辨識設計

承接前一小節的結果驗證，我們確認所提出的方法具備穩定性與可行性。接下來，我們將研究焦點導入本研究的主軸：以可靠度領域中常用的 Arrhenius 模型為基礎，結合 ALT 中常見的 Type I 設限數據（即產品於實驗終止時尚未失效），進一步比較我們所提出的四種最佳化設計在雙模型辨識下的表現。

本節中設計的兩個競爭模型如下：

- 真實模型  $M_1$  為二次形式：

$$\eta_{tr}(x, \theta_1) = \zeta_1 + \zeta_2 x + \zeta_3 x^2 \quad (4.13)$$

- 競爭模型  $M_2$  為線性形式：

$$\eta_2(x, \theta_2) = \delta_1 + \delta_2 x \quad (4.14)$$

在此， $\eta(x)$  表示模型的平均反應函數（Mean Response Function），即轉換後反應變數  $\log(t)$  的期望值。此轉換來自於 Arrhenius 模型，透過對壽命  $t$  取對數，將原本指數型的溫度-壽命關係線性化（見式 (2.7)）。誤差項  $\epsilon$  假設遵循對數位置尺度分佈（Log-location-scale Distribution）。由於兩個模型互為巢狀（Nested Models），因此設定真實模型為  $M_1$ ，且參數向量  $\theta$  分別對應於  $M_1$  的  $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  和  $M_2$  的  $(\delta_1, \delta_2)$ 。

為了將溫度轉換為可用於建模的加速變數，參考 Arrhenius 模型的轉換形式，我們定義連結函數如下：

$$x = \frac{11605}{\text{Temp}_C + 273.15} \quad (4.15)$$

其中  $\text{Temp}_C$  為攝氏溫度。此轉換反映高溫會加速失效速率並縮短壽命的物理機制。

在此基礎下，我們假設產品壽命  $t$  分佈為對數常態分佈則經最大概似估計後，對應之標準差估計值（以外部真實數據進行模擬，設限時

間為 5000 ) 為  $\hat{\sigma} = 0.9780103$  , 因此以下情境模擬將從這此估計參數出發討論, 並設置真實模型參數  $\theta_{tr} = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = (-5.0, -1.5, 0.05)$  。對立模型參數範圍為  $\theta_2 = (\delta_1, \delta_2) \in [-100, -10] \times [0.1, 5.0]$  。設計空間為  $x \in [10, 80]$  。

在後續模擬中之標準差參數, 皆是以最大概似估計值  $\hat{\sigma} = 0.9780103$  為基準, 進行擴展討論。為簡化呈現, 文中僅以其首位近似值 ( 如: 0.98, 1.48, 1.98 等 ) 標示之, 實際使用數值仍保留完整精度 ( 如 0.9780103, 1.4780103, 1.9780103 等 ) 。PSO-QN 的具體設定為: PSO 使用 64 個粒子, 迭代 200 次, 而 L-BFGS 進行 50 次迭代。

下表 4.1 至 4.8 中, 欄位 Dis. 代表所假設的模型分佈類型, 包括對數常態分佈 ( Log-Normal, LN ) 與韋伯分佈 ( Weibull, WB ) 。本研究分別在四種不同的散度準則下, 搜尋模型辨識的最佳實驗設計及能使準則值達到最小的參數組合  $\hat{\theta}$  , 同時計算準則值  $C^*$  以評估設計效能。為了檢視最佳化過程的穩定性, 本研究將最終取得的設計與參數重新帶回演算法中, 再次計算準則值  $\hat{C}$  , 以確認結果一致性。Time 欄位則記錄每組情境下的 CPU 計算時間, 單位為秒 ( Seconds ) , 以便比較不同設計之計算效率。

最後, 欄位 Eqv. 紀錄了等價定理 ( Equivalence Theorem ) 檢查的結果。至於如何判斷是否滿足最佳性條件, 我們根據以下幾個特徵進行判定:

1. 所選擇的近似設計之設計點皆具有非零權重。
2. 在方向導數圖 ( Directional Derivative Plot ) 中, 藍色函數線應整體位於 0 以下, 表示目前的設計在所有設計點下皆無提升空間。
3. 圖中標記的設計點 ( 黑點 ) 必須剛好位於該函數的局部最大值處, 且此最大值應恰為 0, 這是等價定理成立的核心條件。
4. 整體曲線應呈現光滑連續且近似拋物線的形狀, 符合傳統最佳化設



計理論的幾何特徵。

最佳性 ( Optimality ) 檢查結果分為三種等級：

- $\checkmark$  表示完全滿足最佳性條件：符合前述四項特徵，包括設計點具有  
  權重、方向導數函數全數位於 0 以下、設計點對應至局部最大值且  
  該最大值為 0，以及圖形呈現平滑連續等。
- $\triangle$  表示部分滿足最佳性條件，常見的情況如下：
  - 雖然函數值皆低於 0，且設計點也對應至函數的局部最大值，  
  但僅有一個點具有非零權重。
  - 函數線僅有小部分超過 0，整體仍維持在 0 附近，從數值判斷  
  仍具備達成最佳性的潛力。
  - 函數值皆低於 0，但函數的局部最大值位置與支持點未重疊。
  - 未顯示方向導數函數，曲線變動幅度極小，導致難以明確判斷  
  最佳性，但其具潛力滿足最佳性條件。
- $\times$  表示不滿足最佳性條件：上述四項條件皆未達成。

表 4.1、表 4.3、表 4.5、表 4.7 分別呈現四種不同散度 ( CKL、CLW、CB、 $C\chi^2$  ) 在假設兩個模型具有相同變異數下的最佳化設計結果；而表 4.2、表 4.4、表 4.6、表 4.8 則對應於兩模型具有不同變異數的情況下，分別比較這些距離測度的表現。

1. CKL-optimal 設計 ( 表 4.1 與 4.2 ) 共模擬了 18 個例子，其中有 12  
  個完全滿足最佳性條件 (  $\checkmark$  )，3 個部分滿足 (  $\triangle$  )，3 個未滿足  
  (  $\times$  )。
2. CLW-optimal 設計 ( 表 4.3 與 4.4 ) 共模擬了 18 個例子，其中僅 4  
  個完全滿足最佳性條件 (  $\checkmark$  )，6 個部分滿足 (  $\triangle$  )，8 個不滿足  
  (  $\times$  )。
3. CB-optimal 設計 ( 表 4.5 與 4.6 ) 雖然共模擬 18 個例子，但無任何



例子完全滿足最佳性條件 (✓)，14 個屬於部分滿足 (△)，4 個不滿足 (×)。

4.  $C\chi^2$ -optimal 設計 (表 4.7 與 4.8) 共模擬 18 個例子，僅 2 個完全滿足 (✓)，7 個部分滿足 (△)，9 個不滿足 (×)。

整體來看，當設計結果完全滿足最佳性條件時，準則值  $C^*$  與利用該設計與參數重新代入計算所得的  $\hat{C}$  幾乎一致，顯示演算法穩定、設計具可靠性。需要特別指出的是：CB-optimal 設計由於其距離測度的公式結構特殊，常出現  $C^* = 1$ 、 $C^* = 0$  或極小值。這類設計通常在極短時間內即完成最佳化程序，顯示演算法可能快速收斂至一個錯誤或次佳的區域，而非真正的最佳點。因此，即使計算速度快，設計結果往往無法滿足最佳性條件，應審慎看待這類快速收斂的情況。

另一方面，針對部分滿足或完全不滿足最佳性條件的例子，可能的原因包括多方面。首先，積分過程可能出現數值不穩定的情況。儘管前述模擬已驗證數值積分的可行性，但在考慮 Type I 設限資料與更複雜的模型結構後，目標函數的數學形式變得更加複雜，仍可能導致局部積分誤差進而影響準則函數的準確性。另一個重要因素與內層最佳化問題的性質有關。雖然該目標函數在理論上具有可微性，但在實務上可能並不具備足夠的光滑性。特別是當函數表現出多個局部極值、呈現波浪狀結構時，像 L-BFGS 這類依賴局部曲率資訊、並假設存在單一收斂區域的準牛頓法，容易因為誤估梯度或陷入局部極小值而導致搜尋失敗，將難以有效收斂，導致設計品質下降。

總結而言，儘管模擬設計採取一致初始條件，但設計結果仍易受到模型假設、目標函數特性與數值穩定性等因素的影響，因此對每一組設計結果應結合等價性檢查與方向導數圖進行整體評估，以提高設計可靠性與實用價值。

表 4.1: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之 CKL-optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma$	$\xi_{CKL}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	0.98	$\begin{Bmatrix} 33.557 & 56.829 & 80 \\ 0.330 & 0.436 & 0.234 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00927 \\ (0.00927) \end{matrix}$	$(-66.712, 2.017)$	<a href="#">A.1a</a>	✓	18386
LN	1.48	$\begin{Bmatrix} 29.699 & 55.482 & 80 \\ 0.360 & 0.413 & 0.227 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00517 \\ (0.00517) \end{matrix}$	$(-67.204, 2.031)$	<a href="#">A.1c</a>	✓	58458
LN	1.98	$\begin{Bmatrix} 25.854 & 55.196 & 80 \\ 0.366 & 0.407 & 0.227 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00385 \\ (0.00380) \end{matrix}$	$(-66.268, 2.006)$	<a href="#">A.1e</a>	△	49577
WB	0.98	$\begin{Bmatrix} 32.545 & 57.686 & 80 \\ 0.368 & 0.415 & 0.217 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00822 \\ (0.00822) \end{matrix}$	$(-66.459, 2.010)$	<a href="#">A.1b</a>	△	59919
WB	1.48	$\begin{Bmatrix} 25.576 & 55.791 & 80 \\ 0.441 & 0.359 & 0.200 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00489 \\ (0.00489) \end{matrix}$	$(-67.083, 2.028)$	<a href="#">A.1d</a>	✓	68091
WB	1.98	$\begin{Bmatrix} 18.386 & 53.830 & 80 \\ 0.484 & 0.325 & 0.191 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00386 \\ (0.00386) \end{matrix}$	$(-63.987, 1.944)$	<a href="#">A.1f</a>	×	62045

表 4.2: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之情境，所產生之 CKL-optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\xi_{CKL}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 76.132 & 80 & 80 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.841 \\ (0.841) \end{matrix}$	$(-52.575, 1.591)$	<a href="#">A.2a</a>	△	62666
LN	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 50.868 & 65.674 & 80 \\ 0.167 & 0.545 & 0.289 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.327 \\ (0.327) \end{matrix}$	$(-63.613, 1.925)$	<a href="#">A.2b</a>	✓	53043
LN	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 33.417 & 62.084 & 80 \\ 0.032 & 0.587 & 0.381 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.133 \\ (0.133) \end{matrix}$	$(-64.846, 1.962)$	<a href="#">A.2c</a>	✓	54685
LN	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 52.007 & 67.791 & 80 \\ 0.085 & 0.577 & 0.338 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.230 \\ (0.230) \end{matrix}$	$(-62.900, 1.904)$	<a href="#">A.2d</a>	✓	65978
LN	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 43.412 & 61.109 & 80 \\ 0.213 & 0.521 & 0.266 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.339 \\ (0.339) \end{matrix}$	$(-65.183, 1.972)$	<a href="#">A.2e</a>	×	23744
LN	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 47.75 & 64.187 & 80 \\ 0.161 & 0.547 & 0.292 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.885 \\ (0.885) \end{matrix}$	$(-64.115, 1.940)$	<a href="#">A.2f</a>	✓	30497
WB	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 58.678 & 69.702 & 80 \\ 0.154 & 0.551 & 0.295 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.600 \\ (0.600) \end{matrix}$	$(-61.542, 1.884)$	<a href="#">A.3a</a>	✓	109772
WB	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 46.469 & 62.717 & 80 \\ 0.215 & 0.525 & 0.261 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.292 \\ (0.292) \end{matrix}$	$(-64.861, 1.955)$	<a href="#">A.3b</a>	✓	76696
WB	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 32.393 & 59.119 & 80 \\ 0.064 & 0.597 & 0.339 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.117 \\ (0.117) \end{matrix}$	$(-66.032, 1.992)$	<a href="#">A.3c</a>	✓	79644
WB	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 49.573 & 64.735 & 80 \\ 0.181 & 0.549 & 0.270 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.176 \\ (0.600) \end{matrix}$	$(-63.807, 1.939)$	<a href="#">A.3d</a>	✓	102226
WB	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 41.993 & 58.347 & 76.142 \\ 0.231 & 0.526 & 0.244 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.303 \\ (0.227) \end{matrix}$	$(-70.313, 2.112)$	<a href="#">A.3e</a>	×	62836
WB	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 45.473 & 62.576 & 80 \\ 0.189 & 0.551 & 0.260 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.635 \\ (0.635) \end{matrix}$	$(-64.316, 1.957)$	<a href="#">A.3f</a>	✓	81337

表 4.3: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之 CLW-optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma$	$\xi_{CLW}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CLW}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	0.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 31.597 & 31.714 \\ 0.000 & 0.999 & 0.001 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00551 \\ (0.00551) \end{matrix}$	$(-94.530, 3.277)$	A.4a	×	793
LN	1.48	$\begin{Bmatrix} 79.410 & 80 & 80 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.693 \\ (-2.675 \times 10^{-6}) \end{matrix}$	$(-86.830, 2.632)$	A.4c	×	3239
LN	1.98	$\begin{Bmatrix} 80 & 80 & 80 \\ 0.066 & 0.143 & 0.791 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.693 \\ (-7.356 \times 10^{-6}) \end{matrix}$	$(-73.661, 2.232)$	A.4e	×	3299
WB	0.98	$\begin{Bmatrix} 66.764 & 69.61 & 80 \\ 0.001 & 0.998 & 0.001 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.694 \\ (0.694) \end{matrix}$	$(-67.984, 2.751)$	A.4b	△	3175
WB	1.48	$\begin{Bmatrix} 58.379 & 59.356 & 80 \\ 0.001 & 0.989 & 0.010 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.693 \\ (-8.071 \times 10^{-6}) \end{matrix}$	$(-62.162, 1.883)$	A.4d	×	5288
WB	1.98	$\begin{Bmatrix} 16.897 & 53.487 & 80 \\ 0.482 & 0.311 & 0.207 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.00107 \\ (-0.000827) \end{matrix}$	$(-62.796, 1.907)$	A.4f	✓	32163

表 4.4: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之情境，所產生之 CLW-optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\xi_{CLW}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CLW}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 52.005 & 57.073 & 80 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0751 \\ (0.0732) \end{matrix}$	$(-66.588, 2.010)$	A.5a	×	4343
LN	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 57.022 & 68.893 & 72.433 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.705 \\ (0.705) \end{matrix}$	$(-82.884, 4.692)$	A.5b	△	2592
LN	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 61.118 & 62.214 & 80 \\ 0.726 & 0.126 & 0.148 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0475 \\ (0.0451) \end{matrix}$	$(-62.081, 1.880)$	A.5c	✓	3316
LN	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 57.404 & 61.771 & 80 \\ 0.288 & 0.217 & 0.495 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0315 \\ (0.0307) \end{matrix}$	$(-62.481, 1.892)$	A.5d	✓	3583
LN	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 69.351 & 76.607 & 80 \\ 0.856 & 0.031 & 0.113 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.695 \\ (0.131) \end{matrix}$	$(-84.952, 2.556)$	A.5e	×	2608
LN	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 45.006 & 50.316 & 80 \\ 0.436 & 0.000 & 0.564 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0858 \\ (0.686) \end{matrix}$	$(-71.609, 2.537)$	A.5f	△	3455
WB	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 76.217 & 80 & 80 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.693 \\ (0.0664) \end{matrix}$	$(-66.549, 2.020)$	A.6a	△	2497
WB	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 49.129 & 63.954 & 80 \\ 0.230 & 0.513 & 0.257 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.496 \\ (0.496) \end{matrix}$	$(-65.295, 1.943)$	A.6b	×	666111
WB	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 31.711 & 59.803 & 80 \\ 0.203 & 0.533 & 0.265 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0386 \\ (0.0366) \end{matrix}$	$(-70.211, 2.114)$	A.6c	△	5097
WB	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 62.798 & 65.451 & 80 \\ 0.583 & 0.330 & 0.087 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0284 \\ (0.693) \end{matrix}$	$(-59.234, 2.380)$	A.6d	✓	4659
WB	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 74.778 & 75.283 & 75.604 \\ 0.030 & 0.477 & 0.493 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.351 \\ (0.693) \end{matrix}$	$(-40.068, 1.937)$	A.6e	△	3694
WB	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 41.785 & 60.771 & 80 \\ 0.462 & 0.538 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.0703 \\ (0.596) \end{matrix}$	$(-73.372, 2.611)$	A.6f	×	4721

表 4.5: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之 CB-optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma$	$\xi_{CB}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CB}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	0.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 0.001 & 0.210 & 0.789 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ (1) \end{matrix}$	$(-83.787, 3.896)$	A.7a	$\triangle$	319
LN	1.48	$\begin{Bmatrix} 21.036 & 37.942 & 43.839 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 4.661 \times 10^{-75} \\ (1.000) \end{matrix}$	$(-50.864, 2.922)$	A.7c	$\triangle$	336
LN	1.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 0.037 & 0.225 & 0.738 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1.000 \\ (1.807 \times 10^{-43}) \end{matrix}$	$(-65.133, 0.757)$	A.7e	$\times$	308
WB	0.98	$\begin{Bmatrix} 13.011 & 31.319 & 72.62 \\ 0.715 & 0.020 & 0.265 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0) \end{matrix}$	$(-98.112, 1.771)$	A.7b	$\triangle$	549
WB	1.48	$\begin{Bmatrix} 11.236 & 16.331 & 51.198 \\ 0.127 & 0.102 & 0.771 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0) \end{matrix}$	$(-60.391, 0.729)$	A.7d	$\triangle$	443
WB	1.98	$\begin{Bmatrix} 11.969 & 22.932 & 40.06 \\ 0.432 & 0.001 & 0.567 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0) \end{matrix}$	$(-77.064, 1.004)$	A.7f	$\triangle$	1871

表 4.6: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之情境，所產生之 CB-optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\xi_{CB}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CB}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 0.018 & 0.328 & 0.654 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1.000 \\ (9.038 \times 10^{-60}) \end{matrix}$	$(-80.856, 1.492)$	A.8a	$\triangle$	320
LN	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 0.042 & 0.058 & 0.900 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ (1) \end{matrix}$	$(-62.980, 3.691)$	A.8b	$\times$	2592
LN	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 0.004 & 0.355 & 0.641 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ (1.761 \times 10^{-116}) \end{matrix}$	$(-77.233, 0.903)$	A.8c	$\times$	333
LN	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 15.502 & 40.168 & 76.326 \\ 0.088 & 0.276 & 0.637 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0.256) \end{matrix}$	$(-43.561, 2.292)$	A.8d	$\times$	443
LN	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 13.664 \\ 0.336 & 0.527 & 0.137 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ (1) \end{matrix}$	$(-12.408, 4.678)$	A.8e	$\triangle$	333
LN	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 29.672 & 67.096 & 74.092 \\ 0.621 & 0.198 & 0.180 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (2.069 \times 10^{-20}) \end{matrix}$	$(-88.604, 2.237)$	A.8f	$\triangle$	316
WB	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 34.337 & 71.517 & 79.083 \\ 0.118 & 0.545 & 0.338 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0) \end{matrix}$	$(-78.484, 1.190)$	A.9a	$\triangle$	1120
WB	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 25.219 & 33.485 & 72.658 \\ 0.127 & 0.763 & 0.110 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0) \end{matrix}$	$(-63.610, 0.858)$	A.9b	$\triangle$	1452
WB	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 22.499 & 23.034 & 43.321 \\ 0.144 & 0.322 & 0.534 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (0) \end{matrix}$	$(-67.238, 0.887)$	A.9c	$\triangle$	445
WB	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 0.057 & 0.419 & 0.524 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0.999 \\ (0.999) \end{matrix}$	$(-58.774, 3.780)$	A.9d	$\triangle$	706
WB	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 48.499 & 55.901 & 62.657 \\ 0.007 & 0.823 & 0.170 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ (2.870 \times 10^{-17}) \end{matrix}$	$(-43.884, 3.505)$	A.9e	$\triangle$	518
WB	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 10 & 46.047 & 70.919 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$\begin{matrix} 1.000 \\ (1.000) \end{matrix}$	$(-52.593, 3.173)$	A.9f	$\triangle$	551

表 4.7: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之  $C\chi^2$ -optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma$	$\xi_{C\chi^2}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{C\chi^2}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	0.98	$\begin{Bmatrix} 80 & 80 & 80 \\ 0.014 & 0.449 & 0.537 \end{Bmatrix}$	$4.938 \times 10^{11}$ ( $-1.698 \times 10^{-10}$ )	(-75.507, 2.289)	A.10a	×	3394
LN	1.48	$\begin{Bmatrix} 41.953 & 46.694 & 47.929 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{Bmatrix}$	726.370 ( $-9.216 \times 10^{-6}$ )	(-65.563, 1.983)	A.10c	×	2277
LN	1.98	$\begin{Bmatrix} 22.557 & 28.732 & 34.66 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	0.0230 (0.0233)	(-64.951, 1.967)	A.10e	△	1353
WB	0.98	$\begin{Bmatrix} 11.049 & 16.362 & 34.388 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{Bmatrix}$	0.0296 ( $-4.966 \times 10^{-9}$ )	(-59.045, 1.819)	A.10b	△	25836
WB	1.48	$\begin{Bmatrix} 29.181 & 46.269 & 61.937 \\ 0.999 & 0.000 & 0.001 \end{Bmatrix}$	0.0196 ( $-4.332 \times 10^{-9}$ )	(-71.474, 2.151)	A.10d	×	65818
WB	1.98	$\begin{Bmatrix} 12.069 & 23.116 & 31.719 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	0.0146 ( $-4.941 \times 10^{-9}$ )	(-62.198, 1.919)	A.10f	×	47360

表 4.8: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之情境，所產生之  $C\chi^2$ -optimal 設計的結果。

Dis.	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\xi_{C\chi^2}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{C\chi^2}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
LN	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 80 & 80 & 80 \\ 0.000 & 0.005 & 0.995 \end{Bmatrix}$	457251.8 (-0.969)	(-59.428, 1.893)	A.11a	×	5395
LN	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 45.597 & 61.641 & 64.68 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	0.532 (0.526)	(-59.442, 1.804)	A.11b	△	2931
LN	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 30.879 & 61.575 & 69.17 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	0.219 (0.218)	(-64.922, 1.967)	A.11c	△	2413
LN	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 43.696 & 45.881 & 66.72 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{Bmatrix}$	13.689 (13.692)	(-62.586, 1.890)	A.11d	△	4297
LN	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 54.039 & 80 & 80 \\ 0.000 & 0.004 & 0.996 \end{Bmatrix}$	$8.422 \times 10^{11}$ (-1.000)	(-69.759, 2.146)	A.11e	×	3450
LN	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 80 & 80 & 80 \\ 0.022 & 0.380 & 0.598 \end{Bmatrix}$	$4.938 \times 10^{15}$ (167714.9)	(-75.719, 2.287)	A.11f	×	3560
WB	1.98	0.98	$\begin{Bmatrix} 10 & 34.502 & 53.741 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	-51105.61 (-163214.6)	(-45.631, 2.366)	A.12a	×	72416
WB	0.98	1.98	$\begin{Bmatrix} 56.336 & 58.701 & 76.992 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	0.494 (0.487)	(-58.049, 1.761)	A.12b	×	26184
WB	0.98	1.48	$\begin{Bmatrix} 30.746 & 61.381 & 80 \\ 0.000 & 0.361 & 0.639 \end{Bmatrix}$	0.192 (0.189)	(-62.108, 1.878)	A.12c	×	94295
WB	1.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 80 & 80 & 80 \\ 0.002 & 0.005 & 0.993 \end{Bmatrix}$	1.152 (1.152)	(-56.581, 1.735)	A.12d	△	154226
WB	0.48	0.98	$\begin{Bmatrix} 41.312 & 57.184 & 74.433 \\ 0.228 & 0.526 & 0.246 \end{Bmatrix}$	0.507 (0.507)	(-66.715, 2.013)	A.12e	△	92497
WB	0.98	0.48	$\begin{Bmatrix} 10 & 32.163 & 46.132 \\ 0.000 & 0.005 & 0.995 \end{Bmatrix}$	4996.081 (-12323.91)	(-55.175, 2.385)	A.12f	×	5097

### 4.3 Type I 設限下對立模型變異數參數化之模型辨識設計

根據前一小節的結果，僅有 CKL-optimal 設計在有設限時間的情況下仍能保持穩定表現，因此接下來我們將專注於 CKL-optimal 設計進行模擬分析。與前一節固定兩模型變異數不同，本節進一步將變異數納入參數搜尋中，以建立更具彈性與實務性的分析架構。

#### 4.3.1 相同分佈假設下競爭平均反應函數之變異參數化

為了探討在對立模型中，變異數亦需納入參數搜尋的情境，本節延續前述的實驗設計設定。真實模型的參數設為  $\theta_{tr} = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = (-5.0, -1.5, 0.05)$ ，並採用先前表現良好的變異數值（0.9780103 與 1.4780103）。對立模型的參數設定為  $(\delta_1, \delta_2) \in [-100, -10] \times [0.1, 5.0]$ ，其變異數  $\sigma_2$  被視為一個未知常數，範圍設定為  $\sigma_2 \in [0.4780103, 4.9780103]$ ，設限時間為 5000。實驗設計空間則為  $x \in [10, 80]$ 。PSO-QN 的具體設定為：PSO 使用 64 個粒子，迭代 200 次，而 L-BFGS 進行 50 次迭代。

本節將分別探討在兩種情況下，當兩個模型皆假設為對數常態分佈與皆假設為韋伯分佈時的 CKL-optimal 設計結果。

目前的模型設定如下：

- 真實模型  $M_1$  為二次形式：

$$\eta_{tr}(x, \theta_1) = \zeta_1 + \zeta_2 x + \zeta_3 x^2 \quad (4.16)$$

- 競爭模型  $M_2$  為線性形式：

$$\eta_2(x, \theta_2) = \delta_1 + \delta_2 x \quad (4.17)$$

其中與先前設定不同的是，參數向量分別為  $\theta_{tr} = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  與  $\theta_2 = (\delta_1, \delta_2, \sigma_2)$ ，即競爭模型  $M_2$  額外包含一個在優化過程中被視為一個搜索變數的未知變異數參數  $\sigma_2$ 。

- 兩模型皆服從對數常態分佈：

1. 真實模型變異數為 0.9780103：

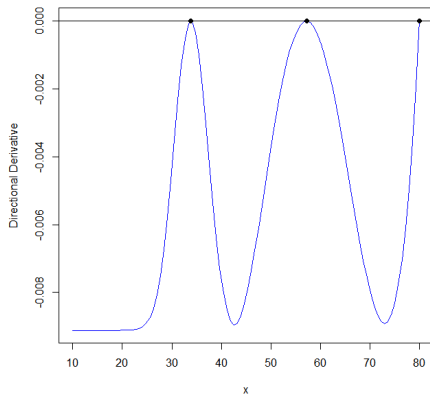
$$\xi_{CKL}^* = \begin{Bmatrix} 33.799 & 57.185 & 80 \\ 0.317 & 0.443 & 0.240 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為  $9.116 \times 10^{-3}$ ，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*) = (\hat{\delta}_1, \hat{\delta}_2, \hat{\sigma}_2) = (-66.584, 2.013, 0.965)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解（圖 4.3a），結果顯示其確實滿足最佳性條件。總計算時間為 144836 秒。

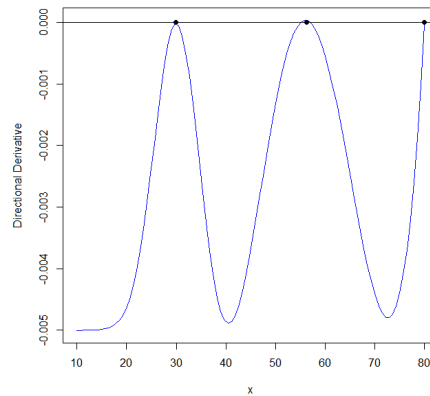
2. 真實模型變異數為 1.4780103：

$$\xi_{CKL}^* = \begin{Bmatrix} 29.974 & 56.272 & 80 \\ 0.339 & 0.423 & 0.238 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為 0.00501，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*) = (\hat{\delta}_1, \hat{\delta}_2, \hat{\sigma}_2) = (-66.986, 2.025, 1.457)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解（圖 4.3b），結果顯示其確實滿足最佳性條件。總計算時間為 149893 秒。



(a)  $\sigma_1 = 0.9780103$



(b)  $\sigma_1 = 1.4780103$

圖 4.3: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之對數常態分佈情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。



- 兩模型皆服從韋伯分佈：

1. 真實模型變異數為 0.9780103：

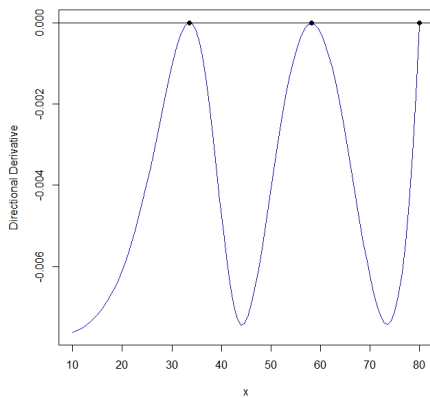
$$\xi_{CKL}^* = \begin{Bmatrix} 33.531 & 58.185 & 80 \\ 0.340 & 0.434 & 0.226 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為 0.00784，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*) = (\hat{\delta}_1, \hat{\delta}_2, \hat{\sigma}_2) = (-66.207, 2.002, 0.957)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解（圖 4.4a），結果顯示其確實滿足最佳性條件。總計算時間為 134408 秒。

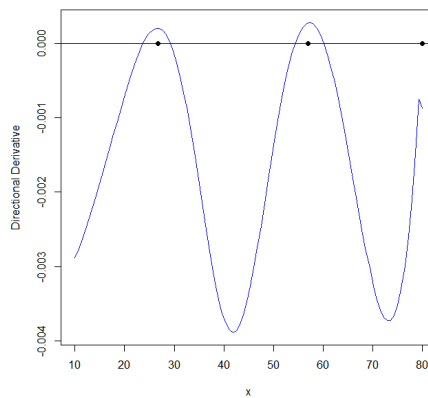
2. 真實模型變異數為 1.4780103：

$$\xi_{CKL}^* = \begin{Bmatrix} 26.713 & 57.032 & 80 \\ 0.396 & 0.382 & 0.222 \end{Bmatrix}$$

對應的準則值為  $4.491 \times 10^{-3}$ ，並得到能使準則值達到最小的參數組合為  $\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*) = (\hat{\delta}_1, \hat{\delta}_2, \hat{\sigma}_2) = (-66.560, 2.013, 1.441)$ 。此外，透過等價定理驗證該設計是否為最佳解（圖 4.4b），結果顯示其確實滿足最佳性條件。總計算時間為 85551 秒。



(a)  $\sigma_1 = 0.9780103$



(b)  $\sigma_1 = 1.4780103$

圖 4.4: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之韋伯分佈情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。



在這個延伸的設計情境中，我們將競爭模型的變異數視為未知參數，並與位置參數一同納入最佳化架構中。圖 4.3 與圖 4.4 所示為各設計結果對應的方向導數圖。從圖中可見，雖然部分設計尚未完全符合最佳性條件，但整體表現皆具有高度潛力，若進一步提升演算法的迭代次數，預期將可達成更佳的收斂與設計品質。值得注意的是，各情境中搜尋出的變異數  $\hat{\sigma}_2$  皆趨近於真實模型所設定的  $\sigma_1$ ，這個結果並不是說模型能夠「成功還原」真實變異，而是透露出一項更重要的設計原理：為了最大化模型之間的可區辨性，CKL 準則下的競爭模型傾向選擇與真實模型變異數接近的結構，藉此放大平均結構之間的差異，達到最佳模型辨識效果。

為協助觀察固定變異數與搜尋變異數兩種情境下的設計差異，表 4.1 的資訊已整合至表 4.9 與表 4.10，同時呈現支撐點、對應權重與在設限時間  $C$  前的累積失效機率，有助於視覺與數值層面的整體比較。

從兩種分佈的結果觀察可知，將對立模型變異數納入搜尋後，對數常態分佈與韋伯分佈的前兩個支撐點皆有往高應力方向移動的趨勢，但幅度不同：對數常態分佈的位移較小、變化溫和，而韋伯分佈則顯示出明顯偏向高應力區的設計調整，反映出其對尾部特性與設限效應的敏感性更高。

另一方面，為確認設計的實用性，我們計算各支撐點在  $C$  前的累積失效機率，確保在有限觀測時間內能觀察到足夠的失效事件。若失效機率過低，容易導致資料過度設限，不利於模型辨識與參數搜尋。

結果顯示，所有設計點的累積失效機率多介於 5% 至 100% 間，意味每個點皆能觀察到一定比例的失效樣本，避免資訊不足，有助於提升模型辨識能力與整體實驗效率，證實 CKL-optimal 設計在設限條件下具備良好可行性與辨識效能。

表 4.9: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，給定變異數與變異數參數化所產生之 CKL-optimal 設計的設計點、權重、在設限時間前產品失效之累積機率 (  $\sigma = 0.9780103$  )。

Model	Point	Weight	Cumulative Probability
<b>Log-Normal (fixed <math>\theta_2</math>)</b>			
	33.557	0.330	0.0902
	56.829	0.436	1.000
	80	0.234	1
<b>Log-Normal (unknown <math>\theta_2</math>)</b>			
	33.799	0.317	0.102
	57.185	0.443	1.000
	80	0.226	1
<b>Weibull (fixed <math>\theta_2</math>)</b>			
	32.545	0.368	0.177
	57.686	0.415	1
	80	0.217	1
<b>Weibull (unknown <math>\theta_2</math>)</b>			
	33.531	0.340	0.229
	58.185	0.434	1
	80	0.226	1

表 4.10: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，給定變異數與變異數參數化所產生之 CKL-optimal 設計的設計點、權重、在設限時間前產品失效之累積機率 (  $\sigma = 1.4780103$  )。

Model	Point	Weight	Cumulative Probability
<b>Log-Normal (fixed <math>\theta_2</math>)</b>			
	29.699	0.360	0.0506
	55.482	0.413	0.997
	80	0.227	1
<b>Log-Normal (unknown <math>\theta_2</math>)</b>			
	29.974	0.339	0.0566
	56.272	0.423	0.998
	80	0.238	1
<b>Weibull (fixed <math>\theta_2</math>)</b>			
	25.576	0.441	0.0801
	55.791	0.359	1
	80	0.200	1
<b>Weibull (unknown <math>\theta_2</math>)</b>			
	26.713	0.396	0.100
	57.032	0.382	1
	80	0.222	1

#### 4.3.2 競爭分佈假設下相同平均反應函數之應力相依變異

本小節參考 [Pascual and Meeker \(1997\)](#) 提出之疲勞壽命模型架構，考量壽命資料存在疲勞極限（Fatigue Limit）條件，且標準差隨應力水準變動的情形。過去的疲勞壽命模型大多假設無疲勞極限且標準差為常數，然而在實際數據中，這類假設常導致模型誤差。引入標準差隨應力變化的結構，能更準確描述疲勞壽命曲線（S-N Curve）上的彎曲現象（Curvature）及資料分散特性。

為精確建構壽命分佈，本節採用該文中所建議之平均反應模型及與應力相關的標準差結構，並以其透過最大概似估計（MLE）及概似比信賴區間（Profile Likelihood Confidence Interval）方法所推得之參數估計結果作為模擬情境設定的基礎。其餘模擬情境則為自行設定，唯須符合兩項基本原則：首先，平均反應函數  $\eta(x, \theta)$  必須為隨應力變動的遞減函數，且其值需保持為正，以確保模型在數值運算上的合理性與穩定性；其次，標準差隨應力改變之變異幅度須控制在合理範圍內，以避免因  $\exp()$  過大導致數值爆炸（Overflow）。值得注意的是，他們的研究估計了參數  $\gamma = 75.71$ ，該參數同時出現在平均反應函數和變異數結構中，後續的模擬中將採用該值。

基於上述條件，本節進行一系列數值模擬與模型辨識分析。模擬情境如表 4.11 所示（設限時間為 1000），真實模型  $M_1$  和競爭模型  $M_2$  的結構如下，每個公式都包含一個平均回應函數和一個應力相關標準差函數。

- The true model  $M_1$  is:

$$\eta_{tr}(x, \theta) = \zeta_1 + \zeta_2 \log(x - \gamma) \quad (4.18)$$

$$\sigma_1 = \exp\{\phi_1 + \phi_2 \log(x - \gamma)\} \quad (4.19)$$

- The rival model  $M_2$ :

$$\eta_2(x, \theta) = \delta_1 + \delta_2 \log(x - \gamma) \quad (4.20)$$

$$\sigma_2 = \exp\{\kappa_1 + \kappa_2 \log(x - \gamma)\} \quad (4.21)$$

值得注意的是，在結果表格中，搜尋出的參數向量為  $\hat{\theta}_2(\xi^*CKL) = (\hat{\delta}_1, \hat{\delta}_2, \hat{\kappa}_1, \hat{\kappa}_2)$ ，分別對應到平均反應模型與應力相關變異數模型的參數。

在本研究最後的模擬案例中，雖然多數結果在數值上不穩定或方向導數圖難以解讀，但仍有部分案例展現出潛在可行性。具體而言，部分設計雖為退化（Degenerate）形式，僅包含單一支持點，其方向導數在整體設計區間內仍維持於零以下，顯示在等價理論下具穩定性。此外，亦有數組非退化設計，其方向導數曲線局部略為呈現正值，但這些正值的尺度極小（例如約  $10^{-9}$ ，且整體趨勢快速回落至零以下。這樣的現象顯示該設計具改善空間與轉為最佳設計的潛力。整體模擬結果詳見表 4.12，顯示不同組合條件下設計表現的變化情形。

實作上使用的積分計算亦可能是導致數值不穩定的來源之一，尤其對於設限項所對應之對數函數寫法，在特定參數與支撐點組合下易產生無法積分的非有限值。這樣的錯誤不僅會影響準則函數的正確性，也可能造成最佳化過程過早終止或陷入無意義的局部解。未來研究可考慮對積分結構進行優化，例如透過數值近似公式重寫對數項、改進積分上下限的設定，或加入判斷積分錯誤的補救機制，以提升整體演算法的穩健性與準確性。

此外，先前在模擬 CKL、CLW、CB 及  $C\chi^2$  準則時已發現，內層最佳化中的目標函數雖理論上可微，但實務上可能缺乏足夠光滑性。當函數呈現多個局部極值或波浪結構時，像 L-BFGS 這類依賴局部曲率的演算法容易收斂困難，造成梯度搜尋偏差與結果品質下降。在本節更複雜的情境下，此類問題更為明顯，顯示未來有必要針對目標函數結構與求解策略進行調整。

表 4.11: 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依時之模擬設定

Case	Dis.		$M_1$				$M_2$			
	$M_1$	$M_2$	$\zeta_1$	$\zeta_2$	$\phi_1$	$\phi_2$	$\delta_1$	$\delta_2$	$\kappa_1$	$\kappa_2$
(1)	LN	WB	14.75	-1.39	10.97	-2.5	[12.06,17.44]	[-2.02,-0.76]	[10,20]	[-3,-0.01]
(2)			14.75	-1.39	10.97	-2.5	[15.9,21.45]	[-2.81,-0.92]	[10,20]	[-3,-0.01]
(3)			10	-2	0.63	-0.91	[9.5,15]	[-2.1,-1]	[0.5,1]	[-1,-0.81]
(4)			43	-0.63	4.32	-0.88	[5,50]	[-1,-0.05]	[3.12,5.32]	[-1,-0.5]
(5)			458	-53	4.32	-0.88	[432,480]	[-100,-1]	[3.12,5.32]	[-1,-0.5]
(6)			53.39	-7.81	4.32	-0.88	[50,60]	[-10,-5]	[3.12,5.32]	[-1,-0.5]
(7)	WB	LN	14.75	-1.39	10.97	-2.5	[12.06,17.44]	[-2.02,-0.76]	[10,20]	[-3,-0.01]
(8)			14.75	-1.39	10.97	-2.5	[15.9,21.45]	[-2.81,-0.92]	[10,20]	[-3,-0.01]
(9)			10	-2	0.63	-0.91	[9.5,15]	[-2.1,-1]	[0.5,1]	[-1,-0.81]
(10)			43	-0.63	4.32	-0.88	[5,50]	[-1,-0.05]	[3.12,5.32]	[-1,-0.5]
(11)			458	-53	4.32	-0.88	[432,480]	[-100,-1]	[3.12,5.32]	[-1,-0.5]
(12)			53.39	-7.81	4.32	-0.88	[50,60]	[-10,-5]	[3.12,5.32]	[-1,-0.5]

表 4.12: 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依時之情境，所產生之 CKL-optimal 設計的結果。

Case	$\xi_{CKL}^*$	$C^*(\hat{C})$	$\hat{\theta}_2(\xi_{CKL}^*)$	Eqv.	Opt?	Time
(1)	$\begin{Bmatrix} 88.245 & 115.191 & 122.132 & 123.571 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$2.023 \times 10^{-8}$ ( $4.956 \times 10^{-9}$ )	(14.918, -1.350, 11.824, -2.942)	A.13a	$\triangle$	4083
(2)	$\begin{Bmatrix} 76.389 & 86.024 & 94.240 & 112.132 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$6.725 \times 10^{-8}$ ( $2.136 \times 10^{-8}$ )	(20.968, -2.056, 10, -2.397)	A.13b	$\triangle$	5043
(3)	$\begin{Bmatrix} 111.009 & 112.296 & 113.75 & 150 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	27.167 ( $6.275 \times 10^{-5}$ )	(10.597, -1.873, 0.723, -0.922)	A.13c	$\times$	4245
(4)	$\begin{Bmatrix} 77.297 & 78.038 & 109.932 & 132.334 \\ 1.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$2.449 \times 10^{-12}$ ( $5.462 \times 10^{-14}$ )	(36.931, -0.523, 3.791, -0.878)	A.13d	$\times$	3897
(5)	$\begin{Bmatrix} 90.99 & 98.775 & 108.941 & 116.822 \\ 0.464 & 0.231 & 0.271 & 0.035 \end{Bmatrix}$	0 (0)	(455.318, -49.116, 4.219, -0.533)	A.13e	$\triangle$	1376
(6)	$\begin{Bmatrix} 123.238 & 123.969 & 125.026 & 127.373 \\ 0.022 & 0.977 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$2.265 \times 10^{-14}$ ( $-4.305 \times 10^{-49}$ )	(55.951, -6.358, 3.846, -0.928)	A.13f	$\triangle$	7386
(7)	$\begin{Bmatrix} 76 & 86.748 & 126.815 & 150 \\ 0.476 & 0.247 & 0.000 & 0.277 \end{Bmatrix}$	$1.235 \times 10^{-4}$ ( $1.208 \times 10^{-4}$ )	(17.44, -1.638, 10, -2.028)	A.14a	$\triangle$	48506
(8)	$\begin{Bmatrix} 76 & 87.744 & 97.631 & 150 \\ 0.469 & 0.242 & 0.000 & 0.289 \end{Bmatrix}$	$1.173 \times 10^{-4}$ ( $1.156 \times 10^{-4}$ )	(18.350, -1.781, 10.011, -2.012)	A.14b	$\triangle$	54794
(9)	$\begin{Bmatrix} 80.622 & 94.153 & 94.67 & 127.625 \\ 0.259 & 0.519 & 0.000 & 0.221 \end{Bmatrix}$	0.0907 (0.0872)	(9.972, -1.995, 0.882, -0.839)	A.14c	$\times$	217023
(10)	$\begin{Bmatrix} 76 & 76.879 & 76.950 & 118.382 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$3.197 \times 10^{-9}$ ( $3.808 \times 10^{-10}$ )	(27.531, -0.658, 4.374, -0.728)	A.14d	$\triangle$	1487
(11)	$\begin{Bmatrix} 79.235 & 94.878 & 110.173 & 150 \\ 0.000 & 1.000 & 0.000 & 0.000 \end{Bmatrix}$	$1.808 \times 10^{-91}$ ( $1.534 \times 10^{-92}$ )	(473.842, -9.458, 4.621, -0.364)	A.14e	$\triangle$	1436
(12)	$\begin{Bmatrix} 104.273 & 113.865 & 130.105 & 150 \\ 0.982 & 0.000 & 0.000 & 0.018 \end{Bmatrix}$	$8.222 \times 10^{-8}$ ( $4.220 \times 10^{-8}$ )	(54.974, -7.423, 4.200, -0.586)	A.14f	$\triangle$	6743



## 第五章

# 結論與未來研究方向

### 5.1 研究結論與貢獻

本論文聚焦於可靠度模型下之模型辨識設計問題，與過往以貝氏方法結合抽樣策略為主之方法不同，本文所提出的方法具備更佳之計算效率與可重現性。傳統貝氏策略雖具理論完整性，然而在實務上常因運算時間冗長且結果不穩定而受限。為解決此問題，我們專注於近似設計，並採用文獻中廣泛認可的粒子群優化（PSO）演算法作為我們優化框架的核心。為了更好地適應加速壽命試驗中常見的 Type I 設限數據，我們提出了四個基於散度的設計標準：CKL-、CLW-、CB- 與  $C\chi^2$ -optimal 設計準則，此外，發現到可靠度模型中的變異和離散結構可能取決於應力水準，我們進一步修改了 [Chen et al. \(2020\)](#) 中的 PSO-QN 演算法，允許將應力相關變異設置納入目標函數評估。附錄 B 中提供了詳細的用戶手冊和新 PSO-QN 演算法的配置。在附錄 C 中，我們還使用 Shiny 開發了一個方便使用者使用的應用程式，以更好地描述我們的工作。總體而言，所提出的最佳化方法和改良準則，可為未來可靠度試驗設計提供更穩定且可擴展之演算法解決方案。

數值研究部分首先以重現文獻結果為出發點，驗證本研究所採用方法之可行性。原始文獻透過封閉解形式的目標函數求得最佳設計，而本研究則改以數值積分方式進行，結果顯示兩者所獲得之設計極為接近，證實本方法具備良好之穩定性與正確性。接續模擬則聚焦於本研究核心



——Arrhenius 模型，該模型為可靠度領域中常見之加速壽命模型。在給定真實模型與對立模型之參數數值，並考慮具 Type I 設限資料的情形，分別使用四種所提之散度（CKL、CLW、CB、 $C\chi^2$ ）進行設計搜尋，結果顯示 CKL-optimal 準則於大多數情境中表現最佳。基於此發現，後續數值結果即聚焦於 CKL 散度，並進一步探討對立模型變異數未知、需納入參數估計的情況。最後，本研究亦考量真實世界中變異數可能隨應力改變而非為常數的情境，設計數個具代表性的模擬案例，以初步觀察此類情境下設計演算法的穩定性與挑戰，並指出未來在此方向仍有待深入研究與改良。

綜合本研究之發現，我們成功整合多種散度與數值積分技巧，搭配混合式演算法進行模型辨識設計，提供一套適用於 Type I 設限可靠度資料的穩定設計流程。透過數值結果，我們發現 CKL-optimal 設計在多數情境下展現出良好表現，顯示該測度在可靠度模型辨識中的潛力。

此外，本研究亦首度針對「變異數隨應力變化」的假設提出模型辨識設計架構，此類設定在可靠度領域具高度實務意涵，但過去文獻中幾無系統性探討。雖然初步數值結果尚未獲得理想辨識效果，但已揭示此類問題的理論與計算挑戰，並奠定未來演算法改進與方法延伸的研究基礎。整體而言，本研究除補足既有方法論於高彈性設計應用之不足，亦為探討複雜模型下的可靠度試驗設計提供新視角與實作方向。

## 5.2 未來研究建議

儘管本研究所提出之數值最佳化設計流程已具備可行性與穩定性，實務應用中仍面臨若干挑戰，未來可從以下三方面進行延伸與改進：

首先，在數值積分過程中，若被積函數中包含對數項（如  $\log(1 - F(y))$ ），且於尾端區域機率極小時，容易導致非有限值（Non-finite Values）或數值溢位，進而使積分無法正確計算。未來研究可考慮針對



此類 Type I 設限項的數學形式進行修正，例如使用近似公式取代原始對數寫法，或透過改良積分範圍與策略，以提升數值穩定性與整體計算可靠性。

其次，本研究目前假設內層最佳化問題的目標函數為可微分函數，因此使用 L-BFGS 等梯度式方法進行求解。然而，實際上此類目標函數雖具可微性，但未必處處平滑，可能存在多個局部極值或函數起伏劇烈的情況，導致 L-BFGS 等傳統方法容易陷入非全域解。未來可進一步分析目標函數的結構特性，並評估是否適合引入次梯度法（Subgradient Methods）、非平滑最佳化方法（Nonsmooth Optimization）或啟發式演算法作為替代策略。

最後，本研究中針對模型辨識所採用的設計策略，是在對立模型的參數空間中尋找使散度（如 KL 散度）最小的參數組合，並以此為基礎進行最小最大化設計。然而，目前所求得之參數組合未必為實際上模型差異最小且具代表性的設定，亦可能因估計誤差而導致辨識效能降低。因此，未來可考慮先進行參數層級的最佳化，再據此進行模型辨識設計。舉例而言，可將 CKL-optimal 設計與 D-optimal 設計結合，兼顧模型間可辨識性與參數可估性，以提升整體設計的實務效能與解釋力。



## 參考文獻

- Abd El-Raheem, A. (2020). Optimal design of multiple accelerated life testing for generalized half-normal distribution under type-i censoring. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 368:112539.
- Arrhenius, S. (1889). Über die reaktionsgeschwindigkeit bei der inversion von rohrzucker durch säuren. *Zeitschrift für physikalische Chemie*, 4(1):226–248.
- Atkinson, A. C. and Fedorov, V. (1975a). The design of experiments for discriminating between two rival models. *Biometrika*, 62(1):57–70.
- Atkinson, A. C. and Fedorov, V. V. (1975b). Optimal design: Experiments for discriminating between several models. *Biometrika*, 62(2):289–303.
- Chen, R.-B., Chang, S.-P., Wang, W., Tung, H.-C., and Wong, W. K. (2015). Minimax optimal designs via particle swarm optimization methods. *Statistics and Computing*, 25:975–988.
- Chen, R.-B., Chang, S.-P., Wang, W., and Wong, W. (2011). Optimal experimental designs via particle swarm optimization methods. *Preprint, Department of Mathematics, National Taiwan University*, 3.
- Chen, R.-B., Chen, P.-Y., Hsu, C.-L., and Wong, W. K. (2020). Hybrid algorithms for generating optimal designs for discriminating multiple

- nonlinear models under various error distributional assumptions. *PloS one*, 15(10):e0239864.
- Coles, S., Bawa, J., Trenner, L., and Dorazio, P. (2001). *An introduction to statistical modeling of extreme values*, volume 208. Springer.
- Davis, P. J. and Rabinowitz, P. (2007). *Methods of numerical integration*. Courier Corporation.
- Eberhart, R. and Kennedy, J. (1995). A new optimizer using particle swarm theory. In *MHS'95. Proceedings of the sixth international symposium on micro machine and human science*, pages 39–43. Ieee.
- Guideline, I. et al. (2003). Stability testing of new drug substances and products. *Q1A (R2), current step*, 4(1-24).
- López-Fidalgo, J., Tommasi, C., and Trandafir, P. C. (2007). An optimal experimental design criterion for discriminating between non-normal models. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 69(2):231–242.
- López-Fidalgo, J. and Wong, W. K. (2002). Design issues for the michaelis–menten model. *Journal of Theoretical Biology*, 215(1):1–11.
- Lu, L., Lee, I.-C., and Hong, Y. (2019). Bayesian sequential design based on dual objectives for accelerated life tests. *Statistical Quality Technologies: Theory and Practice*, pages 257–275.
- Lukemire, J., Mandal, A., and Wong, W. K. (2016). Using particle swarm optimization to search for locally  $d$ -optimal designs for mixed factor experiments with binary response. *arXiv preprint arXiv:1602.02187*.
- Nasir, E. A. and Pan, R. (2015). Simulation-based bayesian optimal alt designs for model discrimination. *Reliability Engineering & System Safety*, 134:1–9.

- Newer, H. A., Abd-El-Monem, A., Al-Shbeil, I., Emam, W., and Nower, M. (2024). Optimal test plans for accelerated life tests based on progressive type-i censoring with engineering applications. *Alexandria Engineering Journal*, 87:604–621.
- Pakgozar, A., Habibirad, A., and Yousefzadeh, F. (2019). Lin-wong divergence and relations on type i censored data. *Communications in Statistics-Theory and Methods*, 48(19):4804–4819.
- Park, S. and Shin, M. (2014). Kullback–leibler information of a censored variable and its applications. *Statistics*, 48(4):756–765.
- Pascual, F. G. and Meeker, W. Q. (1997). Analysis of fatigue data with runouts based on a model with nonconstant standard deviation and a fatigue limit parameter. *Journal of testing and evaluation*, 25(3):292–301.
- Shannon, C. E. (1948). A mathematical theory of communication. *The Bell system technical journal*, 27(3):379–423.
- Silvey, S. (2013). *Optimal design: an introduction to the theory for parameter estimation*, volume 1. Springer Science & Business Media.
- Stoer, J., Bulirsch, R., Bartels, R., Gautschi, W., and Witzgall, C. (1980). *Introduction to numerical analysis*, volume 1993. Springer.
- Uddin, K., Jackson, T., Widanage, W. D., Chouchelamane, G., Jennings, P. A., and Marco, J. (2017). On the possibility of extending the life-time of lithium-ion batteries through optimal v2g facilitated by an integrated vehicle and smart-grid system. *Energy*, 133:710–722.
- Walsh, S. J. and Borkowski, J. J. (2022). Fast computation of highly g-optimal exact designs via particle swarm optimization. *arXiv preprint arXiv:2206.06498*.



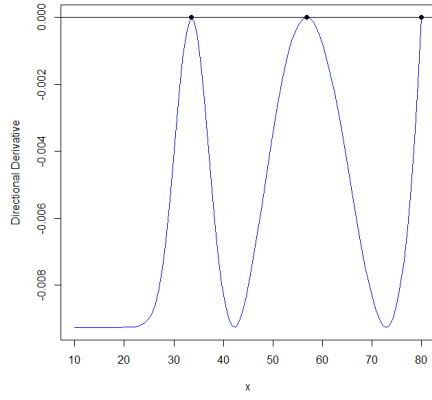
## 附錄 A

### 模型辨識設計結果之方向導數圖

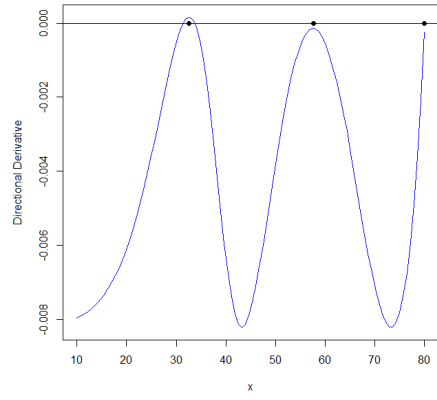
本節展示了與 4.2 和 4.3.2 中討論的模型辨識設計相對應的方向導數圖，這些圖用於驗證所提出的設計是否滿足等價定理的最佳性條件。根據理論準則，最佳化設計必須確保方向導數在整個設計區域中保持小於或等於零，並且支撐點與方向導數的局部最大值對齊，每個點的值都為零。

所呈現的圖可依情境分為兩類。第一個場景來自 4.2 部分，假設兩個模型都有固定的標準差，並探索了四種散度 (CKL、CLW、CB 和  $C\chi^2$ )，對應結果彙整於表 4.1 到 4.8 中。第二種情況來自第 4.3.2 節，考慮了應力與變異相依的結構下之 CKL-optimal 設計，對應結果彙整於表 4.12 所示。

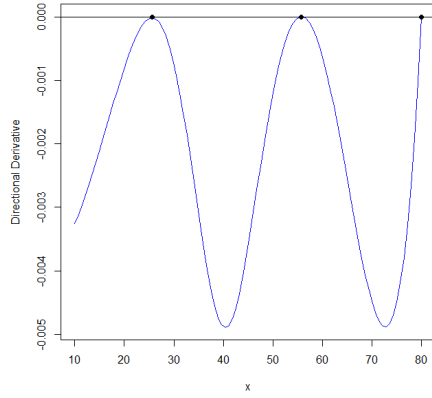
透過這些方向導數圖，可有效判別所提出設計在數值計算上是否穩定、在理論上是否符合最佳性條件，進而作為設計可行性與可信度的重要視覺佐證。這對於具設限資料與高維模型設定的實務應用而言，具有極高的參考價值與驗證意義。



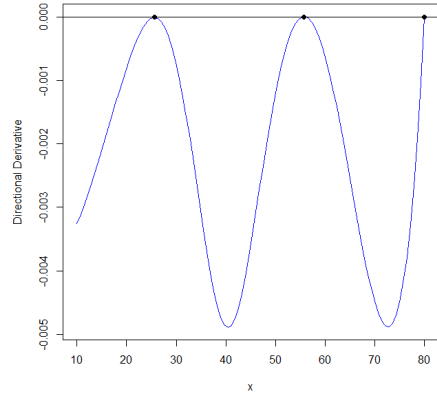
(a)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98$  (LN)



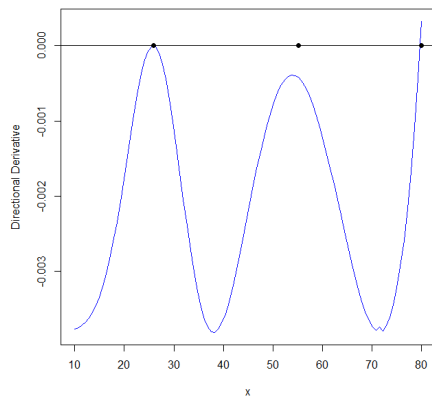
(b)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98$  (Weibull)



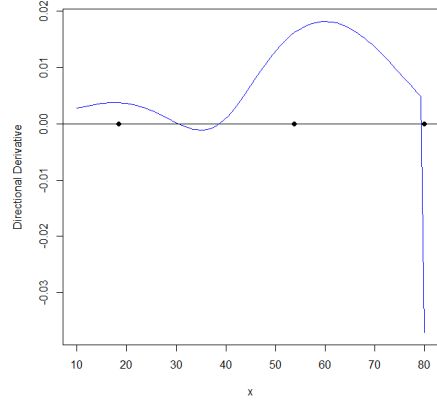
(c)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48$  (LN)



(d)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48$  (Weibull)



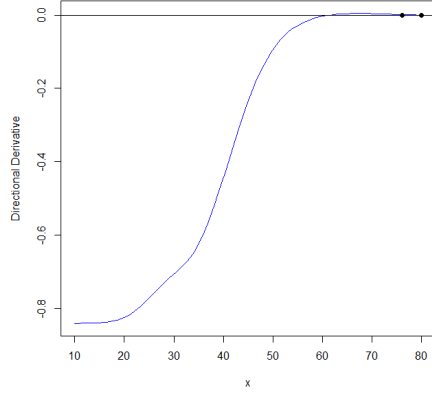
(e)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98$  (LN)



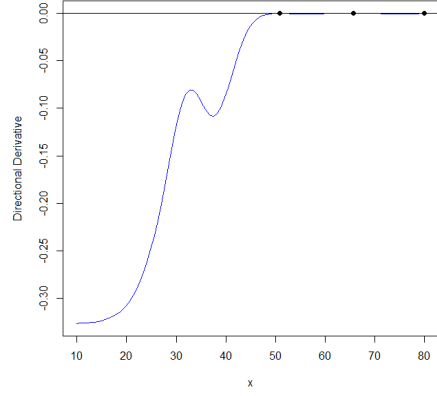
(f)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98$  (Weibull)

圖 A.1: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.1。

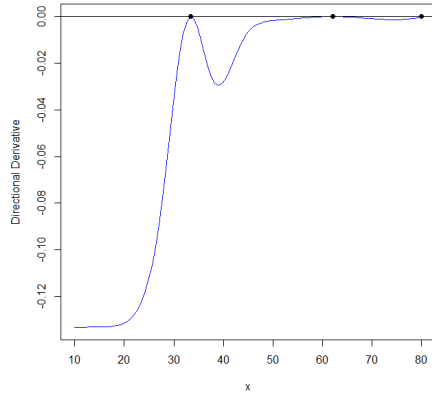




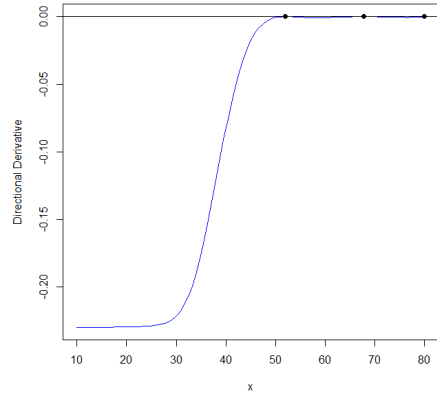
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



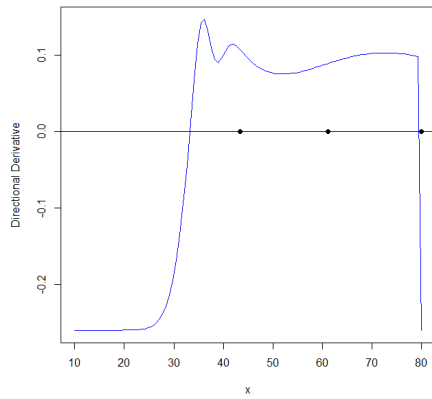
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



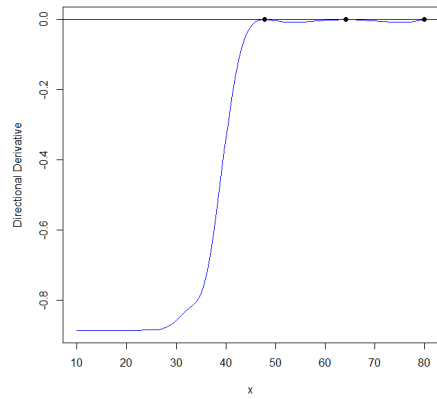
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

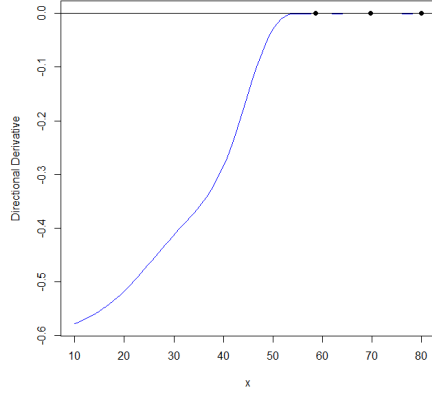


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

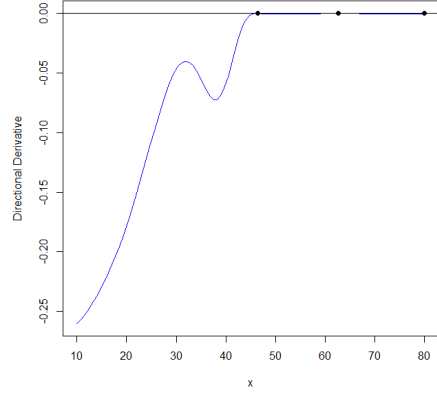


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

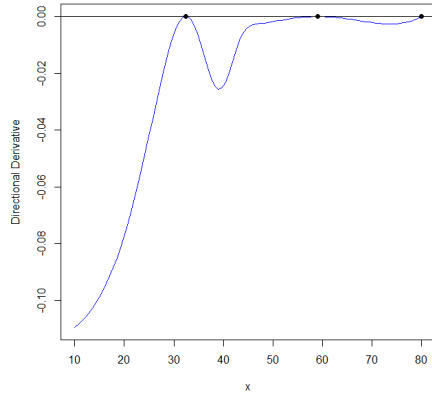
圖 A.2: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.2。



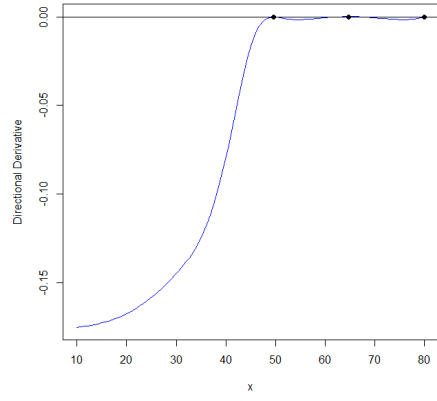
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



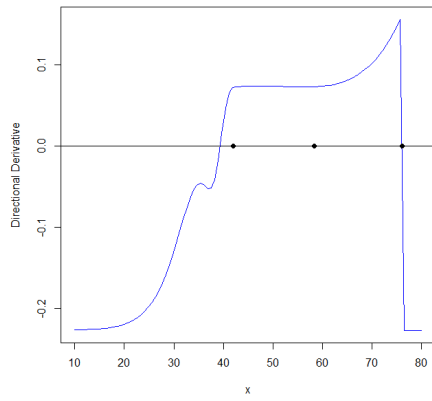
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



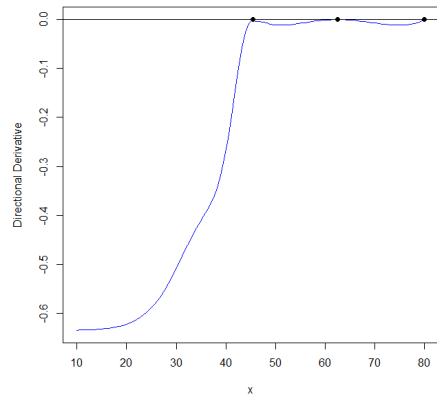
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

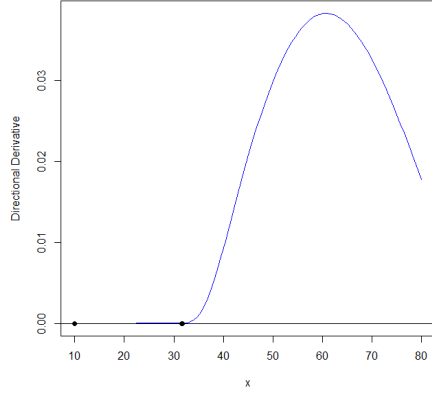


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

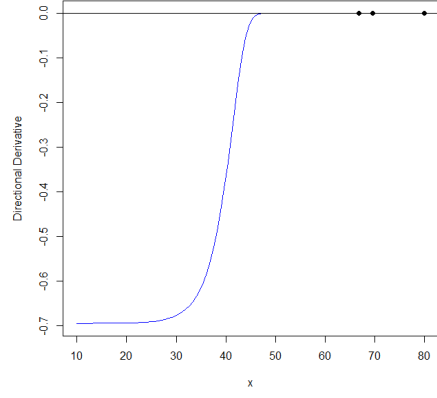


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

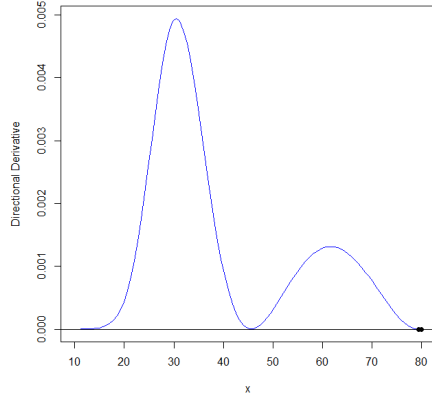
圖 A.3: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之韋伯分佈情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.2。



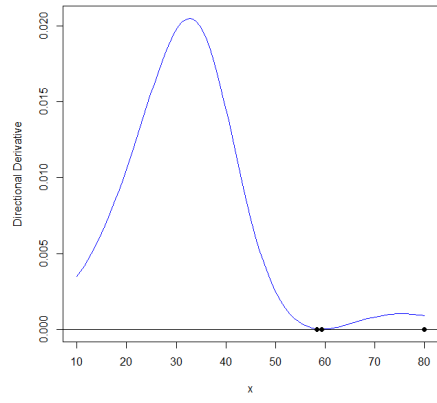
(a)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98(\text{LN})$



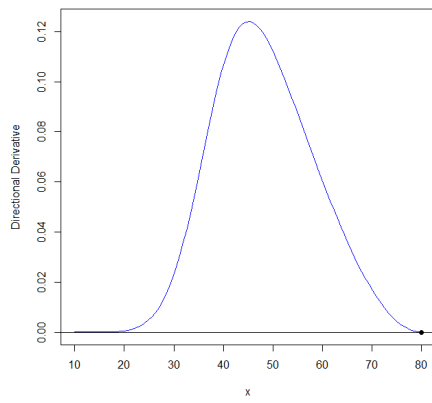
(b)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98(\text{Weibull})$



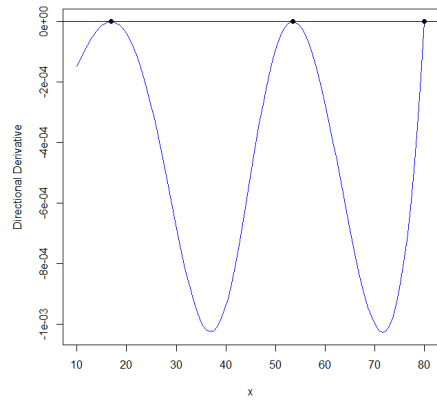
(c)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48(\text{LN})$



(d)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48(\text{Weibull})$

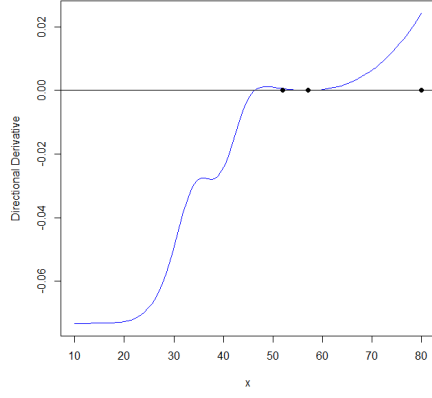


(e)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98(\text{LN})$

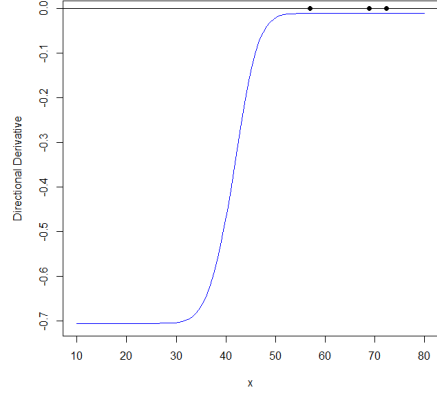


(f)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98(\text{Weibull})$

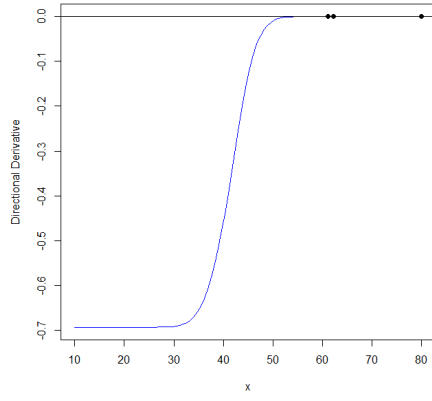
圖 A.4: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之  $\xi_{CLW}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.3。



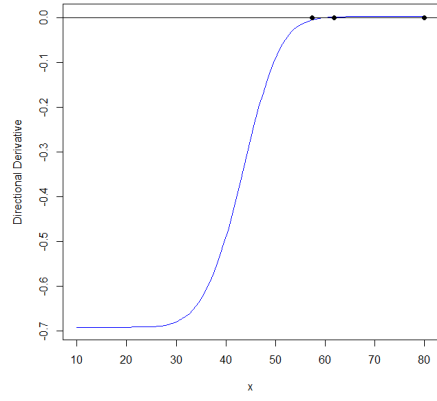
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



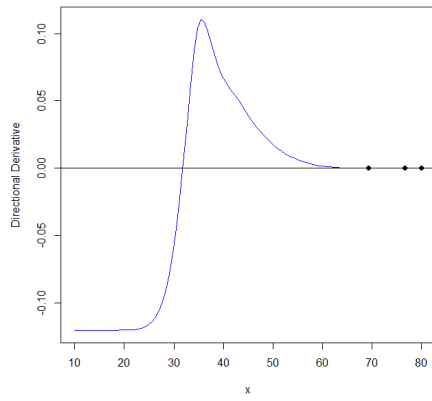
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



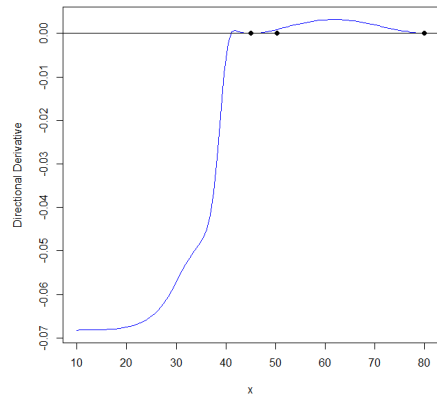
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

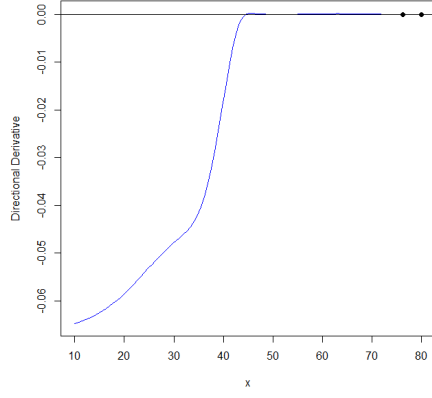


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

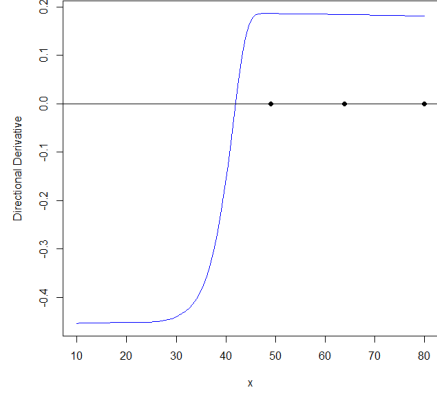


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

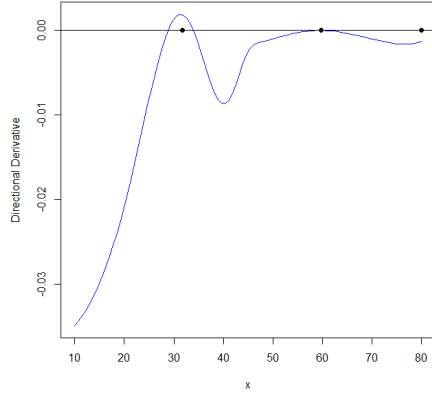
圖 A.5: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之  $\xi_{CLW}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.4。



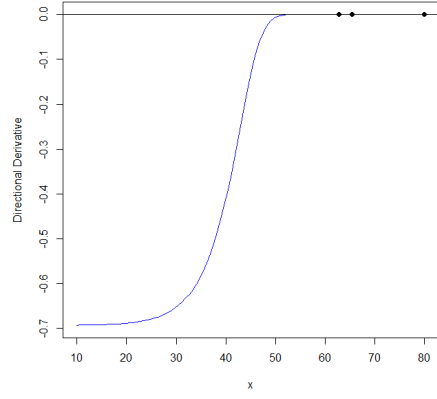
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



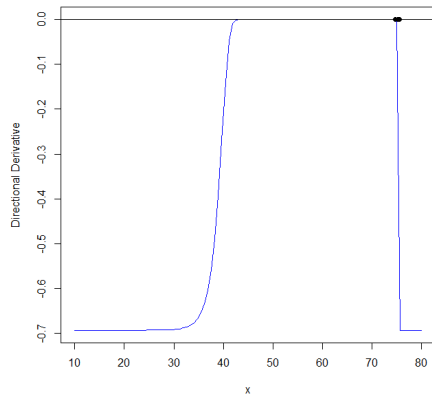
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



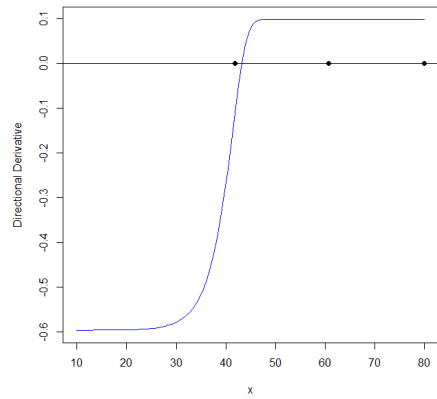
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

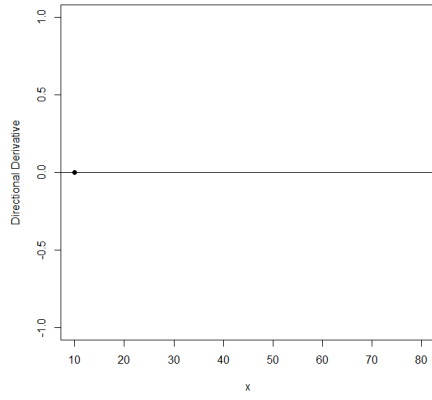


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

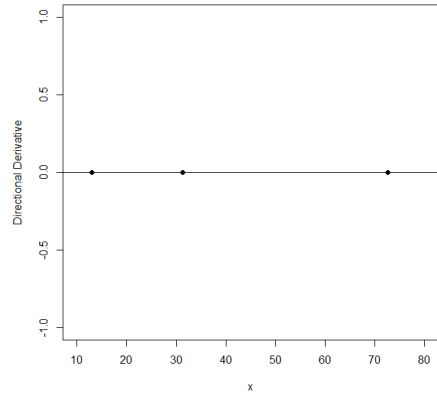


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

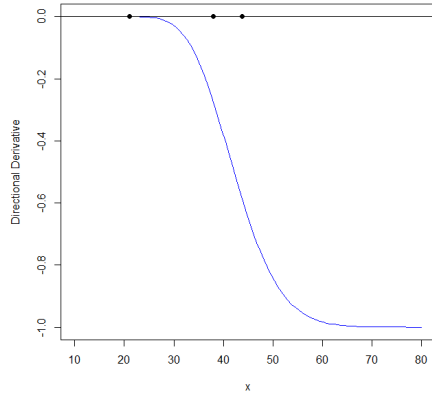
圖 A.6: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之  $\xi_{CLW}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.4。



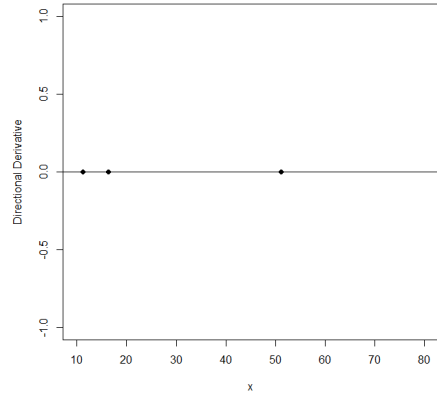
(a)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98(\text{LN})$



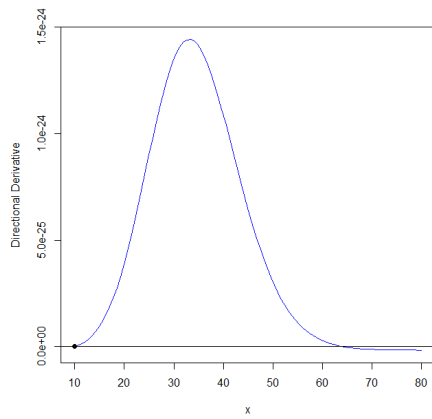
(b)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98(\text{Weibull})$



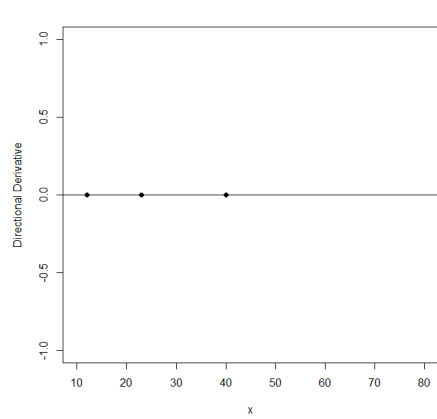
(c)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48(\text{LN})$



(d)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48(\text{Weibull})$

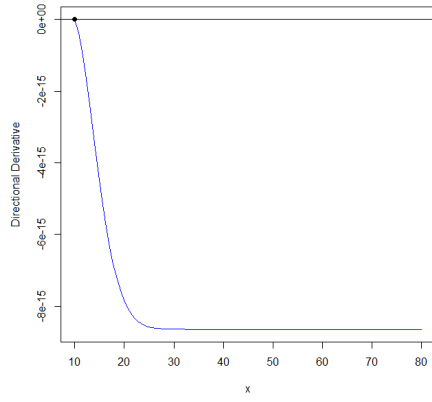


(e)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98(\text{LN})$

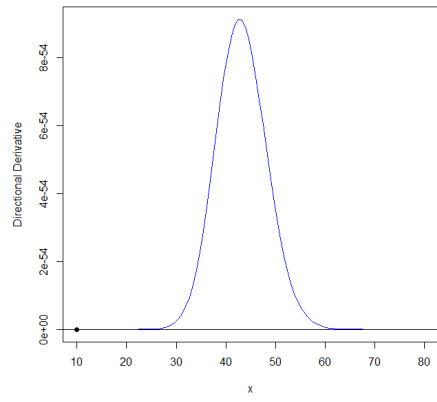


(f)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98(\text{Weibull})$

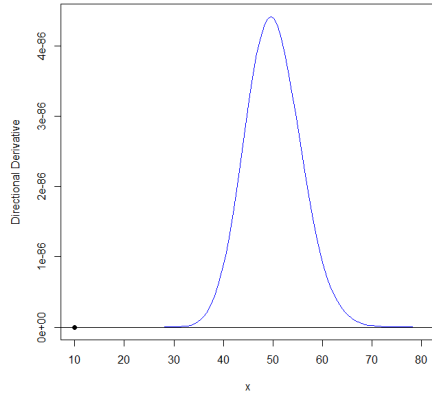
圖 A.7: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之  $\xi_{CB}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.5。



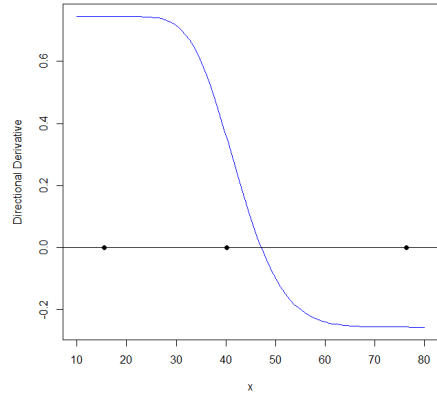
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



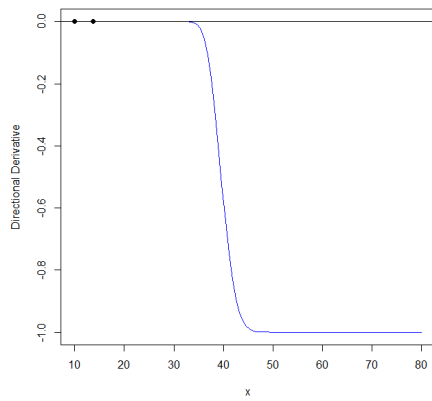
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



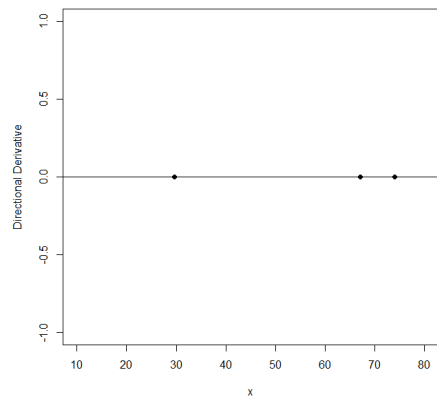
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

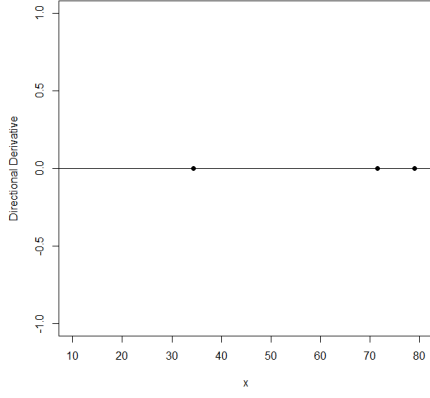


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

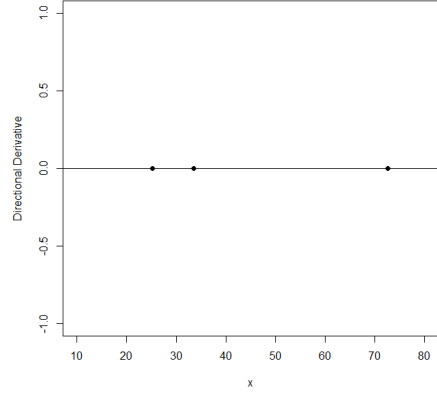


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

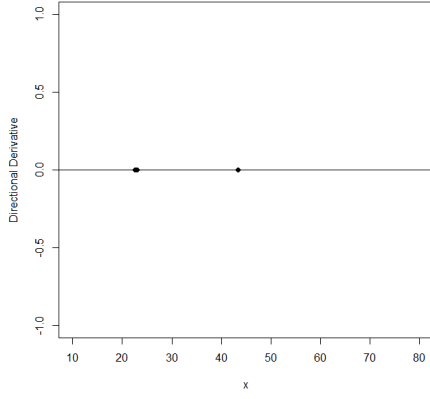
圖 A.8: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之  $\xi_{CB}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.6。



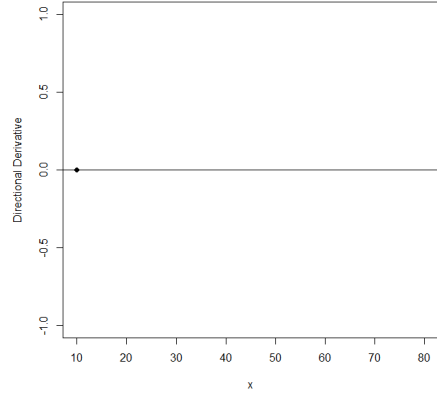
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



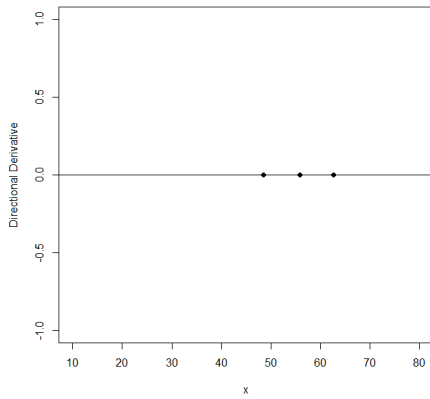
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



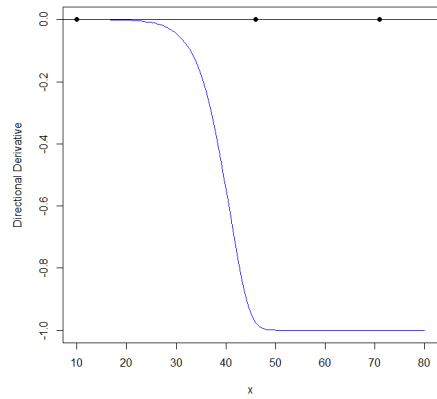
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$



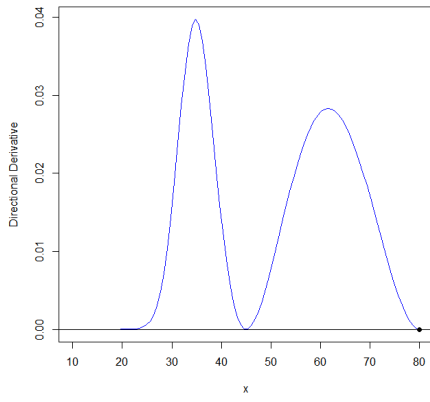
(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$



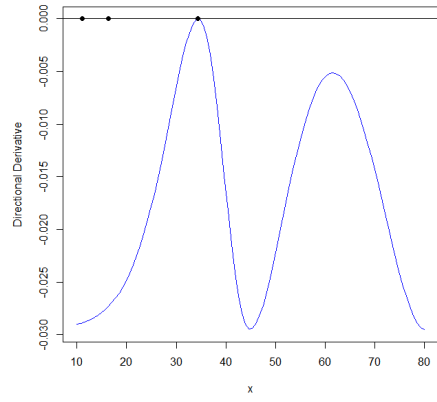
(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

圖 A.9: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數韋伯分佈情境，所產生之  $\xi_{CB}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.6。

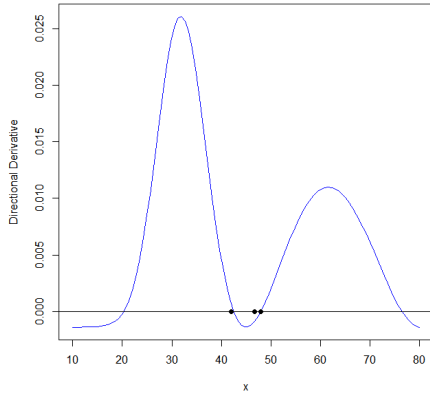




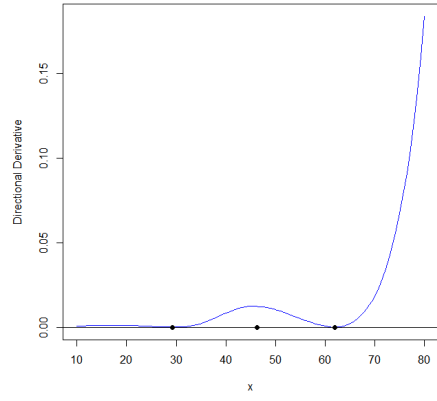
(a)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98(\text{LN})$



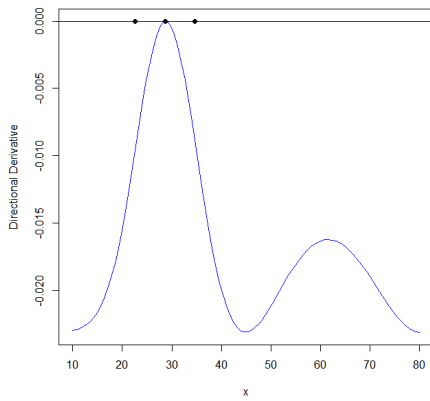
(b)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.98(\text{Weibull})$



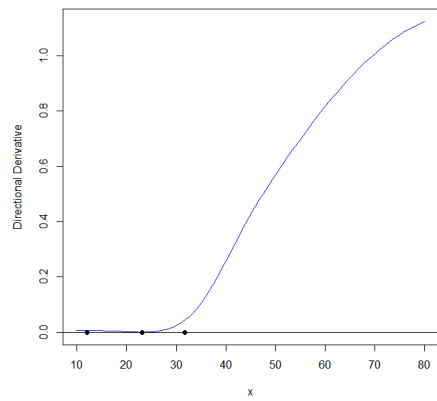
(c)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48(\text{LN})$



(d)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.48(\text{Weibull})$

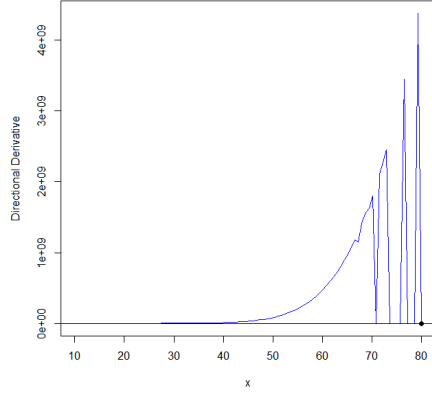


(e)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98(\text{LN})$

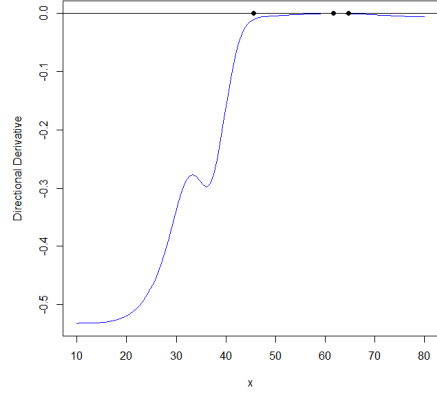


(f)  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1.98(\text{Weibull})$

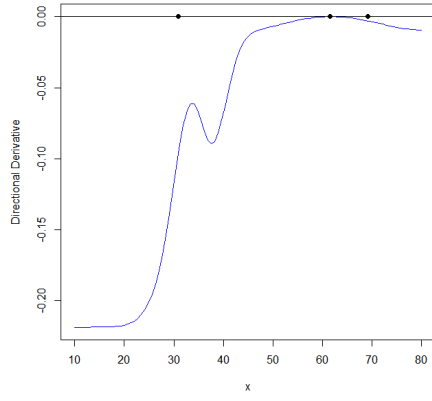
圖 A.10: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數相同之情境，所產生之  $\xi_{C\chi^2}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.7。



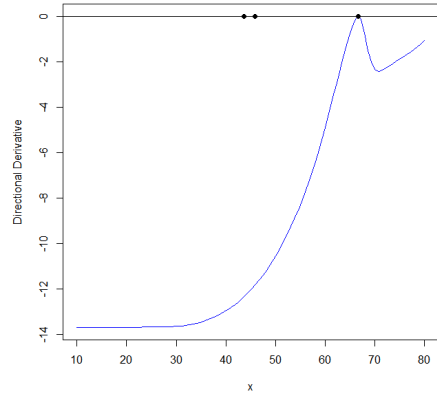
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



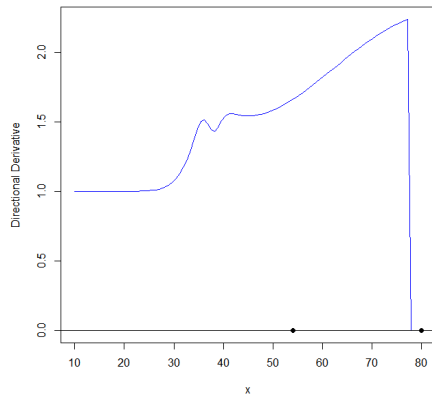
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



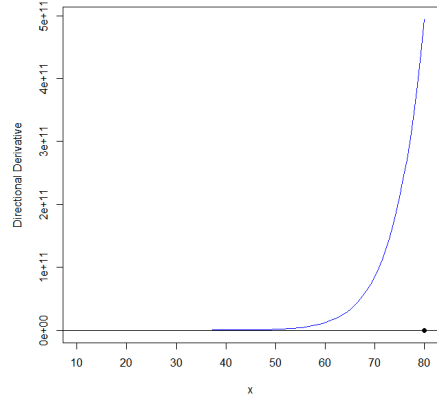
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

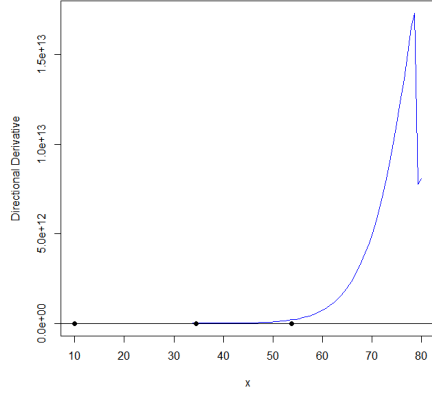


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

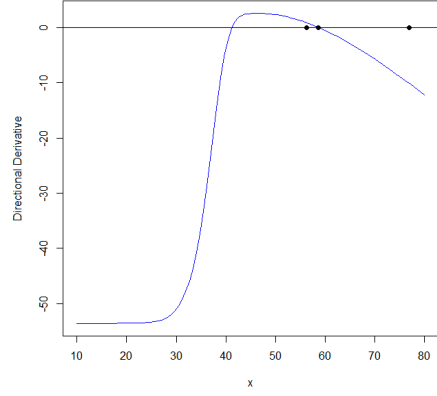


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

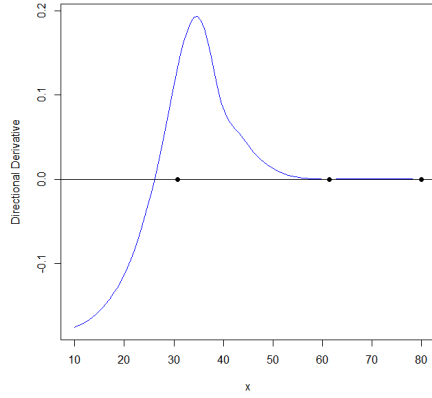
圖 A.11: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之對數常態分佈情境，所產生之  $\xi_{C\chi^2}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.8。



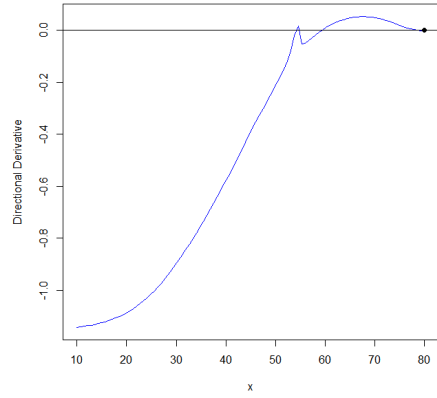
(a)  $\sigma_1 = 1.98, \sigma_2 = 0.98$



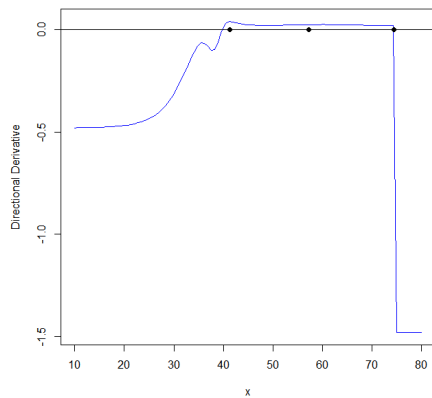
(b)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.98$



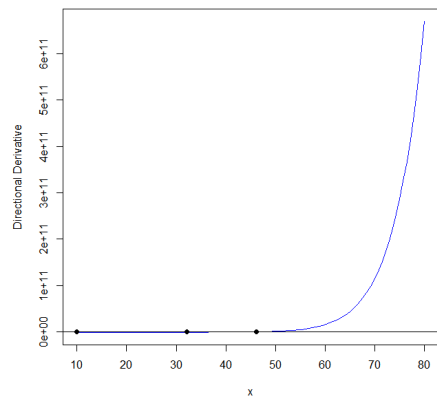
(c)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 1.48$



(d)  $\sigma_1 = 1.48, \sigma_2 = 0.98$

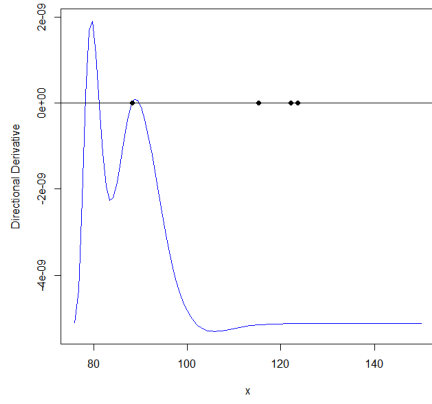


(e)  $\sigma_1 = 0.48, \sigma_2 = 0.98$

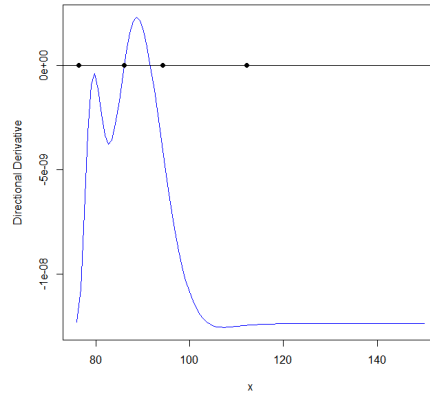


(f)  $\sigma_1 = 0.98, \sigma_2 = 0.48$

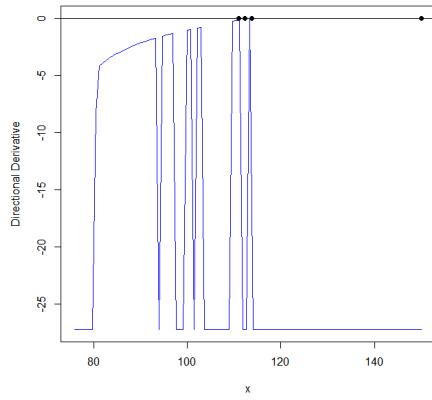
圖 A.12: 針對平均反應函數為二次與線性模型且變異數不同之韋伯分佈情境，所產生之  $\xi_{C\chi^2}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.8。



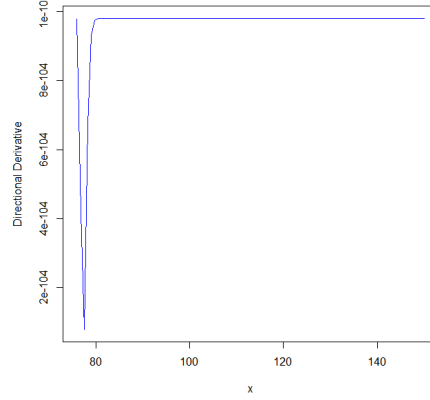
(a) Meeker Case (1)



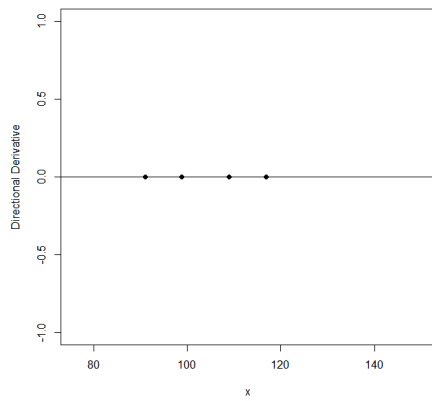
(b) Meeker Case (2)



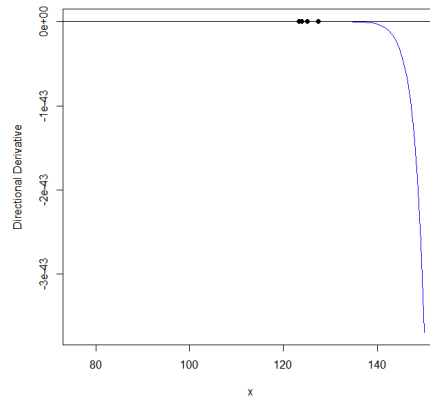
(c) Meeker Case (3)



(d) Meeker Case (4)

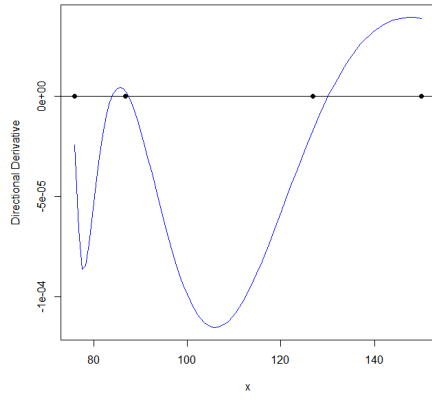


(e) Meeker Case (5)

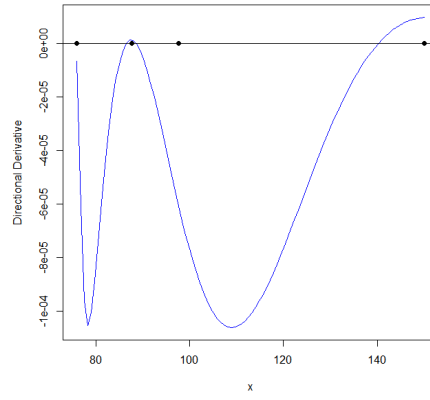


(f) Meeker Case (6)

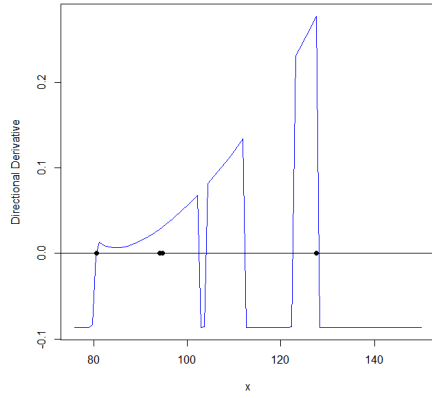
圖 A.13: 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依、假設真實模型為對數常態分佈之情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.12。



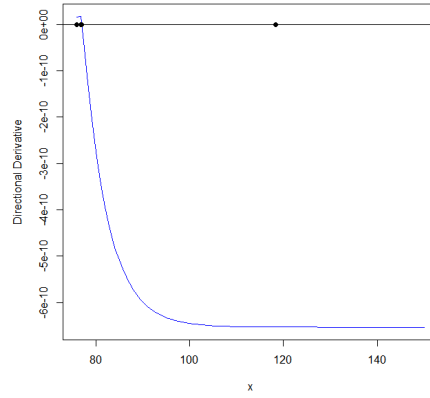
(a) Meeker Case (7)



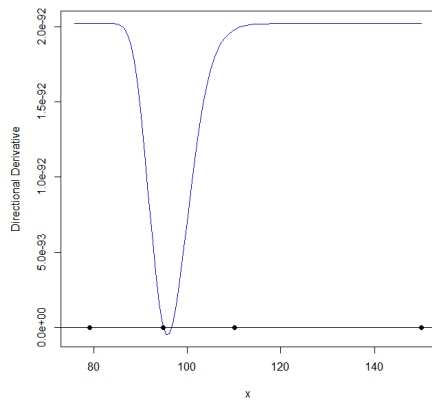
(b) Meeker Case (8)



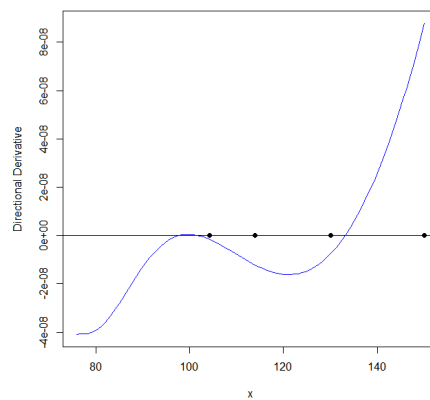
(c) Meeker Case (9)



(d) Meeker Case (10)



(e) Meeker Case (11)



(f) Meeker Case (12)

圖 A.14: 針對 Meeker 案例中平均反應函數相同且變異數與應力相依、假設真實模型為韋伯分佈之情境，所產生之  $\xi_{CKL}^*$  設計的方向導數圖。相關結果列於表 4.12。



## 附錄 B

### R 實作範例說明

本研究所使用的程式碼已上傳至 [GitHub/GPLIN514](https://github.com/GPLIN514)，供讀者查閱與重現。本節附錄將說明其中一組範例程式碼的架構與使用方式，該範例用於模擬並搜尋 Arrhenius 模型下的 CKL-optimal 設計。

下方程式碼定義了真實模型與競爭模型在 Arrhenius 假設下的平均反應函數（Mean Response Function）與變異結構（Dispersion Function）：

程式碼 B.1: 模型結構設定

```
af1_mean <- function(x, p) p[1] + p[2] * (11605/(x+273.15)) + p[3] *  
  (11605/(x+273.15))^2  
af2_mean <- function(x, p) p[1] + p[2] * (11605/(x+273.15))  
af1_disp <- function(x, p) rep(p[1], length(x))  
af2_disp <- function(x, p) rep(p[1], length(x))
```

在此設計架構中：

- 真實模型  $M_1$  採用二次形式之 Arrhenius 模型，其對應之平均反應函數為：

$$\eta_{tr}(x, \theta_1) = \zeta_1 + \zeta_2 x + \zeta_3 x^2$$

- 競爭模型  $M_2$  採用簡化線性形式，其平均反應函數為：

$$\eta_2(x, \theta_2) = \delta_1 + \delta_2 x$$

兩個模型皆假設變異數為常數，且不隨應力水準改變，這樣的設定體現在 `af1_disp_Arrhenius` 與 `af2_disp_Arrhenius` 函數中，並作為後續 KL 散度計算與最佳化設計的基礎架構。

在搜尋 CKL 最小最大 (max-min) 最佳設計之前，須先建立真實模型  $\eta_{tr}(x, \theta_1)$  與競爭模型  $\eta_2(x, \theta_2)$  的結構，並指定競爭模型參數的搜尋空間。需特別注意，競爭模型的參數空間必須為有限範圍，使用者可根據先驗知識，或根據預期 KL 散度最小值可能出現的區域進行設置。若希望競爭模型的變異數為固定值，則可將其上下界設定為相同，即可達到不進行搜尋的效果。以下程式碼展示了相關設定方式。

程式碼 B.2: 設定模型參數

```
# Set the nominal values for the true model
af1_para <- c(-5, -1.5, 0.05)
model_info <- list(
  # The first list should be the true model and the specified nominal
  # values
  list(mean = af1_mean, disp = af1_disp, meanPara = af1_para, dispPara =
    0.9780103),
  # Then the rival models are listed accordingly. We also need to
  # specify the model space.
  list(mean = af2_mean, disp = af2_disp,
    meanParaLower = c(-100, 0.1), meanParaUpper = c(-10, 5),
    dispParaLower = c(0.9780103), dispParaUpper = c(0.9780103) )
)
```

在進行 CKL-optimal 設計時，需明確定義散度的計算方式。本範例中使用的距離測度係根據公式 (3.8) 所定義的 Kullback-Leibler 散度，其計算可分為兩個部分：一為針對未設限資料 (Observed Data) 的積分計算；另一則為針對在設限時間  $t_c = 5000$  下的 Type I 設限資料所做之補充調整。

於實作上，我們透過 R 語言定義以下三個函數：`kl_lnl_n_observed` 負責計算觀測資料下的積分項，`kl_lnl_n_censored` 處理 Type I 設限情況下的調整項，而 `kldiv_lnl_n_censored5000` 則整合上述兩部分，計算整體的 KL 散度。此架構能兼顧設限與未設限資料的貢獻，使散度評估更為全面。相關程式碼如下所示。



### 程式碼 B.3: 定義 KL 散度函數

```
# xt is the mean values of the true model
# xr is the mean values of the rival model

kl_lnl_n_observed <- function(y, m1, m2, s1, s2) {
  lpdf1 <- dlnorm(y, m1, s1, log = TRUE)
  lpdf2 <- dlnorm(y, m2, s2, log = TRUE)
  pdf1 <- exp(lpdf1)
  val <- pdf1*(lpdf1 - lpdf2)
  return(val)
}

kl_lnl_n_censored <- function(y, m1, m2, s1, s2) {
  lcdf1 <- log(1 - plnorm(y, m1, s1) + 1e-12)
  lcdf2 <- log(1 - plnorm(y, m2, s2) + 1e-12)
  cdf1 <- exp(lcdf1)
  val <- cdf1*(lcdf1 - lcdf2)
  return(val)
}

kldiv_lnl_n_censored5000 <- function(xt, xr, st, sr) {
  tc <- 5000
  intVec <- rep(0, length(xt))
  for (i in 1:length(xt)) {
    intg_part <- integrate(kl_lnl_n_observed, 0, tc,
                          m1 = xt[i], m2 = xr[i],
                          s1 = st[i], s2 = sr[i],
                          subdivisions = 100,
                          stop.on.error = FALSE)$value
    cens_part <- kl_lnl_n_censored(tc, m1 = xt[i], m2 = xr[i],
                                   s1 = st[i], s2 = sr[i])
    intVec[i] <- intg_part + cens_part
  }
  return(intVec)
}
```

在本範例中，我們使用 DiscrimOD 軟體套件來進行最佳化實驗設計之搜尋。由於 DiscrimOD 套件目前仍處於 alpha 測試階段，僅開放給開發團隊使用，因此需採用特定安裝方式。在安裝 DiscrimOD 之前，請確保使用 R 軟體版本為 3.4.0，並先安裝 devtools 套件。此外，DiscrimOD 亦仰賴 Rcpp 與 RcppArmadillo 等套件，請一併安裝。完成上述步驟後，即可透過 `devtools::install_github()` 指令，從 Ping-Yang Chen 的 GitHub 倉庫安裝 DiscrimOD 套件。R 程式碼如下所示：

### 程式碼 B.4: 安裝 DiscrimOD 套件

```
install.packages(c("devtools", "Rcpp", "RcppArmadillo"))
devtools::install_github("PingYangChen/DiscrimOD")
```

套件安裝完成後，請使用 `library()` 指令載入 DiscrimOD 以便後續使用：

程式碼 B.5: 載入 DiscrimOD 套件

```
library(DiscrimOD)
```

DiscrimOD 包中的搜索最佳辨識設計演算法涉及兩種類型的演算法，PSO 和 L-BFGS。PSO 及 L-BFGS 設定是通過 `getPSOInfo()` 函數定義的。我們在下面列出了 PSO 最有影響力的調整參數：

- `nSupp`：粒子群的大小。通常我們會設置 32 或 64 個粒子。
- `dsRange`：最大反覆運算次數。
- `IF_INNER_LBFGS`：布林值參數（TRUE/FALSE），用來開啟或關閉內部最佳化問題中使用 L-BFGS 演算法的選項（即在參數空間中進行距離最小化）。若設定為 `IF_INNER_LBFGS = FALSE`，則 DiscrimOD 套件將改為使用 [Chen et al. \(2015\)](#) 提出的 NestedPSO 演算法進行求解。
- `LBFGS_RETRY`：L-BFGS 演算法的最大迭代次數。為避免因初始向量不佳而導致演算法失敗，通常建議可設定為重複執行 2 至 3 次。然而，在本研究的模擬過程中，觀察到標準值  $C^*$  與將該設計與參數重新代入計算所得的  $\hat{C}$  出現不一致的情況，推測可能是內部 L-BFGS 計算不穩定所致。因此，為提升穩定性與可信度，本研究統一將重試次數設定為 50 次。

以下程式碼為本範例中所使用之演算法設定：對於進行兩模型辨識設計的 PSO-QN 演算法，我們設定使用 64 個粒子與 200 次疊代；而內部迴圈中每次執行則重複使用 L-BFGS 演算法 50 次。其餘所有參數則皆採用預設值。

#### 程式碼 B.6: 設定演算法參數 ( PSO 與 L-BFGS )

```
PSO_INFO <- getPSOInfo(nSwarm = 64, maxIter = 200)
LBFGS_INFO <- getLBFGSInfo(LBFGS_RETRY = 50)
```

補充說明：雖然本研究範例主要採用 L-BFGS 作為內部最佳化方法，但 DiscrimOD 套件亦提供以 PSO ( 粒子群演算法 ) 處理內層最佳化問題的選項，稱為 NestedPSO 演算法 ( Chen et al., 2015 )。設定 NestedPSO 時，使用者需在 getPSOInfo() 函數中，對每個參數提供長度為 2 的向量，第一個數值代表外層 PSO 迴圈的設定，第二個則為內層 PSO 的設定。例如，以下程式碼即表示外層使用 64 個粒子、迭代 200 次，內層則為 32 粒子、迭代 100 次。此外，使用 NestedPSO 時必須關閉內部 L-BFGS 演算法，可透過將 IF\_INNER\_LBFGS = FALSE 設定於 getLBFGSInfo() 函數中達成。以下為完整設定範例 ( 本範例未實際使用，僅供展示 )：

#### 程式碼 B.7: NestedPSO 的替代設定

```
# Set NestedPSO options. The length of setting indicates the number of
  loops
NESTEDPSO_INFO <- getPSOInfo(nSwarm = c(64, 32), maxIter = c(200, 100))
# Turn off L-BFGS implementation for the inner optimization loop
LBFGS_NOTRUN <- getLBFGSInfo(IF_INNER_LBFGS = FALSE)
```

接下來，我們使用 DiscrimOD() 函數並呼叫 PSO-QN 演算法來尋找 CKL-最佳化設計，以進行兩模型間的成對模型辨識。在本範例中，以真實模型  $\eta_{tr}(x, \theta_1)$  與競爭模型  $\eta_2(x, \theta_2)$  作為說明。

除了指定模型清單 ( Model List )、散度函數 ( Divergence Function ) 以及演算法設定之外，還需額外指定成對辨識的準則類型，可透過參數 crit\_type = "pair\_fixed\_true" 設定。另外，我們也需設定支持點的數量 ( 本例中設為 nSupp = 3 )，以及設計空間的上下界，分別為 dsLower = 10 與 dsUpper = 80。

#### 程式碼 B.8: 執行 DiscrimOD 以獲得最佳設計

```
nSupp <- 3
dsRange <- c(10, 80)
```

```
res <- DiscrimOD(MODEL_INFO = model_info, DISTANCE = kldiv_lnl_n_
  censored5000,
  nSupp = nSupp, dsLower = dsRange[1], dsUpper = dsRange
    [2],
  crit_type = "pair_fixed_true",
  PSO_INFO = PSO_INFO, LBFGS_INFO = LBFGS_INFO,
  seed = 100, verbose = TRUE)
```

完成最佳化設計的搜尋後，DiscrimOD() 函數會輸出一個包含四個欄位的清單，其中最主要的三個欄位分別為：

- 最佳設計點與權重 (\$BESTDESIGN)：

該欄位儲存粒子群最佳化演算法 (PSO-QN) 所找到的最終設計，其為一個矩陣，第一欄為設計點 (Support Points)，第二欄為各點對應的權重。以下為查詢指令：

程式碼 B.9: 最佳設計點與對應權重

```
round(res$BESTDESIGN, 3)
```

輸出結果如：

程式碼 B.10: 最佳設計點與對應權重的結果

```
dim_1 weight
obs_1 29.367 0.393
obs_2 62.788 0.359
obs_3 80.000 0.249
```

- 最佳設計之準則值 (\$BESTVAL)：

該值代表在此設計下所對應的 KL 散度準則值，亦即最小散度值，通常用於評估設計之優劣。查詢指令如下：

程式碼 B.11: 最佳設計之 KL 散度標準值

```
res$BESTVAL
```

輸出結果如：

程式碼 B.12: 最佳設計之 KL 散度標準值的結果

```
[1] 0.002786092
```

- 計算時間 ( \$CPUTIME ):

此欄位回傳整體計算過程所花費的秒數，方便後續效率分析與演算法比較：

程式碼 B.13: 演算法總運行時間

```
res$CPUTIME
```

輸出結果如：

程式碼 B.14: 演算法總運行時間的結果

```
elapsed  
67920.7
```

為了進一步檢視所求得之設計的準確性與穩定性，本研究亦使用 `designCriterion()` 函數重新計算該設計在指定模型與參數條件下的準則值，並同時取得對立模型參數的搜尋結果。

此函數可輸入設計結果（如 `res$BESTDESIGN`）、模型設定（`MODEL_INFO`）、散度函數（如本例中的 `kldiv_lnlncensored5000`），並指定設計空間範圍、準則型態（例如 `"pair_fixed_true"`），以及最佳化演算法的設定資訊（`PSO_INFO` 與 `LBFSGS_INFO`）。

函數輸出包含兩部分：

- `$cri_val`：代表以所選設計與模型參數重新計算所得的準則值  $\hat{C}$ ，可用來與原本最佳化過程所得之  $C^*$  作比較，檢驗是否一致。
- `$theta2`：表示在此設計下，由演算法所搜尋的對立模型參數值，包含兩組模型的參數向量（其中真實模型通常為固定值）。

此步驟能有效驗證數值最佳化過程的穩定性，特別是內部參數搜尋是否產生誤差，進而導致準則值不一致的情況。查詢指令如下：

程式碼 B.15: 驗證設計的穩定性與參數搜尋

```
designCriterion(res$BESTDESIGN, MODEL_INFO = model_info,  
  DISTANCE = kldiv_lnlncensored5000,  
  dsLower = dsRange[1], dsUpper = dsRange[2],  
  crit_type = "pair_fixed_true", MaxMinStdVals = NULL,
```

```
PSO_INFO = PSO_INFO, LBFGS_INFO = LBFGS_INFO)
```

輸出結果如：

程式碼 B.16: 驗證設計穩定性與參數搜尋的結果

```
$cri_val
[1] 0.009265599

$theta2
      [,1] [,2] [,3] [,4]
model_1 -5.00000 -1.50000 0.0500000 0.9780103
model_2 -66.71046 2.016919 0.9780103 0.0000000
```

為驗證所得到的設計是否為最佳設計，可透過等價定理（equivalence theorem）進行檢查。在 DiscrimOD 套件中，我們可使用 equivalence 函數來執行此驗證程序。該函數需輸入由 DiscrimOD 函數所產生的數值結果物件 res。根據該數值結果，equivalence 函數會計算方向導數函數（directional derivative function）在一組長度為 ngrid 的設計空間網格點上的值。使用 R 的內建繪圖函數 plot，即可繪製該函數的變化曲線。其中， $x$  軸為設計空間的網格點向量，對應儲存在 \$Grid\_1 欄位中； $y$  軸則為方向導數函數的值，儲存在 \$DirDeriv 欄位中。

我們亦可透過 points 函數，將設計中的支持點（support points）標示於曲線上。為增進視覺效果，圖中常會繪製一條  $y = 0$  的水平線，藉此檢視方向導數是否滿足 CKL-最佳設計的條件。具體而言：若方向導數在整個設計空間上皆小於零，且在支持點位置等於（或極接近）零，則可視為該設計符合 CKL-最佳化的充分條件。

程式碼 B.17: 等價定理與圖形驗證最佳性

```
eqv <- equivalence(ngrid = 100, PSO_RESULT = res,
  MODEL_INFO = model_info,
  DISTANCE = kldiv_lnl_n_censored5000,
  dsLower = dsRange[1], dsUpper = dsRange[2],
  crit_type = "pair_fixed_true",
  PSO_INFO = PSO_INFO, LBFGS_INFO = LBFGS_INFO)
# Draw the directional derivative curve
plot(eqv$Grid_1, eqv_Arrhenius$DirDeriv, type = "l",
  col = "blue", main = "",
  xlab = "x", ylab = "Directional_Derivative"); abline(h = 0)
points(res$BESTDESIGN[,1], rep(0, nrow(res$BESTDESIGN)), pch = 16)
```

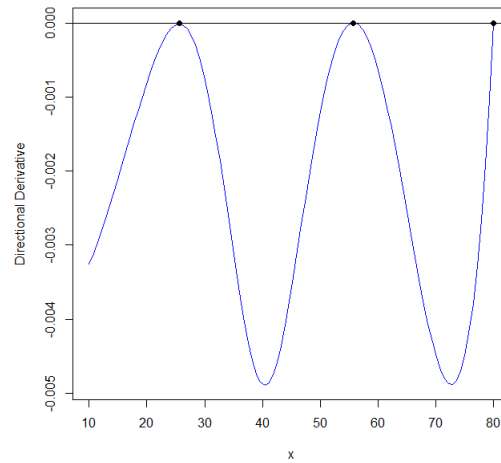


圖 B.1: 由程式碼範例產生的方向導數圖以驗證設計最佳性

透過上述程式碼與圖形，我們不僅可視化確認所獲得的設計是否為最佳設計，亦可觀察支持點是否對應於導數為零的位置。此等程序對於驗證設計正確性與數值穩定性具有關鍵作用，進而提升模型辨識之可靠性。





## 附錄 C

# Shiny 介面展示與功能說明

本附錄介紹本研究所開發之 R Shiny 使用者介面，該介面旨在提供一個互動式的平台，使使用者能夠依據不同的模型辨識情境進行設計條件設定、演算法執行與結果解析。介面的設計邏輯與前文各章節所討論之模擬情境相互對應，使用者可根據需求靈活調整各項設定參數，以進行多樣化的模型辨識設計分析。

該介面提供直覺式操作流程，支援多種核心功能設定，包括散度衡量方法、模型分佈假設、參數設定範圍與演算法細節等，協助使用者有效地建構與評估實驗設計。此外，介面亦整合近似設計輸出、準則值、運算時間、參數搜尋與方向導數圖等資訊，方便進一步判斷所產生設計的最佳性。

本研究所使用之 Shiny 應用程式的完整原始碼已公開於 GitHub：[GitHub/GPLIN514](https://github.com/MSGPLIN)。此外，亦提供線上版本，無需安裝即可直接體驗互動介面，網址如下：[shinyapps.io/MSGPLIN](https://shinyapps.io/MSGPLIN)。

以下將逐一介紹介面中各主要功能模組，並輔以實際操作畫面，協助讀者理解本系統如何協助進行與評估模型辨識設計。

## Department of Statistics, National Taipei University, Taiwan

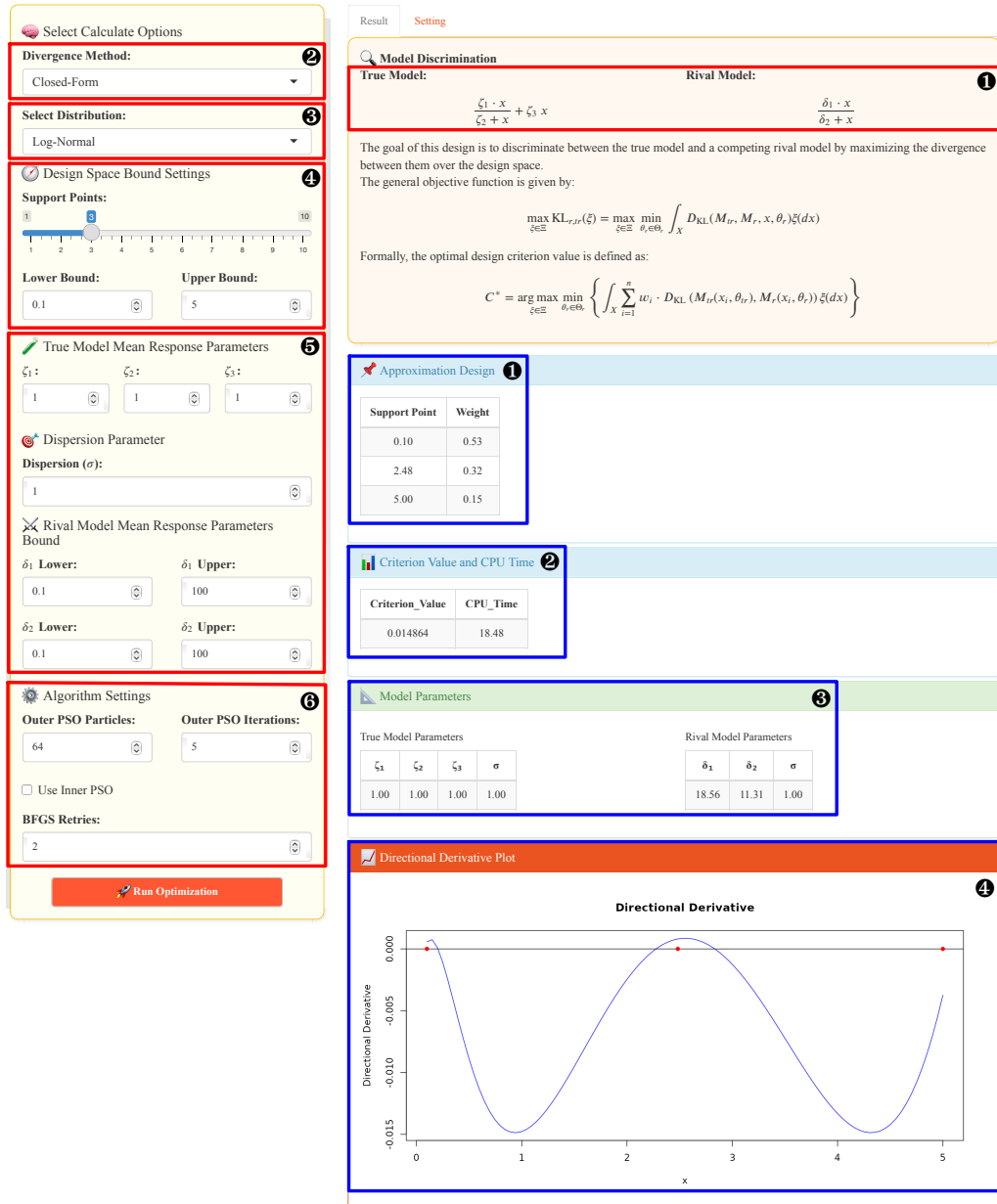


圖 C.1 為根據第 4.1 節所設定的模擬情境所建構之 Shiny UI 操作介面，以下將依序說明各個設定欄位的功能與目的。首先，紅色框框所標示的區域為使用者需進行參數設定的部分：

1. 模型架構（預設展示）：此處顯示兩個候選模型的數學結構，方便使用者比對下方需設定的參數項目。
2. 測度計算方法：此欄位可選擇目標函數的處理方式，如圖 C.2 所示，選單中提供封閉解（Closed-Form）與數值積分（Numerical Integration）兩種方式。

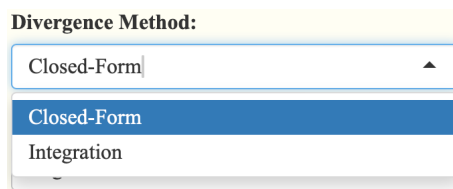


圖 C.2: 選擇散度計算方法

3. 模型假設：如圖 C.3 所示，使用者可選擇兩模型皆服從對數常態（Log-Normal）或韋伯（Weibull）分佈，以符合實際應用的資料特性。

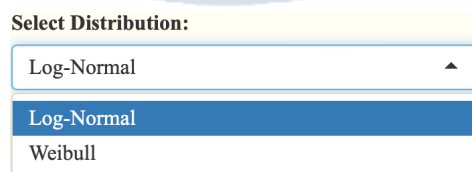
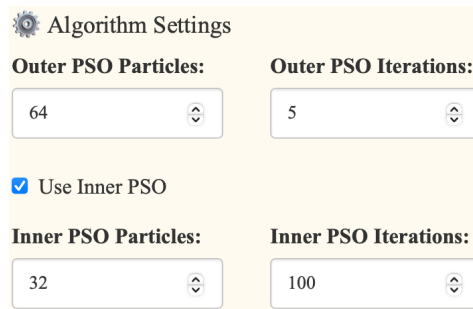


圖 C.3: 選擇模型分配假設

4. 設計空間設定：可設定近似設計中欲使用的支撐點數量（support points），並調整設計變數的上下界範圍。
5. 參數設定：真實模型的參數為使用者直接輸入，可依據過往經驗值或專家判斷；對立模型則需給定其參數範圍。此處假設兩模型的變異數一致，但仍允許使用者調整設定值。

6. 演算法設定：外層使用粒子群演算法 ( PSO )，需輸入粒子數與迭代次數；內層預設使用 L-BFGS 方法，並需設定其迭代次數。若使用者勾選「 Use Inner PSO 」，則如圖 C.4 所示，內層將改以 PSO 進行，此時亦需額外設定一組粒子數與迭代次數。



The image shows a software interface titled "Algorithm Settings". It contains four input fields for numerical values, each with a spin button. The first two fields are "Outer PSO Particles:" with a value of 64 and "Outer PSO Iterations:" with a value of 5. Below these is a checkbox labeled "Use Inner PSO" which is checked. The next two fields are "Inner PSO Particles:" with a value of 32 and "Inner PSO Iterations:" with a value of 100.

Algorithm Settings	
Outer PSO Particles:	Outer PSO Iterations:
64	5
<input checked="" type="checkbox"/> Use Inner PSO	
Inner PSO Particles:	Inner PSO Iterations:
32	100

圖 C.4: 演算法設定選項

至於藍色框框所標示的區域，則為演算法執行後的輸出結果，以下依序說明各個區塊的功能與意義：

1. 近似設計：此區塊列出所尋得的最終設計配置，包括各支撐點位置 ( support point ) 及其對應的權重 ( weight )，即為所建構之近似設計  $\xi^*$ 。
2. 準則值與運算時間：此區塊呈現該設計對應的準則值  $C^*$ ，以及完成此設計所耗費的總運算時間 ( 單位：秒 )，用以評估演算法的效率與準則表現。
3. 參數搜尋值：本研究所使用的模型辨識設計為最大最小化架構，即在對立模型的參數空間中尋找準則值最小的設定，再根據該設定尋找準則值最大的設計。因此，搜尋出的參數組合在設計過程中具有重要參考意義。
4. 方向導數圖：為了確認所尋得之近似設計是否滿足最佳性條件，會繪製該設計下的方向導數函數圖。此圖可用來檢查設計點是否為函數的局部最大值，並確認函數是否全數位於 0 以下，以驗證是否滿

足等價定理。

此外，若點選 Setting 選單，如圖 C.5 所示，可查看使用者於本次分析中自行設定的項目內容，包括模型假設、參數範圍與演算法相關設定等。需注意的是，系統預設的參數值並不會在此頁面顯示。

Setting	
Outer PSO Particles	64
Outer PSO Iterations	5
Use Inner PSO	FALSE
Inner PSO Particles	N/A
Inner PSO Iterations	N/A
BFGS Retries	2
Support Points	3
Design Bounds	[0.1, 5]
True Model Parameters	(1, 1, 1)
Model Dispersion	1

圖 C.5: 使用者設定參數的摘要表

最後，圖中展示了 Arrhenius 與 Meeker 頁面中與 Fidalgo 頁面略有不同的特殊設定說明：

- 設限時間（兩者皆有）：此為 Type I 設限時間，此設定對應於 Type I 設限情境，主要處理可靠度試驗中產品尚未發生失效的情形。用戶可於此處指定合理的設限門檻值，如圖 C.6 所示。

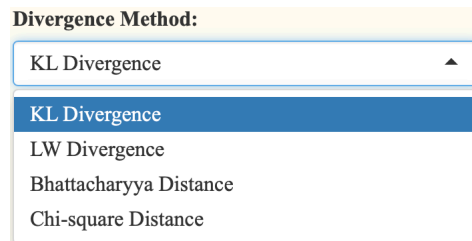
Censoring Threshold Setting

Censoring Threshold (tc):

5000

圖 C.6: 設定設限時間

- 散度計算方法（僅 Arrhenius 頁面）：在此選單中，使用者可選擇四種散度，包括 KL 散度、LW 散度、Bhattacharyya 距離與  $\chi^2$  距離，以因應不同應用需求。圖 C.7 顯示此下拉選單的內容。至於 Meeker 頁面，系統預設為使用 KL 散度，不可修改。

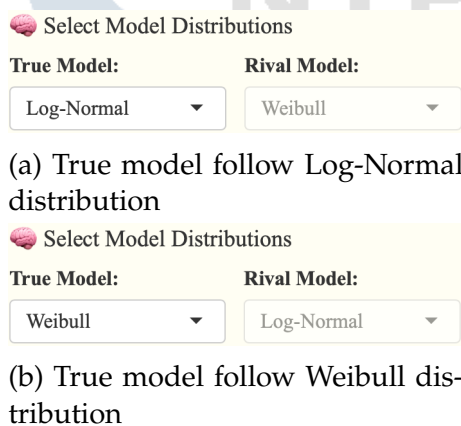


**Divergence Method:**

- KL Divergence
- LW Divergence
- Bhattacharyya Distance
- Chi-square Distance

圖 C.7: Arrhenius 分頁下之選擇散度衡量方法

- 模型假設選擇（僅 Meeker 頁面）：由於此案例的研究目標為探討相同的模型結構在不同分佈假設下的識別能力，因此僅能指定真實模型的分佈類型（Log-Normal 或 Weibull）。對立模型的分佈將由系統自動設定為另一種分佈，以構成具挑戰性的模型辨識情境，如圖 C.8 所示。



**Select Model Distributions**

**True Model:** Log-Normal **Rival Model:** Weibull

(a) True model follow Log-Normal distribution

**Select Model Distributions**

**True Model:** Weibull **Rival Model:** Log-Normal

(b) True model follow Weibull distribution

圖 C.8: Meeker 分頁下之模型分配選項

# 著作權聲明

論文題目：以合成最佳化演算法生成加速壽命試驗之模型辨識設計

論文頁數：97 頁

系所組別：統計學系

研究生：林貫原

指導教授：陳秉洋

畢業年月：一一四年六月

本論文著作權為林貫原所有，並受中華民國著作權法保護。

