

LOKAL D -OPTIMALE DESIGNS
FÜR NICHTLINEARE MODELLE
AUF DER k -DIMENSIONALEN KUGEL

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

von Dipl.-Math. Martin Radloff
geb. am 01. September 1986 in Wolfen

genehmigt durch die Fakultät für Mathematik
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter: Prof. Dr. Rainer Schwabe
Prof. Dr. Kirsten Schorning

eingereicht am: 29. April 2025
Verteidigung am: 21. November 2025

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der optimalen Versuchsplanung für unterschiedliche nichtlineare Modelle der multiplen Regression. Dabei werden unter anderem die Poisson- und die Negativ-Binomial-Regression sowie die logistische Regression und das Probit-Modell ausgiebig untersucht. Bei diesen Beispielen handelt es sich um verallgemeinerte lineare Modelle, welche in der statistischen Datenanalyse weit verbreitet sind. Außerdem gehören sie zwei Klassen von Modellen an, welche neben weiteren zu besprechenden Eigenschaften entweder eine monotone oder eine unimodale Intensitätsfunktion besitzen. Die gewöhnliche lineare multiple Regression wird dabei als Sonder- beziehungsweise Grenzfall mit betrachtet. Als Versuchsbereich dieser Modelle wird die k -dimensionale Einheitskugel angenommen, wobei durch Äquivarianzbetrachtungen beliebig große Kugeln und Ellipsoide eingebettet im k -dimensionalen euklidischen Raum dienen können. Solche Versuchsbereiche treten beispielsweise im Zusammenhang mit Response-Surface-Methoden auf.

Für diese Modelle werden lokal D -optimale Designs ermittelt, welche bis auf Sonderfälle, wie das lineare Modell oder $k = 1$, bisher unbekannt waren. Dabei werden wiederum intensiv Invarianz- und Äquivarianzeigenschaften des Modells, des Versuchsbereiches und des Optimalitätskriteriums ausgenutzt. Es stellt sich heraus, dass ein möglicher verallgemeinerter lokal D -optimaler Versuchsplan nur Masse auf zwei Orbits besitzt, welche sich im Schnitt von Kugeloberfläche und jeweils einer Hyperebene orthogonal zur Richtung der höchsten Intensität befinden. Einer dieser beiden Orbits kann zu einem einzelnen Punkt, einem Pol, degeneriert sein.

Im Falle der Klasse mit monotoner Intensitätsfunktion gibt es immer einen echten Orbit und einen zu einem Pol degenerierten Orbit. Aufgrund der sich ergebenden Designgewichte lässt sich der echte Orbit durch k Designpunkte, welche die Eckpunkte eines darin maximal aufgespannten regulären Simplex sind, diskretisieren, sodass ein exakter Versuchsplan mit $k + 1$ gleichgewichteten Designpunkten entsteht. Dies ist die minimale Anzahl von Designpunkten zum Schätzen des Parametervektors der multiplen Regression. Gleiches gilt zum Teil für die Klasse mit unimodaler Intensitätsfunktion. Hier können aber auch lokal D -optimale Designs mit zwei echten Orbits auftreten, die nur bedingt zu einem Design mit minimaler Anzahl von Punkten diskretisiert werden können. Unbeschadet dessen lassen sich effiziente Versuchspläne mit minimaler Anzahl von Punkten angeben.

Als weiteres Resultat führt eine zusätzliche Symmetrieeigenschaft in der Klasse der Modelle mit unimodaler Intensitätsfunktion zu einer Vereinfachung in der Bestimmung der beiden Orbitpositionen.

Abstract

This thesis deals with the optimal experimental design for various nonlinear multiple regression models. Among others, the Poisson and negative binomial regression as well as logistic regression and the probit model are examined extensively. These examples are generalized linear models, which are widely used in statistical data analysis. They also belong to two classes of models which, among other properties being discussed, have either a monotonic or a unimodal intensity function. The standard linear multiple regression is treated as a special or boundary case. The k -dimensional unit sphere is assumed to be the design region for these models, whereby equivariance considerations allow arbitrarily large spheres and ellipsoids embedded in the k -dimensional Euclidean space. Such design regions arise, for example, in the context of response surface methods.

For these models, locally D -optimal designs are determined, which were previously unknown except for special cases such as the linear model or $k = 1$. Again, invariance and equivariance properties of the model, the design region and the optimality criterion are used intensively. It results that a feasible generalized locally D -optimal experimental design only has mass on two orbits, which are located in the intersection of the surface of the ball and a hyperplane orthogonal to the direction of highest intensity. One of these two orbits can be degenerated into a single point, a pole.

In the case of the class with a monotonic intensity function, there is always a proper orbit and an orbit degenerated to a pole. Due to the resulting design weights, the proper orbit can be discretized by k design points, which are the vertices of a regular simplex spanned to the maximum within the orbit, so that an exact experimental design with $k + 1$ equally weighted design points evolves. This is the minimal number of design points for estimating the multiple regression parameter vector. The same is partially true for the class with a unimodal intensity function. However, here locally D -optimal designs with two proper orbits can also occur, which can only be discretized into a design with the minimal number of points to a limited extent. Regardless of this, efficient experimental designs with the minimal number of points can be determined.

As a further result, an additional symmetry property in the class of models with unimodal intensity functions leads to simplification of determining the two orbit positions.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	i
Abstract	ii
1 Einführung	1
2 Grundlagen	6
2.1 Modell	6
2.2 Verallgemeinerte lineare Modelle	8
2.3 Versuchspläne	16
2.4 D -Optimalität	20
2.5 Äquivalenzsatz	23
2.6 Algebraische Grundlagen: Gruppen und Isometrien	26
3 Invarianz und Äquivarianz	31
3.1 Äquivarianz	32
3.2 Invarianz, invariante Maße und Designs	34
4 Monotone Intensitätsfunktionen	40
4.1 Das lineare Modell	40
4.2 Nichtlineares Modell – Monotone Intensitätsfunktion	46
4.3 Beispiele	66
4.3.1 Poisson-Regression	66
4.3.2 Negativ-Binomial-Regression	70
4.3.3 Modelle mit zensierten Daten	71
4.4 Kurze Zusammenfassung	74
5 Unimodale Intensitätsfunktionen	75
5.1 Erweiterung auf unimodale Intensitätsfunktionen	76
5.2 Beispiele	89
5.2.1 Die logistische Regression und das Probit-Modell	89
5.2.2 Das komplementäre log-log-Modell	92

5.3	Symmetrische Intensitätsfunktion	94
5.4	Reduzierung der Trägerpunkte	105
5.5	Beispiel: Effizienzvergleich – logistische Regression	112
6	Diskussion	116
A	Anhang — Nachweis der Monotonie für Satz 5.14	120
B	Anhang — Nachweis der Eigenschaften	132
B.1	Poisson-Regression	132
B.2	Negativ-Binomial-Regression oder Poisson-Gamma-Regression	133
B.3	Logistische Regression	133
B.4	Probit-Modell	135
B.5	Komplementäres log-log-Modell	142
	Abbildungsverzeichnis	146
	Literaturverzeichnis	147

1 Einführung

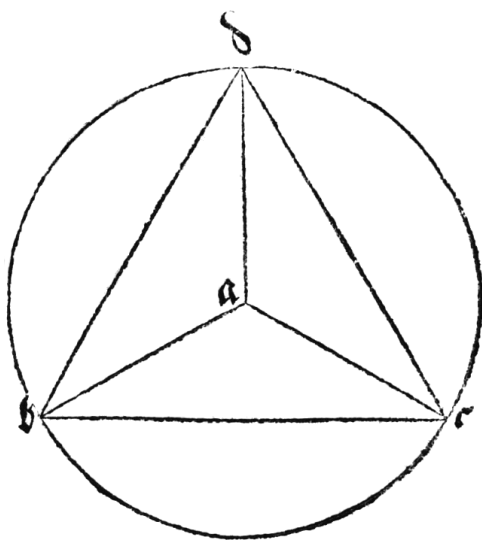


Abbildung 1.1: Illustration eines Tetraeders mit Umkugel und Zitat von Albrecht Dürer, vergleiche Dürer (1525, Seiten 9 und 142).

Aber kein vollkommener Corpus ist/das allenthalben gleich ist dann ein kugel [...]

Zum dritten sind Corpora die allenthalben gleich sind/von felderer/ecken vnd seiten/die der Euklides corpora regularia nennet/der beschreibt jr fünffe/darumb das jr nit mer können sein/die in ein kugel darin sie allenthalben an rüren verfaßt mügen werdenn [...]

Zum ersten ist ein dryanglich corpus das hat vier ebne dreyeckete felt von gleichen windken/vnd hat auch vier gleiche dreyeckete eck/vnd sechs gleiche scharpfe seiten.

Bereits Albrecht Dürer erwähnte vor knapp 500 Jahren in seinem Werk *Underweysung der messung mit dem zirckel un[d] richtscheyt, in Linien ebnen unnd gantzen corporen*, vergleiche Dürer (1525, Seiten 9 und 142), dass die Kugel der „vollkommenste“ Körper ist und in ihr nur fünf verschiedene reguläre Polyeder im dreidimensionalen euklidischen Raum einbeschrieben werden können. Dazu zählt auch die dreiseitige regelmäßige Pyramide, welche Tetraeder oder dreidimensionaler regulärer Simplex genannt wird. Ähnliche Ausführungen befinden sich aber auch schon in Euklids Werk *Elemente* aus dem dritten Jahrhundert vor Beginn unserer Zeitrechnung, vergleiche Euklid (1781). Aber was hat dies mit statistischer Modellbildung und Versuchsplanung zu tun?

Lineare Modelle und nichtlineare Modelle, wie die Poisson-Regression oder die logistische Regression, werden häufig zur Abbildung der Realität in der statistischen Modellbildung

verwendet. Deshalb werden solche Modelle auch ebenso häufig in der wissenschaftlichen Literatur beschrieben und untersucht. Insbesondere wird dabei auch das Ziel verfolgt, optimale Versuchspläne für sie zu entwickeln. Am häufigsten findet dabei das sogenannte D -Kriterium Anwendung. Deshalb und aufgrund seiner guten analytischen Eigenschaften wird in dieser Arbeit ausschließlich das D -Kriterium zum Erzeugen sogenannter (lokal) D -optimaler Designs verwendet.

Verallgemeinerte lineare Modelle, welche in Anwendungen einen großen Teil der nicht-linearen Modelle ausmachen, wurden beispielsweise ausführlich in McCullagh und Nelder (1989) beschrieben und in vielen Arbeiten wie Ford et al. (1992) oder Biedermann et al. (2006) mit optimalen Designs versehen. Für die Poisson-Regression oder Negativ-Binomial-Regression folgten in Rodríguez-Torreblanca und Rodríguez-Díaz (2007) optimale Designs.

Bestimmte Modelle, wie die Poisson- oder Negativ-Binomial-Regression oder gewisse Modelle mit zensierten Daten, gehören zu einer Klasse von Modellen, die neben weiteren wichtigen anderen Eigenschaften eine monotone Intensitätsfunktion besitzen, die den Einfluss auf den Informationsgehalt einer Beobachtung angibt. Diese Klasse wurde in Konstantinou et al. (2014) eingeführt. Hierzu wurden ebendort passende lokal D -optimale Designs auf eindimensionalen Intervallen entwickelt. Schmidt und Schwabe (2017) erweiterten dies für die multiple Regression auf mehrdimensionale (teils unbeschränkte) Intervalle, das heißt auf Quader oder Orthanten oder eine Kombination aus beidem.

Für den laut Dürer „vollkommensten“ Körper — die Kugel — als Versuchsbereich fehlen derartige Untersuchungen nichtlinearer Modelle bis auf zwei Ausnahmen aber gänzlich. Erstens können Intervalle als eindimensionale Kugeln angesehen werden. Die Resultate dieser Arbeit lassen sich auch auf diese Sonderfälle mit $k = 1$ anwenden und liefern die gleichen optimalen Designs wie in den zuvor genannten Veröffentlichungen. Zweitens ist für die standardmäßige lineare multiple Regression auf der k -dimensionalen Kugel das D -optimale Design bekannt, vergleiche dazu Pukelsheim (1993, Abschnitt 15.12). Dieses optimale Design besteht aus den Eckpunkten eines beliebig rotierten und in die Kugel einbeschriebenen regulären k -dimensionalen Simplex. Also für $k = 3$ sind dies die Eckpunkte eines einbeschriebenen Tetraeders. Diese Überlegung schließt zwar den Kreis zu Albrecht Dürers Ausführungen oben, ist aber der eigentliche Anfang der hier vorgestellten Untersuchungen.

Bevor die Bestimmung von optimalen Designs beginnt, sollte noch kurz betrachtet werden, ob die Kugel als Versuchsbereich überhaupt (praktisch) relevant ist. Auf der einen

Seite behandelten bereits Kiefer (1961) und Farrell et al. (1967) die polynomielle Regression auf der Kugel. Auf der anderen Seite lassen sich praktische Anwendungen in den Ingenieurwissenschaften und der Physik aufzeigen, wo die Gültigkeit eines (statistischen) Modells in der Umgebung um einen Untersuchungsgegenstand angenommen wird. Die bei Versuchen oft verwendeten Response-Surface-Methoden versuchen den Effekt verschiedener Einflussfaktoren (erklärende Variablen) auf das Ergebnis (abhängige Variablen) technischer Systeme zu beschreiben. Bei der Verwendung eines faktoriellen Designs wird die erwähnte Umgebung oft als würfelförmig angenommen, vergleiche Box und Draper (1987). Genauso kann sie aber auch als kugelförmig betrachtet werden.

Große Teile dieser Arbeit wurden bereits in vier Publikationen veröffentlicht. In Radloff und Schwabe (2019a) wurden die Modelle der Klasse mit monotonen Intensitätsfunktionen betrachtet. Dazu zählen die Poisson-Regression, die Negativ-Binomial-Regression und gewisse Proportional-Hazard-Modelle mit zensierten Daten. Dort konnte zunächst gezeigt werden, dass ein potentiell verallgemeinertes lokal D -optimales Design nur Masse auf zwei Orbits besitzt, welche sich im Schnitt von Kugeloberfläche und jeweils einer Hyper-ebenen orthogonal zur Richtung der höchsten Intensität befinden. Dabei ist der Orbit mit der höheren Intensität zu einem einzelnen Punkt degeneriert — einem Pol. Der echte, also nichtdegenerierte Orbit lässt sich anschließend durch k Punkte, welche die Eckpunkte eines darin maximal aufgespannten regulären Simplex sind, diskretisieren. Damit entsteht ein exakter Versuchsplan mit $k + 1$ Designpunkten. Diese $k + 1$ Punkte spannen zwar wieder einen Simplex in der Kugel auf, welcher aber zumeist nicht regulär ist. Angemerkt sei noch, dass $k + 1$ die minimale Anzahl von Punkten zum Schätzen des Parametervektors der multiplen Regression ist.

In der darauffolgenden Arbeit, Radloff und Schwabe (2019b), wurden die Resultate auf eine größere Klasse von Modellen ausgeweitet. Das Logit-Modell beziehungsweise die logistische Regression und das Probit-Modell sowie das komplementäre log-log-Modell besitzen eine unimodale Intensitätsfunktion. Unimodal heißt, es gibt nur ein lokales Maximum und keine lokalen Minima. Diese Modelle haben zum Teil auch optimale Designs mit einem Pol und einem echten Orbit, sodass sie genau wie im Fall mit monotoner Intensitätsfunktion einen exakten Versuchsplan mit $k + 1$ Designpunkten repräsentieren können. Aber es gibt auch Situationen, in denen Designs mit zwei echten Orbits lokal D -optimal sind.

Diese lassen sich nur eingeschränkt unter Beibehaltung der Optimalität zu einem Design mit minimaler Anzahl von Versuchspunkten diskretisieren. Aber zumindest effiziente Versuchspläne mit minimaler Anzahl von Punkten lassen sich angeben. Dies wird neben

einem weiteren Resultat über eine zusätzliche Symmetrieeigenschaft zur Vereinfachung der Berechnung der beiden Orbitpositionen in Radloff und Schwabe (2023) thematisiert.

Allem vorangestellt ist aber eine Publikation, Radloff und Schwabe (2016), zur Verwendung von Invarianz- und Äquivarianzeigenschaften in der optimalen Versuchsplanung bei nichtlinearen Modellen. Die dort aufgezeigten Zusammenhänge wurden intensiv in den drei zuvor genannten Veröffentlichungen ausgenutzt.

Die vorliegende Arbeit umfasst sechs Kapitel und zwei umfangreiche Anhänge. Das Kapitel 2 legt die Basis für diese Arbeit. Zunächst wird das zugrundeliegende Modell mit dessen multipler Regressionsstruktur eingeführt. Dann wird auf eine große Klasse von speziellen Modellen, den verallgemeinerten linearen Modellen, eingegangen. Dabei werden beispielhaft fünf konkrete verallgemeinerte lineare Modelle aufgezeigt, die im Verlaufe der Arbeit wieder aufgegriffen und näher untersucht werden. Im nächsten Abschnitt wird auf die Versuchsplanung und Designs eingegangen, wobei anschließend ihre Optimalität behandelt wird. Dies ist hier ausschließlich die D -Optimalität, welche durch den Äquivalenzsatz von Kiefer und Wolfowitz charakterisiert wird, siehe Kiefer und Wolfowitz (1960) und beispielsweise Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.2.2). Abschließend werden in diesem Kapitel algebraische Grundlagen zu Gruppen und Isometrien aufgeführt, die nachfolgend für Invarianz- und Äquivarianzeigenschaften der optimalen Designs benötigt werden.

Im Kapitel 3 geht es um Invarianz und Äquivarianz von Designs in der Versuchsplanung. Dazu sind auch Konzepte wie invariante Maße und Haar-Maße essentiell. Mit diesem Wissen lassen sich die optimalen Designs für die beiden hier betrachteten Klassen der Modelle mit monotoner beziehungsweise unimodaler Intensitätsfunktion bestimmen.

Im Kapitel 4 wird zunächst allgemein für die Klasse der Modelle mit monotoner Intensitätsfunktion ein D -optimales Design bestimmt und dieses dann anhand von konkreten Beispielen illustriert. Dazu zählen die Poisson-Regression, die Negativ-Binomial-Regression und weitere Modelle mit zensierten Daten.

Im Kapitel 5 stehen die Modelle mit unimodaler Intensitätsfunktion im Fokus. Hier lassen sich nicht in allen Fällen exakte Versuchspläne finden, wobei jedoch mittels geeigneter Diskretisierung ein zumindest (sehr) effizientes Design angegeben werden kann. Dies erfolgt hier beispielhaft für das Logit- und Probit-Modell sowie für das komplementäre log-log-Modell. Gleichzeitig wird in diesem Kapitel noch eine weitere Eigenschaft betrachtet und ausgenutzt, nämlich wenn die Intensitätsfunktion symmetrisch ist.

Im abschließenden Kapitel 6 werden die Ergebnisse noch einmal kurz eingeordnet und bewertet, bevor ein Ausblick auf weitere Forschungs- und Untersuchungsmöglichkeiten gegeben wird.

Abgerundet wird die Arbeit durch zwei Anhänge. Im Anhang A wird ein technisches Resultat für einen wichtigen Satz im Kapitel 5 bewiesen. Im Anhang B werden der Vollständigkeit halber die benötigten Eigenschaften der Modelle mit monotoner Intensitätsfunktion, siehe (A1) bis (A4) auf Seite 54, und mit unimodaler Intensitätsfunktion, siehe (A1), (A2'), (A3'), (A4) und (A5) auf den Seiten 77 und 80, nachgewiesen. Dies ist insbesondere für das Probit-Modell sehr umfangreich und notwendig, da die Darstellung in der vorhandenen Literatur unvollständig ist.

2 Grundlagen

2.1 Modell

Im Rahmen dieser Arbeit soll das parametrische Modell

$$Y(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon(\mathbf{x})$$

betrachtet werden. Dabei wird jeder Versuchseinstellung \mathbf{x} und jedem unbekanntem Parametervektor $\boldsymbol{\beta}$ aus dem Versuchsbereich \mathcal{X} beziehungsweise Parameterraum \mathcal{B} mittels der Wirkungsfunktion $\mu : \mathcal{X} \times \mathcal{B} \rightarrow \mathbb{R}$ und einem additiven (zufälligen) Beobachtungsfehler $\varepsilon(\mathbf{x})$ ein Versuchsergebnis $Y(\mathbf{x})$ zugeordnet. Zusätzlich sei der Erwartungswert $E(Y(\mathbf{x})) = \mu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$ und damit $E(\varepsilon(\mathbf{x})) = 0$.

Auch wenn die lineare multiple Regression als Grenzfall mit dazugehört, soll hier hauptsächlich eine bestimmte Klasse von nichtlinearen multiplen Regressionsmodellen auf der k -dimensionalen Einheitskugel im Fokus stehen. Bei diesen Modellen hängt jede Beobachtung Y von einer speziellen Einstellung der Kontrollvariablen, der sogenannten Versuchseinstellung beziehungsweise dem Designpunkt, ab. Jeder Designpunkt

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)^\top,$$

wobei $k \in \mathbb{N}$ die Anzahl der verschiedenen Faktoren ist, befindet sich im Versuchsbereich \mathcal{X} , welcher hier die k -dimensionale Einheitskugel

$$\mathcal{X} = \mathbb{B}_k = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k : x_1^2 + \dots + x_k^2 \leq 1\}$$

ist. Für die multiple Regression dient $\mathbf{f} : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^{k+1}$ mit

$$\mathbf{f} : \mathbf{x} \mapsto (1, x_1, \dots, x_k)^\top$$

als Regressionsfunktion und

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top$$

als Parametervektor, welcher unbekannt ist und im Parameterraum \mathcal{B} liegt. Für den Parameterraum wird gefordert, dass dieser rotationsinvariant bezüglich β_1, \dots, β_k ist. Hier wird der Einfachheit halber $\mathcal{B} = \mathbb{R}^p = \mathbb{R}^{k+1}$, mit der Dimension des Parameterraums $p = k+1$, angenommen. $\mathcal{B} = \mathbb{R} \times \mathbb{S}_{k-1}$ wäre aber auch vorstellbar. Dabei ist \mathbb{S}_{k-1} die Einheitskugel im k -dimensionalen Raum, also die Oberfläche der k -dimensionalen Einheitskugel \mathbb{B}_k :

$$\mathbb{S}_{k-1} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k : x_1^2 + \dots + x_k^2 = 1\} .$$

Analog dazu lassen sich auch die Kugel und Sphäre im k -dimensionalen Raum mit festem Radius r definieren:

$$\mathbb{B}_k(r) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k : x_1^2 + \dots + x_k^2 \leq r^2\}, \quad \mathbb{S}_{k-1}(r) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k : x_1^2 + \dots + x_k^2 = r^2\} .$$

Aus der Regressionsfunktion \mathbf{f} und dem Parametervektor $\boldsymbol{\beta}$ ergibt sich der lineare Prädiktor zu

$$\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k . \quad (2.1)$$

Im Falle der linearen multiplen Regression lässt sich direkt der Zusammenhang zwischen Regressionsfunktion, Parametervektor und somit linearem Prädiktor zur Wirkungsfunktion herstellen. Es ist $\mu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$. Die multiple Regression bei verallgemeinerten linearen Modellen wird im nachfolgenden Abschnitt 2.2 beschrieben.

Neben der Forderung einer multiplen Regression ist für das betrachtete Modell in dieser Arbeit eine weitere Voraussetzung notwendig. Die Informationsmatrix $\mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$, welche auf nur einer Versuchseinstellung beruht, also die Ein-Punkt-Informationsmatrix beziehungsweise elementare Informationsmatrix oder elementare Information, muss sich in der Form

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \quad (2.2)$$

schreiben lassen. Dabei ist $\lambda : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die Intensitätsfunktion, welche hier nur vom Wert des linearen Prädiktors abhängen darf. Diese Intensitätsfunktion lässt sich zum Beispiel in Fedorov (1972, Section 1.5) oder Atkinson et al. (2014) finden und wird häufig auch Effizienzfunktion genannt.

In verallgemeinerten linearen Modellen mit einer eindimensionalen suffizienten Statistik oder auch zum Beispiel in Modellen für zensierte Daten, siehe Schmidt und Schwabe

(2017), sind diese Voraussetzungen erfüllt. Um konkrete verallgemeinerte lineare Modelle später beispielhaft betrachten zu können, werden zunächst diese kurz eingeführt und einige Eigenschaften aufgegriffen.

2.2 Verallgemeinerte lineare Modelle

Die folgenden Betrachtungen zu verallgemeinerten linearen Modellen lehnen sich stark an den Ausführungen von McCullagh und Nelder (1989) sowie Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 4.3) und McCulloch und Searle (2001, Kapitel 5) an.

Die unabhängigen Beobachtungen bei verallgemeinerten linearen Modellen (mit einer eindimensionalen suffizienten Statistik) folgen einer Verteilung, welche zu einer Exponentialfamilie gehört und deren Dichte bezüglich eines Maßes ν , des Lebesgue-Maßes oder eines Zählmaßes, folgende Form hat:

$$f_{Y(\mathbf{x})}(y) = \exp\left(\frac{T(y)A(\theta) - B(\theta)}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right)$$

Dabei sind θ der eindimensionale Parameter und τ ein bekannter und fester Dispersionsparameter. Die Funktionen A , B , C , D und T müssen geeignet differenzierbar, invertierbar und integrierbar sein. Für die hierbei nötigen Regularitätsvoraussetzungen sei auf obige Literatur verwiesen. Es sei noch angemerkt, dass D und τ in der Darstellung der Exponentialfamilie ignoriert werden können, da τ konstant ist und somit $D(\tau)$ in A und B einfließen kann. Für das Modell der linearen Regression, vergleiche Beispiel 2.6, ist diese Notation trotzdem hilfreich.

Weiterhin sind die erwarteten Versuchsausgänge für verallgemeinerte lineare Modelle mittels einer Linkfunktion, etwa h , an den linearen Prädiktor gekoppelt, das heißt

$$h(\mathbb{E}(Y(\mathbf{x}))) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta} .$$

Der Vorteil der Exponentialfamilie ist, dass sich daraus direkt Erwartungswert, Varianz und Fisher-Information bestimmen lassen. Dies wird im Folgenden kurz angerissen. Für gewöhnlich wird bei verallgemeinerten linearen Modellen von einer natürlichen Exponentialfamilie ausgegangen, das heißt, dass insbesondere T und A jeweils Identitäten sind. Trotzdem werden diese zunächst der Vollständigkeit halber noch mit betrachtet.

Aus der Eigenschaft als Dichte

$$\int f_{Y(\mathbf{x})}(y) \nu(dy) = 1$$

folgt direkt

$$\exp\left(\frac{-B(\theta)}{D(\tau)}\right) \int \exp\left(\frac{T(y)A(\theta)}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right) \nu(dy) = 1$$

und

$$B(\theta) = D(\tau) \log \int \exp\left(\frac{T(y)A(\theta)}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right) \nu(dy) .$$

Unter Ausnutzung der Vertauschbarkeit der Differentiation und Integration unter Regularitätsvoraussetzungen

$$B'(\theta) = D(\tau) \frac{\int \exp\left(\frac{T(y)A(\theta)}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right) \frac{T(y)A'(\theta)}{D(\tau)} \nu(dy)}{\int \exp\left(\frac{T(y)A(\theta)}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right) \nu(dy)}$$

und der Gleichheit des Nenners mit $\exp\left(\frac{B(\theta)}{D(\tau)}\right)$ ist

$$\begin{aligned} B'(\theta) &= \exp\left(\frac{-B(\theta)}{D(\tau)}\right) \int \exp\left(\frac{T(y)A(\theta)}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right) T(y)A'(\theta) \nu(dy) \\ &= A'(\theta) \int T(y) f_{Y(\mathbf{x})}(y) \nu(dy) = A'(\theta) \mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x}))) \end{aligned}$$

ein skaliertes Erwartungswert von $T(Y(\mathbf{x}))$. Analog ergibt sich für die zweite Ableitung

$$\begin{aligned} B''(\theta) &= \frac{d}{d\theta} \left(A'(\theta) \int T(y) f_{Y(\mathbf{x})}(y) \nu(dy) \right) \\ &= A''(\theta) \int T(y) f_{Y(\mathbf{x})}(y) \nu(dy) + A'(\theta) \int T(y) f_{Y(\mathbf{x})}(y) \frac{T(y)A'(\theta) - B'(\theta)}{D(\tau)} \nu(dy) \end{aligned}$$

und mit $B'(\theta) = A'(\theta) \mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x})))$ weiter

$$\begin{aligned} B''(\theta) &= A''(\theta) \mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x}))) + \frac{A'(\theta)^2}{D(\tau)} \int T(y) f_{Y(\mathbf{x})}(y) (T(y) - \mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x})))) \nu(dy) \\ &= A''(\theta) \mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x}))) + \frac{A'(\theta)^2}{D(\tau)} (\mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x}))^2) - (\mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x}))))^2) \\ &= A''(\theta) \mathbf{E}(T(Y(\mathbf{x}))) + \frac{A'(\theta)^2}{D(\tau)} \text{Var}(T(Y(\mathbf{x}))) . \end{aligned}$$

Wie erwähnt wird meist von einer natürlichen Parametrisierung ausgegangen, das heißt, dass A die Identität ist. Diese natürliche Parametrisierung kann durch den Übergang von der Parametrisierung in θ zu $\tilde{\theta} = A(\theta)$ erreicht werden. Und sofern A bijektiv ist, ergibt sich $\tilde{B} = B \circ A^{-1}$. Also liegt folgende umparametrisierte Dichte vor

$$f_{Y(\mathbf{x})}(y) = \exp\left(\frac{T(y)\tilde{\theta} - \tilde{B}(\tilde{\theta})}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right).$$

Somit sind die beiden Ableitungen von \tilde{B}

$$\tilde{B}'(\tilde{\theta}) = \mathbb{E}(T(Y(\mathbf{x}))), \quad (2.3)$$

$$\tilde{B}''(\tilde{\theta}) = \frac{1}{D(\tau)} \text{Var}(T(Y(\mathbf{x}))). \quad (2.4)$$

Mit (2.3) und T als Identität definiert \tilde{B}' beziehungsweise eigentlich $(\tilde{B}')^{-1}$ die kanonische Linkfunktion, welche den Erwartungswert $\mathbb{E}(Y(\mathbf{x}))$ in den Raum der natürlichen Parametrisierung überführt.

Damit lassen sich zur Veranschaulichung folgende Zusammenhänge von Parameter θ , natürlichem Parameter $\tilde{\theta}$, Erwartungswert $\mathbb{E}(Y(\mathbf{x}))$ und linearem Prädiktor $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$ herstellen:

$$\theta \xleftrightarrow[A^{-1}]{} \tilde{\theta} \xleftrightarrow[(\tilde{B}')^{-1}]{\tilde{B}'} \mu = \mathbb{E}(Y(\mathbf{x})) \xleftrightarrow[h^{-1}]{h} z = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$$

Wird als Linkfunktion der kanonische Link verwendet, so gilt direkt $\tilde{\theta} = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$. Damit sind die Dichtefunktion

$$f_{Y(\mathbf{x})}(y) = \exp\left(\frac{y \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta} - \tilde{B}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})}{D(\tau)} - C(y, \tau)\right)$$

und die Scorefunktion als Ableitung der log-Likelihood

$$\left. \frac{d \log f_{Y(\mathbf{x})}}{d\boldsymbol{\beta}} \right|_{y=Y(\mathbf{x})} = \frac{Y(\mathbf{x})}{D(\tau)} \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top - \frac{1}{D(\tau)} \tilde{B}'(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top = \frac{Y(\mathbf{x}) - \mathbb{E}(Y(\mathbf{x}))}{D(\tau)} \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$$

und folglich die Fisher-Informationsmatrix

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) &= \mathbb{E} \left(\frac{d \log f_{Y(\mathbf{x})}}{d\boldsymbol{\beta}^\top} \Big|_{y=Y(\mathbf{x})} \quad \frac{d \log f_{Y(\mathbf{x})}}{d\boldsymbol{\beta}} \Big|_{y=Y(\mathbf{x})} \right) \\ &= \frac{\text{Var}(Y(\mathbf{x}))}{D(\tau)^2} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top = \frac{1}{D(\tau)} \tilde{B}''(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top. \end{aligned}$$

Wird hingegen eine beliebige Linkfunktion h verwendet, so ergibt sich

$$f_{Y(\mathbf{x})}(y) = \exp \left(\frac{y (\tilde{B}')^{-1}(h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) - \tilde{B}((\tilde{B}')^{-1}(h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})))}{D(\tau)} - C(y, \tau) \right)$$

als Dichte und damit die Scorefunktion

$$\begin{aligned} \frac{d \log f_{Y(\mathbf{x})}}{d\boldsymbol{\beta}} \Big|_{y=Y(\mathbf{x})} &= \frac{Y(\mathbf{x})}{D(\tau)} \left((\tilde{B}')^{-1} \right)' (h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) \cdot (h^{-1})'(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \\ &\quad - \frac{1}{D(\tau)} \tilde{B}' \left((\tilde{B}')^{-1}(h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) \right) \\ &\quad \cdot \left((\tilde{B}')^{-1} \right)' (h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) \cdot (h^{-1})'(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \\ &= \frac{1}{D(\tau)} \left((\tilde{B}')^{-1} \right)' (h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) \cdot (h^{-1})'(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \\ &\quad \cdot (Y(\mathbf{x}) - \mathbb{E}(Y(\mathbf{x}))) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top. \end{aligned}$$

Dabei wurde $\tilde{B}' \circ (\tilde{B}')^{-1} = \text{id}$ und $h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) = \mathbb{E}(Y(\mathbf{x}))$ ausgenutzt. Weiterhin sei zu erwahnen, dass mit der Umkehrregel der Differentiation

$$\left((\tilde{B}')^{-1} \right)' = \frac{1}{\tilde{B}'' \circ (\tilde{B}')^{-1}}$$

gilt. Dies wird nun bei der Fisher-Information ausgenutzt:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) &= \mathbb{E} \left(\frac{d \log f_{Y(\mathbf{x})}}{d\boldsymbol{\beta}^\top} \Big|_{y=Y(\mathbf{x})} \quad \frac{d \log f_{Y(\mathbf{x})}}{d\boldsymbol{\beta}} \Big|_{y=Y(\mathbf{x})} \right) \\ &= \frac{1}{D(\tau)} \left((\tilde{B}')^{-1} \right)' (h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) \cdot \left((h^{-1})'(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \right)^2 \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \\ &= \frac{\left((h^{-1})'(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \right)^2}{D(\tau) \cdot \tilde{B}'' \left((\tilde{B}')^{-1}(h^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})) \right)} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top. \end{aligned}$$

Folglich besitzen verallgemeinerte lineare Modelle die Struktur wie in (2.2) gefordert und die Intensitätsfunktion lässt sich direkt aus der Exponentialfamilie ableiten. Für den kanonischen Link ist die Intensitätsfunktion

$$\lambda(z) = \frac{1}{D(\tau)} \tilde{B}''(z) \quad (2.5)$$

und für eine beliebige Linkfunktion h

$$\begin{aligned} \lambda(z) &= \frac{1}{D(\tau)} \left((\tilde{B}')^{-1} \right)'(h^{-1}(z)) \cdot \left((h^{-1})'(z) \right)^2 \\ &= \frac{\left((h^{-1})'(z) \right)^2}{D(\tau) \cdot \tilde{B}'' \left((\tilde{B}')^{-1}(h^{-1}(z)) \right)}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ergänzend seien noch zwei Dinge bemerkt. Zum Ersten ist $D(\tau) \cdot \tilde{B}'' \left((\tilde{B}')^{-1}(h^{-1}(z)) \right) = \text{Var}(Y(\mathbf{x}))$ nach (2.4), also

$$\lambda(z) = \frac{\left((h^{-1})'(z) \right)^2}{\text{Var}(Y(\mathbf{x}))}.$$

Zum Zweiten ergibt (2.6) bei der Wahl der Linkfunktion als kanonischen Link $h = (\tilde{B}')^{-1}$ und folglich $(h^{-1})' = \tilde{B}''$ die gleiche Aussage wie (2.5).

Mit diesen Grundlagen können nun einige konkrete Beispiele aufgeführt werden, die in späteren Betrachtungen wieder aufgegriffen werden. Die aufgezeigten Modelle und Ergebnisse werden in der Literatur häufig genutzt, siehe zum Beispiel Atkinson et al. (2014). Trotzdem sollen sie hier recht ausführlich eingeführt werden.

Beispiel 2.1 (Poisson-Regression)

Bei der Poisson-Regression wird jede Beobachtung $Y(\mathbf{x}_i)$ zur Versuchseinstellung \mathbf{x}_i als Poisson-verteilt mit Erwartungswert $E(Y(\mathbf{x}_i)) = \mu_i = \exp(\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^\top \boldsymbol{\beta})$ angenommen. Aufgrund der geforderten Unabhängigkeit der Beobachtungen genügt es zur einfacheren Handhabung die folgenden Betrachtungen nur für eine Versuchseinstellung \mathbf{x} und damit Erwartungswert μ durchzuführen.

Die Poisson-Verteilung mit Parameter $\theta > 0$ ist eine diskrete Verteilung mit der Dichte

$$f_{Y(\mathbf{x})}(y) = P(Y(\mathbf{x}) = y) = \frac{\theta^y}{y!} e^{-\theta} = \exp\left(\frac{y \log(\theta) - \theta}{1} - \log y!\right).$$

Hier liegt offensichtlich eine Exponentialfamilie mit

$$T(y) = y, \quad A(\theta) = \log(\theta), \quad B(\theta) = \theta, \quad C(y, \tau) = \log y!, \quad D(\tau) = 1$$

vor. Die natürliche Parametrisierung lässt sich mittels $\tilde{\theta} = A(\theta) = \log(\theta)$ und $\tilde{B}(\tilde{\theta}) = \exp(\tilde{\theta})$ herstellen. Dies abgeleitet und invertiert ergibt den kanonischen Link $(\tilde{B}')^{-1}(\mu) = \log \mu$ sowie in der zweiten Ableitung $\tilde{B}''(\tilde{\theta}) = \exp(\tilde{\theta})$. Da wie oben gefordert als Link der kanonische Link des verallgemeinerten linearen Modells genutzt wird, ergibt sich mit (2.5) daraus die Ein-Punkt-Informationsmatrix $\mathbf{M}_P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$ für die Poisson-Regression

$$\mathbf{M}_P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \exp(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$$

und die Intensitätsfunktion

$$\lambda_P(z) = \exp(z).$$

Beispiel 2.2 (Negativ-Binomial-Regression oder Poisson-Gamma-Regression)

Eine Erweiterung der Poisson-Regression ist die Negativ-Binomial-Regression, welche auch Poisson-Gamma-Regression genannt wird. Für jede Beobachtung $Y(\mathbf{x}_i)$ wird angenommen, dass diese negativ-binomial-verteilt ist. Dies bedeutet, dass $Y(\mathbf{x}_i)$ Erfolge mit Erfolgswahrscheinlichkeit $\theta \in [0, 1]$ bei a Misserfolgen auftreten. Dabei ist a eine feste und bekannte natürliche Zahl. Damit ergibt sich die diskrete Dichte zu

$$\begin{aligned} f_{Y(\mathbf{x})}(y) &= \mathbb{P}(Y(\mathbf{x}) = y) = \binom{y+a-1}{y} (1-\theta)^a \theta^y \\ &= \exp\left(\frac{y \log(\theta) + a \log(1-\theta)}{1} + \log \binom{y+a-1}{y}\right). \end{aligned}$$

Dies lässt sich auch auf positive reelle Werte von a mittels der Dichte

$$\begin{aligned} f_{Y(\mathbf{x})}(y) &= \mathbb{P}(Y(\mathbf{x}) = y) = \frac{\Gamma(y+a)}{\Gamma(a) y!} (1-\theta)^a \theta^y \\ &= \exp\left(\frac{y \log(\theta) + a \log(1-\theta)}{1} + \log \frac{\Gamma(y+a)}{\Gamma(a) y!}\right) \end{aligned}$$

verallgemeinern. Dabei ist Γ die Eulersche Gammafunktion zur Verallgemeinerung der Fakultät, $\Gamma(n) = (n-1)!$. Diese Dichte wird auch durch die Mischung der Poisson-Verteilung, deren Parameter als gammaverteilte Zufallsvariable betrachtet wird, erzeugt. Dies erklärt die Bezeichnung als Poisson-Gamma-Regression, welche die Poisson-Regression erweitert.

Die Dichten gehören zur Exponentialfamilie mit

$$T(y) = y, \quad A(\theta) = \log(\theta), \quad B(\theta) = -a \log(1 - \theta), \quad C(y, \tau) = -\log \frac{\Gamma(y+a)}{\Gamma(a) y!}, \quad D(\tau) = 1.$$

Die natürliche Parametrisierung lässt sich wiederum durch $\tilde{\theta} = A(\theta) = \log(\theta)$ und $\tilde{B}(\tilde{\theta}) = -a \log(1 - \exp(\tilde{\theta}))$ erzeugen. Daraus lassen sich direkt die ersten beiden Ableitungen und die kanonische Linkfunktion bestimmen:

$$\tilde{B}'(\tilde{\theta}) = a \frac{\exp(\tilde{\theta})}{1 - \exp(\tilde{\theta})}, \quad \tilde{B}''(\tilde{\theta}) = a \frac{\exp(\tilde{\theta})}{(1 - \exp(\tilde{\theta}))^2}, \quad (\tilde{B}')^{-1}(\mu) = \log \frac{\mu}{a + \mu}$$

Für die Negativ-Binomial-Regression wird gewöhnlich aber nicht der kanonische Link, sondern der log-Link $h(\mu) = \log \mu$ verwendet. Aus (2.6) folgt direkt die Intensitätsfunktion

$$\lambda_{\text{NB}}(z) = \frac{(e^z)^2}{a \frac{\exp\left(\log \frac{e^z}{a + e^z}\right)}{\left(1 - \exp\left(\log \frac{e^z}{a + e^z}\right)\right)^2}} = \frac{(e^z)^2 \left(\frac{a}{a + e^z}\right)^2}{a \frac{e^z}{a + e^z}} = \frac{a e^z}{a + e^z} = \frac{\exp(z)}{1 + a^{-1} \exp(z)}.$$

Beispiel 2.3 (Logistische Regression)

Bei der logistischen Regression beziehungsweise dem Logit-Modell werden die unabhängigen Beobachtungen $Y(\mathbf{x}_i)$ zu den Versuchseinstellungen \mathbf{x}_i als Bernoulli-verteilt angenommen. Aufgrund der Unabhängigkeit ist auch hier wiederum die Betrachtung einer Versuchseinstellung \mathbf{x} ausreichend. Die diskrete Dichte der Bernoulli-Verteilung mit Erfolgswahrscheinlichkeit $\theta \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} f_{Y(\mathbf{x})}(y) &= P(Y(\mathbf{x}) = y) = \theta^y (1 - \theta)^{1-y} = \exp\left(\frac{y \log(\theta) + (1 - y) \log(1 - \theta)}{1}\right) \\ &= \exp\left(\frac{y \log\left(\frac{\theta}{1-\theta}\right) + \log(1 - \theta)}{1} + 0\right) \end{aligned}$$

gehört zur Exponentialfamilie mit

$$T(y) = y, \quad A(\theta) = \log\left(\frac{\theta}{1 - \theta}\right), \quad B(\theta) = -\log(1 - \theta), \quad C(y, \tau) = 0, \quad D(\tau) = 1.$$

Zur Herstellung einer natürlichen Parametrisierung $\tilde{\theta} = A(\theta) = \log\left(\frac{\theta}{1-\theta}\right)$ dient deren Inverse $A^{-1}(\tilde{\theta}) = \frac{\exp(\tilde{\theta})}{1+\exp(\tilde{\theta})}$. Daraus folgen

$$\tilde{B}(\tilde{\theta}) = \log\left(1 + \exp(\tilde{\theta})\right), \quad \tilde{B}'(\tilde{\theta}) = \frac{\exp(\tilde{\theta})}{1 + \exp(\tilde{\theta})}, \quad \tilde{B}''(\tilde{\theta}) = \frac{\exp(\tilde{\theta})}{\left(1 + \exp(\tilde{\theta})\right)^2}$$

und der kanonische Link

$$(\tilde{B}')^{-1}(\mu) = \log \frac{\mu}{1 - \mu},$$

welcher als *Logit-Link* bezeichnet wird. Die *logistische Regression* nutzt genau diesen Link, sodass sich aus (2.5) direkt die *Intensitätsfunktion*

$$\lambda_{\text{logit}}(z) = \frac{\exp(z)}{(1 + \exp(z))^2} \quad (2.7)$$

ablesen lässt.

Beispiel 2.4 (Probit-Modell)

Ähnlich der *logistischen Regression* bezieht sich das *Probit-Modell* auf *Bernoulli-verteilte*, *unabhängige Beobachtungen* $Y(\mathbf{x}_i)$ zu den *Versuchseinstellungen* \mathbf{x}_i . Hierbei wird aber als *Linkfunktion* nicht der *kanonische Link* (vergleiche *Beispiel 2.3*) verwendet. Es werden die *Eintrittswahrscheinlichkeit beziehungsweise der Erwartungswert* $E(Y(\mathbf{x}_i))$ gleich dem Wert der *Verteilungsfunktion der Standard-Normalverteilung* $\Phi(\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^\top \boldsymbol{\beta})$ gesetzt und so über den sogenannten *Probit-Link* $\mu \mapsto \Phi^{-1}(\mu)$ mit dem *linearen Prädiktor* verknüpft. Dabei sind $\phi: \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ mit $\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}z^2}$ und $\Phi: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ mit $\Phi(z) = \int_{(-\infty, z]} \phi(t) dt$ die *Dichtefunktion beziehungsweise Verteilungsfunktion der Standard-Normalverteilung*.

Auch hier lässt sich die *Intensitätsfunktion* mit (2.6) nun direkt ermitteln:

$$\lambda_{\text{probit}}(z) = \frac{\phi(z)^2}{\left(\frac{\exp\left(\log \frac{\Phi(z)}{1-\Phi(z)}\right)}{\left(1 + \exp\left(\log \frac{\Phi(z)}{1-\Phi(z)}\right)\right)^2}\right)} = \frac{\phi(z)^2 \left(1 + \frac{\Phi(z)}{1-\Phi(z)}\right)^2}{\frac{\Phi(z)}{1-\Phi(z)}} = \frac{\phi(z)^2}{\Phi(z)(1-\Phi(z))}. \quad (2.8)$$

Beispiel 2.5 (Komplementäres log-log-Modell)

Genau wie die *logistische Regression* und das *Probit-Modell* beruht das *komplementäre log-log-Modell* auf *Bernoulli-verteilten*, *unabhängigen Beobachtungen* $Y(\mathbf{x}_i)$ zu den

Versuchseinstellungen \mathbf{x}_i . Im Gegensatz zu diesen beiden Modellen wird hier als Linkfunktion h der sogenannte komplementäre log-log-Link $\mu \mapsto \log(-\log(1 - \mu))$ genutzt.

Wie im Probit-Modell lässt sich die Intensitätsfunktion mit (2.6) unter Zuhilfenahme von $h^{-1}(z) = 1 - \exp(-\exp(z))$ sowie $(h^{-1})'(z) = \exp(-\exp(z)) \exp(z)$ bestimmen:

$$\lambda_{\text{comp log log}}(z) = \frac{(\exp(-\exp(z)) \exp(z))^2}{\left(\frac{\exp\left(\log \frac{1-\exp(-\exp(z))}{1-(1-\exp(-\exp(z)))}\right)}{1 + \exp\left(\log \frac{1-\exp(-\exp(z))}{1-(1-\exp(-\exp(z)))}\right)} \right)^2} = \frac{\exp(2z)}{\exp(\exp(z)) - 1}.$$

Beispiel 2.6 (Lineare Regression)

Der Vollständigkeit halber soll hier noch die lineare Regression als Spezialfall der verallgemeinerten linearen Modelle erwähnt werden. Die unabhängigen Beobachtungen $Y(\mathbf{x}_i)$ werden als normalverteilt modelliert. Für die Versuchseinstellung \mathbf{x} wird der Erwartungswertparameter θ genutzt. Der Varianzparameter σ^2 sei bekannt und konstant in \mathbf{x} . Damit ergibt sich wiederum die Zugehörigkeit zur Exponentialfamilie, da die Dichte

$$f_{Y(\mathbf{x})}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y - \theta)^2}{\sigma^2}\right) = \exp\left(\frac{y\theta - \frac{1}{2}\theta^2}{\sigma^2} - \left(\log \sqrt{2\pi\sigma^2} + \frac{1}{2} \frac{y^2}{\sigma^2}\right)\right)$$

ist. T und A sind jeweils die Identität, sodass $B(\tilde{\theta}) = \tilde{B}(\tilde{\theta}) = \frac{1}{2}\tilde{\theta}^2$ ist. Daraus folgen $\tilde{B}'(\tilde{\theta}) = \tilde{\theta}$ und $\tilde{B}''(\tilde{\theta}) = 1$ sowie die Identität als kanonischer Link. Unter Verwendung des kanonischen Links ergeben sich die konstante Intensität $\lambda_{\text{lin}}(z) = \frac{1}{\sigma^2}$ und die Fisher-Information für eine Beobachtung zu

$$\mathbf{M}_{\text{lin}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top.$$

2.3 Versuchspläne

Ein essentieller Begriff der Versuchsplanung ist der Versuchsplan, auch Design genannt. Er lässt sich auf mehreren Verallgemeinerungsstufen definieren. Grundsätzlich gibt ein Versuchsplan die Versuchseinstellungen an, an denen das Experiment durchgeführt wird.

Das Tupel $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ heißt realer Versuchsplan oder Design zum Stichprobenumfang $n \in \mathbb{N}$ auf dem Versuchsbereich \mathcal{X} , wenn $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathcal{X}$ die Versuchseinstellungen

beziehungsweise Designpunkte sind. Dabei müssen die Versuchseinstellungen nicht zwingend paarweise verschieden sein. Werden in einem Design manche Einstellungen mehrfach ausgewertet, so kann das Design mit J verschiedenen Auswertungspunkten verkürzt geschrieben werden als:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_J \\ n_1 & \cdots & n_J \end{pmatrix} \text{ mit } \sum_{j=1}^J n_j = n \text{ und } n_1, \dots, n_J \in \mathbb{N} \text{ und } \mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j \ \forall i \neq j$$

Da in der Regel von unabhängigen Beobachtungen ausgegangen wird, lässt sich die gemeinsame Likelihood-Funktion als Produkt der einzelnen Likelihood-Funktionen der Beobachtungen darstellen. Damit ist die gemeinsame log-Likelihood-Funktion die Summe der einzelnen log-Likelihood-Funktionen und auch die Fisher-Informationsmatrix des Gesamtexperiments ergibt sich als Summe der Ein-Punkt-Informationsmatrizen der einzelnen Beobachtungen, vergleiche (2.2), zu

$$\sum_{j=1}^J n_j \mathbf{M}(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\beta}) . \quad (2.9)$$

Folglich hängt die Informationsmatrix auch nicht von der Reihenfolge der Beobachtungen ab.

Werden in einem nächsten Verallgemeinerungsschritt anstatt der absoluten Häufigkeiten n_1, \dots, n_J die relativen Häufigkeiten $\omega_j = \frac{n_j}{n}$ notiert, so beschreibt das Design

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_J \\ \frac{n_1}{n} & \cdots & \frac{n_J}{n} \end{pmatrix} \text{ mit } \sum_{j=1}^J n_j = n \text{ und } n_1, \dots, n_J \in \mathbb{N} \text{ und } \mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j \ \forall i \neq j$$

ein diskretes Wahrscheinlichkeitsmaß auf dem Versuchsbereich \mathcal{X} und geeigneter Sigma-Algebra \mathfrak{X} mit $\xi(\mathbf{x}_j) = \frac{n_j}{n} = \omega_j$ für $j \in \{1, \dots, J\}$. Diese Art des Versuchsplans wird exaktes Design genannt, da er mittels eines Stichprobenumfangs von n realisiert werden kann. Die entsprechende Sigma-Algebra ist zumeist die Borel'sche Sigma-Algebra zum Versuchsbereich \mathcal{X} und wird im weiteren Verlauf nicht mehr gesondert erwähnt.

Die standardisierte Fisher-Informationsmatrix für dieses Design, beruhend auf unabhängigen Beobachtungen, definiert sich ebenfalls aus den Ein-Punkt-Informationsmatrizen zu

$$\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^J n_j \mathbf{M}(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^J \frac{n_j}{n} \mathbf{M}(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\beta}) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) \xi(d\mathbf{x}) .$$

Bei der standardisierten Fisher-Informationsmatrix handelt es sich also um die Fisher-Informationsmatrix für ein reales Design, welche mit dem Faktor $\frac{1}{n}$ normiert wurde, woraus eine Unabhängigkeit vom Stichprobenumfang resultiert.

Zur Einbettung des eigentlich diskreten und ganzzahligen Problems in einen stetigen und reellwertigen Kontext, lassen sich die relativen Häufigkeiten im exakten Design durch beliebige, reellwertige Gewichte ω_j ersetzen. In

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_J \\ \omega_1 & \cdots & \omega_J \end{pmatrix} \text{ mit } \sum_{j=1}^J \omega_j = 1 \text{ und } \omega_1, \dots, \omega_J \in (0, 1] \text{ und } \mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j \forall i \neq j$$

bleibt weiterhin die Struktur eines Wahrscheinlichkeitsmaßes mit $\xi(\mathbf{x}_j) = \omega_j$ für $j \in \{1, \dots, J\}$ bestehen. Hier ergibt sich die standardisierte Informationsmatrix zu

$$\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) \xi(d\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^J \omega_j \mathbf{M}(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\beta}) . \quad (2.10)$$

Aus diesen sogenannten approximativen Designs lässt sich nicht zwingend ein exakter und folglich realer Versuchsplan konstruieren, denn es gibt nicht immer ein geeignetes $n \in \mathbb{N}$, sodass $n\omega_j \in \mathbb{N}$ für alle $j = 1, \dots, J$ ist. Für einen gegebenen Stichprobenumfang lässt sich die Anzahl von Auswertungen pro Versuchseinstellung somit häufig nur durch gewisses Runden generieren. Trotzdem sind diese Designs eine Möglichkeit Designpunkte und Gewichte analytisch statt ganzzahlig zu optimieren.

In einer abschließenden Abstraktionsebene, vergleiche Silvey (1980), kann die Forderung nach einer endlichen Anzahl von Versuchseinstellungen aufgegeben werden. Ein sogenanntes verallgemeinertes Design ξ ist ein beliebiges Wahrscheinlichkeitsmaß auf dem Versuchsbereich \mathcal{X} mit geeigneter Sigma-Algebra \mathfrak{X} . Die zugehörige standardisierte Fisher-Informationsmatrix ist

$$\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) \xi(d\mathbf{x}) .$$

Hieraus lassen sich folglich exakte und damit reale Designs noch schwieriger produzieren. Dennoch stellen diese Designs eine gute Basis dar, im Raum aller Designs zu optimieren, insbesondere wenn später von gewissen Invarianzen bezüglich spezieller Gruppen gesprochen wird.

Auch wenn das Erzeugen eines exakten Designs aus einem verallgemeinerten Design nicht trivial oder gar unmöglich ist, erlaubt der Satz von Carathéodory, vergleiche Silvey (1980, Seiten 16 und 72f), zumindest das Überführen des verallgemeinerten Designs in ein ap-

proximatives Design mit endlich vielen Versuchseinstellungen.

Die standardisierte Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})$ ist eine symmetrische, positiv semidefinite $p \times p$ -Matrix. Im Falle der multiplen Regression ist $p = k + 1$. Die Menge aller Informationsmatrizen für ein gegebenes $\boldsymbol{\beta}$ sei

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{\beta}) = \{ \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) : \xi \in \Xi_{\mathcal{X}} \},$$

wobei $\Xi_{\mathcal{X}}$ die Menge aller verallgemeinerten Designs ξ auf \mathcal{X} bezeichne. Die Menge $\mathcal{M}(\boldsymbol{\beta})$ ist die konvexe Hülle von $\{ \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top : \mathbf{x} \in \mathcal{X} \}$ mit den Ein-Punkt-Informationsmatrizen $\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$.

Sind der Versuchsbereich \mathcal{X} kompakt und die Regressionsfunktion \mathbf{f} sowie Intensitätsfunktion λ stetig, dann ist auch die Menge $\mathcal{M}(\boldsymbol{\beta})$ kompakt. Die Kompaktheit des Versuchsbereiches und die Stetigkeit der Regressionsfunktion sind bei der multiplen Regression auf der k -dimensionalen Kugel erfüllt. Die Stetigkeit der jeweiligen Intensitätsfunktion muss hingegen überprüft werden oder ist für bestimmte Modelle bereits bekannt.

Durch die Symmetrie der standardisierten Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})$ lässt sich diese als Punkt im $\mathbb{R}^{\frac{p(p+1)}{2}}$ repräsentieren, sodass nach Carathéodory höchstens $\frac{p(p+1)}{2} + 1$ Versuchseinstellungen \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, J$ mit $J \leq \frac{p(p+1)}{2} + 1$, nötig sind, um $\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})$ als Konvexkombination

$$\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^J \omega_j \mathbf{M}(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\beta})$$

mit $\omega_j \in (0, 1]$, $j = 1, \dots, J$, darzustellen.

Nach Carathéodory sind sogar $\frac{p(p+1)}{2}$ Versuchseinstellungen ausreichend, also ein Designpunkt weniger, sofern $\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})$ auf dem Rand von $\mathcal{M}(\boldsymbol{\beta})$ liegt.

Konkret für die multiple Regression auf der k -dimensionalen Kugel bedeutet dies, dass die (standardisierte) Informationsmatrix jedes verallgemeinerten Designs durch eine identische Informationsmatrix eines approximativen Designs, basierend auf höchstens $\frac{(k+1)(k+2)}{2} + 1$ Versuchseinstellungen, ersetzt werden kann. Nichtsdestotrotz werden im Verlauf dieser Arbeit einige Designprobleme aufgegriffen, deren optimales Design sogar nur auf der minimal möglichen Anzahl von Designpunkten, nämlich $k + 1$, beruht. Dabei ist $p = k + 1$ die Dimension des Parametervektors $\boldsymbol{\beta}$. Um diesen vollständig schätzen zu können muss die Informationsmatrix vollen Rang haben, also invertierbar sein. Aufgrund der Struktur der Informationsmatrix basierend auf endlich vielen Beobachtungen, vergleiche (2.10) in Verbindung mit (2.2), lässt sich dies nur mit mindestens $p = k + 1$ verschiedenen Versuchseinstellungen realisieren, die nicht in einem Unterraum niedrigerer Dimension liegen dürfen.

2.4 *D*-Optimalität

Die Rao-Cramér-Informationsungleichung bietet unter gewissen Regularitätsvoraussetzungen eine untere Schranke für die Kovarianzmatrix eines erwartungstreuen Schätzers $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ für $\boldsymbol{\beta}$ — die Inverse der Fisher-Informationsmatrix, vergleiche (2.9). Es gilt

$$\text{Cov}_{\boldsymbol{\beta}}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}) \succeq \left(\sum_{j=1}^J n_j \mathbf{M}(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\beta}) \right)^{-1}$$

im positiv semidefiniten Sinne, das heißt, es ist $A \succeq B$, sofern $A - B$ positiv semidefinit ist. Dabei wäre eigentlich eine obere Schranke für die Kovarianzmatrix wünschenswert, welche dann minimiert werden würde. Eine solche Schranke gibt es jedoch nicht.

Weiterhin ist unter geeigneten Regularitätsvoraussetzungen der Maximum-Likelihood-Schätzer für $\boldsymbol{\beta}$ asymptotisch effizient, sodass die asymptotische Kovarianzmatrix gleich der Inversen der Informationsmatrix ist.

Um optimale Versuchseinstellungen zum möglichst genauen Schätzen zu finden, bietet es sich an, dass die Inverse der Fisher-Informationsmatrix in gewisser Art und Weise minimiert beziehungsweise die Informationsmatrix maximiert werden.

Da ein konstanter Faktor $\frac{1}{n}$ vor der Informationsmatrix den Optimierungsprozess und das Ergebnis nicht verändert, kann im weiteren Verlauf auch auf die standardisierte Fisher-Informationsmatrix (2.10) zurückgegriffen werden.

Eine Besonderheit der hier betrachteten nichtlinearen Modelle, deren Informationsmatrix und somit auch deren optimale Designs ist, dass diese vom Wert der unbekannt Parameter beziehungsweise des unbekannt Parametervektors abhängen. Solche optimalen Designs $\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*$ unter der Annahme eines gegebenen Wertes $\boldsymbol{\beta}^0$ für den unbekannt Parameter $\boldsymbol{\beta}$ werden lokal optimal genannt. Diese Annahme geschieht in der Hoffnung, dass das so ermittelte Design möglichst wenig vom optimalen Design für den tatsächlichen Parameter abweicht.

Auf allgemeinen Matrizen besteht in der Regel keine Ordnung. Auf symmetrischen, positiv semidefiniten Matrizen, wie den Informationsmatrizen, kann eine Halbordnung im semidefiniten Sinne konstruiert werden, die sogenannte Löwner-Ordnung, vergleiche Pukelsheim (1993, Kapitel 4). Damit ergibt sich ein Löwner-optimales Design $\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*$, sofern es

$$\mathbf{M}(\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*, \boldsymbol{\beta}^0) \succeq \mathbf{M} \quad \forall \mathbf{M} \in \mathcal{M}(\boldsymbol{\beta}^0)$$

erfüllt. Dieses Konstrukt ist schwierig auswertbar und im Allgemeinen existiert keine Lösung für diese Ungleichung im semidefiniten Sinne. Deshalb wird es durch reellwertige Kriteriumsfunktionen φ auf den Informationsmatrizen ersetzt.

Eine Kriteriumsfunktion ist eine reellwertige Funktion $\varphi : \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq} \rightarrow \mathbb{R}$, die auf der Menge der positiv semidefiniten $p \times p$ -Matrizen $\mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq}$ operiert. Drei sinnvolle Eigenschaften dieser Funktionen seien nun kurz aufgeführt, vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.1.3).

Eine Funktion $\varphi : \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq} \rightarrow \mathbb{R}$ heißt positiv homogen, wenn

$$\varphi(\alpha \mathbf{M}) = \alpha \varphi(\mathbf{M}) \quad \forall \alpha > 0, \mathbf{M} \in \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq}$$

gilt. Sie heißt konkav bei

$$\varphi((1 - \alpha)\mathbf{M}_1 + \alpha\mathbf{M}_2) \geq (1 - \alpha)\varphi(\mathbf{M}_1) + \alpha\varphi(\mathbf{M}_2) \quad \forall \alpha \in (0, 1), \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2 \in \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq}$$

und streng konkav bei strikter Ungleichheit für alle positiv definiten Matrizen $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2 \in \mathbb{M}_{p \times p}^{\succ}$. Gilt

$$\varphi(\mathbf{M}_1) \geq \varphi(\mathbf{M}_2) \quad \forall \mathbf{M}_1 \succeq \mathbf{M}_2, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2 \in \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq},$$

so wird φ isoton bezüglich der Löwner-Ordnung genannt.

Wird als Kriteriumsfunktion eine isotone Funktion auf der Menge der positiv semidefiniten Matrizen gewählt, so ist zum Finden des φ -optimalen Designs $\xi_{\beta^0}^*$ nur das Maximierungsproblem

$$\varphi(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0)) \geq \varphi(\mathbf{M}) \quad \forall \mathbf{M} \in \mathcal{M}(\beta^0)$$

zu lösen, welches sich äquivalent auch einfach in ein Minimierungsproblem überführen lässt. Die Kompaktheit des Designraums \mathcal{X} und Stetigkeit der Regressionsfunktion, hier die k -dimensionale Kugel und multiple Regression, sichern, sofern die Intensitätsfunktion λ stetig ist, die Existenz optimaler Designs.

Es lassen sich viele Kriteriumsfunktionen φ definieren. In dieser Arbeit liegt aber der Fokus auf D -optimalen Designs. Die D -Optimalität ist eines der am meisten verwendeten Optimalitätskriterien in der Versuchsplanung — anschaulich minimiert ein D -optimales Design das Volumen des asymptotischen Konfidenzellipsoids für die unbekannt Parameter. Die Kriteriumsfunktion für die D -Optimalität ist die p -te Wurzel der Determinante der Informationsmatrix, also $\varphi(\cdot) = \det(\cdot)^{\frac{1}{p}}$. Diese Funktion ist positiv homogen, (streng)

konkav und isoton, vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.1.3). Somit ist ein Design $\xi_{\beta^0}^*$ (lokal) D -optimal, wenn

$$\det(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0))^{\frac{1}{p}} \geq \det(\mathbf{M})^{\frac{1}{p}} \quad \forall \mathbf{M} \in \mathcal{M}(\beta^0) .$$

Im Fall der hier betrachteten multiplen Regression im k -dimensionalen Raum ist die Dimension des unbekanntes Parametervektors β der Wert $p = k + 1$. Somit sind die Informationsmatrizen $(k + 1) \times (k + 1)$ -Matrizen.

Da die p -te Wurzel auf $[0, \infty)$ streng monoton ist, ist es eigentlich auch ausreichend nur die Determinante $\varphi(\cdot) = \det(\cdot)$ zu betrachten. Diese Funktion ist aber weder positiv homogen noch konkav, sondern nur isoton. Häufig wird auch der (natürliche) Logarithmus der Determinante der Informationsmatrix $\varphi(\cdot) = \log \det(\cdot)$ verwendet. Hier liegt zwar keine positive Homogenität, sondern nur Isotonie und (strenge) Konkavität vor, dafür lassen sich aber bei der Optimierung direkt leichter Ableitungen als bei $\varphi(\cdot) = \det(\cdot)^{\frac{1}{p}}$ ermitteln. Also ist $\xi_{\beta^0}^*$ ebenso (lokal) D -optimal, falls

$$\log \det(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0)) \geq \log \det(\mathbf{M}) \quad \forall \mathbf{M} \in \mathcal{M}(\beta^0)$$

ist. Diese Kriteriumsfunktion wird später in dieser Arbeit noch ausgiebig genutzt.

Bisher wurde nur über die Optimalität von Versuchsplänen gesprochen. Was ist aber, wenn es nur ein optimales verallgemeinertes Design gibt und sich daraus kein ebenso optimales exaktes Design konstruieren lässt oder sich das optimale Design nur schwer finden lässt und ein anderes Design, das nicht optimal ist, als Ersatzlösung verwendet werden muss? Um die Qualität eines solchen Designs beziehungsweise dessen Nähe zum optimalen Versuchsplan zu ermitteln, wird die Effizienz eingeführt. Für eine positiv homogene und isotone Kriteriumsfunktion φ lässt sich die Effizienz eines Designs ξ in Bezug zu einem (lokal) φ -optimalen (verallgemeinerten) Design $\xi_{\beta^0}^*$, sofern dieses existiert, als

$$\text{Eff}_{\varphi}(\xi, \beta^0) = \frac{\varphi(\mathbf{M}(\xi, \beta^0))}{\varphi(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0))} \in [0, 1]$$

definieren, vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.1.8).

Für die D -Optimalität erfüllt dies $\varphi(\cdot) = \det(\cdot)^{\frac{1}{p}}$. Damit ergibt sich die D -Effizienz zu

$$\text{Eff}_D(\xi, \beta^0) = \frac{\det(\mathbf{M}(\xi, \beta^0))^{\frac{1}{p}}}{\det(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0))^{\frac{1}{p}}} \in [0, 1] . \quad (2.11)$$

Wie bereits erwähnt liegt die Effizienz immer zwischen 0 und 1. Ein Design hat eine Effizienz von 1, wenn dessen Kriteriumsfunktion den gleichen Wert liefert wie die Kriteriumsfunktion angewendet auf das optimale Design. Also sind beide Designs gleich gut und damit optimal. Je kleiner der Wert der Effizienz ist, desto weiter ist das Design von der Optimalität entfernt. Eine Aussage, ein Design mit Effizienz 0.5 wäre nur *halb so gut* wie das optimale Design, ist hingegen irreführend. Aufgrund der positiven Homogenität lässt sich die Effizienz (bei einem Design mit endlicher Anzahl von Versuchseinstellungen) eher als Anteil von Beobachtungen interpretieren, die unter dem optimalen Design benötigt werden, um den gleichen Wert des Kriteriums für das auf Effizienz untersuchte Design zu erzielen. Für den Fall einer Effizienz von 0.5 würden unter dem optimalen Design nur halb so viele Beobachtungen benötigt.

2.5 Äquivalenzsatz

Sei $\varphi : \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq} \rightarrow \mathbb{R}$ eine reellwertige Kriteriumsfunktion auf der Menge aller positiv semidefiniten Matrizen. In der Designtheorie, vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.2.1) oder Silvey (1980, Abschnitt 3.5), wird die Richtungsableitung $F_{\varphi} : \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq} \times \mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq} \rightarrow \mathbb{R}$ in \mathbf{M}_1 aus Richtung $\mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_1$

$$F_{\varphi}(\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2) = \lim_{\alpha \searrow 0} \frac{1}{\alpha} (\varphi((1 - \alpha)\mathbf{M}_1 + \alpha\mathbf{M}_2) - \varphi(\mathbf{M}_1)) ,$$

sofern die rechte Seite existiert, definiert. Hierbei ist sichergestellt, dass $(1 - \alpha)\mathbf{M}_1 + \alpha\mathbf{M}_2$ für $\alpha \in [0, 1]$ sowohl in der konvexen Menge $\mathbb{M}_{p \times p}^{\succeq}$ als auch (noch wichtiger) innerhalb der konvexen Menge $\mathcal{M}(\boldsymbol{\beta})$ liegt.

In der Arbeit von Kiefer und Wolfowitz (1960) wurde erstmalig die Äquivalenz von zwei Optimalitätskriterien (D - und G -Optimalität) gezeigt und essentielle Grundlagen für die Bestimmung von optimalen Designs gelegt. Ihnen zu Ehren wird dieser Satz auch Äquivalenzsatz oder Äquivalenzsatz von Kiefer und Wolfowitz genannt, vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.2.2).

Satz 2.7 (Äquivalenzsatz)

Seien β^0 fest und die Kriteriumsfunktion φ konkav auf $\mathcal{M}(\beta^0)$. Das Design $\xi_{\beta^0}^*$ ist genau dann (lokal) φ -optimal in β^0 , wenn

$$F_\varphi(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0), \mathbf{M}) \leq 0 \quad \forall \mathbf{M} \in \mathcal{M}(\beta^0)$$

beziehungsweise (in anderer Notation)

$$\sup_{\mathbf{M} \in \mathcal{M}(\beta^0)} F_\varphi(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0), \mathbf{M}) = 0 .$$

Der Äquivalenzsatz besagt also, dass für eine konkave Funktion, die auf einer konvexen Menge definiert ist, das Supremum beziehungsweise (sofern existent) Maximum in einem Punkt (hier Design oder Informationsmatrix) angenommen wird, in dem in keine Richtung ein positiver Anstieg vorliegt.

Gilt zusätzlich, dass für jede (endliche) Konvexkombination $\sum_j \omega_j \mathbf{M}_j$ mit $\sum_j \omega_j = 1$

$$F_\varphi\left(\mathbf{M}, \sum_j \omega_j \mathbf{M}_j\right) = \sum_j \omega_j F_\varphi(\mathbf{M}, \mathbf{M}_j) \quad (2.12)$$

ist, so wird das Kriterium φ auch differenzierbar genannt, vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.2.1) und Silvey (1980, Abschnitt 3.5.2).

Durch (2.12) und dem Satz von Carathéodory lässt sich die Aussage des Äquivalenzsatzes (Satz 2.7) unter der zusätzlichen Voraussetzung der Differenzierbarkeit der Kriteriumsfunktion φ noch vereinfachter formulieren:

Das Design $\xi_{\beta^0}^*$ ist genau dann (lokal) φ -optimal in β^0 , wenn

$$F_\varphi\left(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0), \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \beta) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top\right) \leq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} . \quad (2.13)$$

Hierbei wird Gleichheit in den Designpunkten des optimalen Designs angenommen.

Speziell für die D -Optimalität mit der Kriteriumsfunktion $\varphi(\cdot) = \log \det(\cdot)$, welche isoton, (streng) konkav, aber nicht positiv homogen ist, ergibt sich die Richtungsableitung

$$\begin{aligned} F_{\log \det}(\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2) &= \text{Spur} \left((\mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_1) \mathbf{M}_1^{-1} \right) \\ &= \text{Spur} \left(\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^{-1} - \mathbb{I}_p \right) = \text{Spur} \left(\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \right) - p , \end{aligned}$$

vergleiche Pronzato und Pázman (2013, Abschnitt 5.2.1). Damit gilt unter Ausnutzung der Rechenregeln der Spur auch die Bedingung (2.12) für diese Kriteriumsfunktion, denn für $\mathbf{M}_2 = \sum_j \omega_j \mathbf{M}_{2,j}$ mit $\sum_j \omega_j = 1$ ist

$$\begin{aligned} F_{\log \det}(\mathbf{M}_1, \sum_j \omega_j \mathbf{M}_{2,j}) &= \text{Spur} \left(\left(\sum_j \omega_j \mathbf{M}_{2,j} \right) \mathbf{M}_1^{-1} \right) - p \\ &= \text{Spur} \left(\sum_j \omega_j \mathbf{M}_{2,j} \mathbf{M}_1^{-1} \right) - p = \sum_j \omega_j \text{Spur} \left(\mathbf{M}_{2,j} \mathbf{M}_1^{-1} \right) - p \\ &= \sum_j \omega_j \left(\text{Spur} \left(\mathbf{M}_{2,j} \mathbf{M}_1^{-1} \right) - p \right) = \sum_j \omega_j F_{\log \det}(\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_{2,j}) . \end{aligned}$$

Somit ist die Kriteriumsfunktion $\varphi(\cdot) = \log \det(\cdot)$ auch differenzierbar.

Für einen kompakten Versuchsbereich ergibt sich nun für die D -Optimalität mit $\varphi(\cdot) = \log \det(\cdot)$ unter Anwendung von (2.13) und den Rechenregeln der Spur der folgende Satz.

Satz 2.8 (Äquivalenzsatz für D -Optimalität)

Seien β^0 fest und der Versuchsbereich \mathcal{X} kompakt. Das Design $\xi_{\beta^0}^*$ ist genau dann (lokal) D -optimal in β^0 , wenn

$$p = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{M}^{-1}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0) \mathbf{f}(\mathbf{x}) .$$

Die Funktion $\psi : \mathcal{X} \times \Xi_{\mathcal{X}} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\psi(\mathbf{x}, \xi) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{M}^{-1}(\xi, \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (2.14)$$

wird Sensitivitätsfunktion genannt. Mit dieser Notation lässt sich der Äquivalenzsatz für die D -Optimalität formulieren als: Das Design $\xi_{\beta^0}^*$ ist genau dann (lokal) D -optimal in β^0 , wenn

$$\psi(\mathbf{x}, \xi_{\beta^0}^*) \leq p \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} .$$

Insbesondere wird wieder Gleichheit in den Designpunkten des optimalen Designs angenommen.

Zur Sensitivitätsfunktion von ξ für das (lokale) D -Kriterium in β^0 und zum Äquivalenzsatz für D -Optimalität sei noch angemerkt, dass diese nur für Designs mit regulärer Informationsmatrix definiert sind. Damit ist die Informationsmatrix hier nicht nur positiv semidefinit, sondern sogar positiv definit.

2.6 Algebraische Grundlagen: Gruppen und Isometrien

Zur Komplexitätsreduktion bei der Bestimmung von optimalen Designs werden Betrachtungen von Invarianzen und Äquivarianzen nützlich sein. Dabei stehen Transformationen des Versuchsbereichs und Parameterbereiches im Fokus. Diese Operationen bilden in der Regel Gruppen, wobei für Invarianzen zwingend Gruppen von Transformationen vorliegen müssen. Dabei wird jede nichtleere Menge G mit einer Verknüpfung $\circ : G \times G \rightarrow G$ als Gruppe bezeichnet, vergleiche Fischer (2002, Abschnitt 1.2), sofern Folgendes gilt:

- Es gibt ein neutrales Element $e \in G$, sodass $e \circ g = g \circ e = g$ für alle $g \in G$ gilt.
- Zu jedem $g \in G$ gibt es ein inverses Element $g^{-1} \in G$, sodass $g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$ gilt.
- Für alle $g_1, g_2, g_3 \in G$ gilt $(g_1 \circ g_2) \circ g_3 = g_1 \circ (g_2 \circ g_3)$. (Assoziativgesetz)

Im Folgenden wird häufig anstatt des Symbols \circ für die Verknüpfung $g_1 \circ g_2$ die multiplikative Schreibweise $g_1 g_2$ ohne das Symbol \circ verwendet.

Eine Teilmenge U einer Gruppe G heißt Untergruppe, falls U mit der Verknüpfung von G selbst eine Gruppe ist.

Seien G eine Gruppe und U eine Untergruppe von G . Die Äquivalenzrelation

$$g \sim g' \Leftrightarrow g^{-1}g' \in U \Leftrightarrow g' \in gU = \{gu : u \in U\} \quad (2.15)$$

definiert die Äquivalenzklassen beziehungsweise Linksnebenklassen gU mit $g \in G$. Analog gilt dies auch für die Rechtsnebenklassen Ug mit $g \in G$. Der Index von U in G ist die Anzahl der Links- beziehungsweise Rechtsnebenklassen und wird mit $|G : U|$ bezeichnet.

Seien G eine Gruppe und Ω eine Menge. Eine Gruppenoperation von G auf Ω ist die Menge aller Abbildungen $g : \Omega \rightarrow \Omega$, die

$$\begin{aligned} (g_1 g_2)(\omega) &= g_1(g_2(\omega)) & \forall g_1, g_2 \in G, \omega \in \Omega & \quad \text{und} \\ e(\omega) &= \omega & \forall \omega \in \Omega & \quad (e \text{ ist das neutrale Element in } G) \end{aligned}$$

erfüllen. Häufig wird auch hier statt der funktionalen Schreibweise $g(\omega)$ die Schreibweise $g\omega$ als multiplikative Linksoperation verwendet.

Operiert G auf Ω , so wird durch $\omega \sim \omega' \Leftrightarrow \exists g \in G : \omega' = g\omega$ eine Äquivalenzrelation

auf Ω definiert. Die Äquivalenzklassen heißen Orbits oder Bahnen der Gruppenoperation. Dabei ist $G\omega = \{g\omega : g \in G\}$ der Orbit, welcher ω enthält.

Im Falle der Designtheorie auf der k -dimensionalen Kugel wird als Menge Ω , auf der die Gruppenoperationen angewendet werden, der k -dimensionale \mathbb{R} -Vektorraum \mathbb{R}^k verwendet. Mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^k$ mit

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^k x_i y_i$$

und der daraus resultierenden 2-Norm $\|\cdot\| : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}$, auch euklidische Norm genannt, wird dieser zum euklidischen Vektorraum.

Besonders interessant sind Abbildungen oder Operationen auf dem euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^k , welche Winkel und Abstände erhalten. Eine (lineare) Abbildung g , welche

$$\langle g\mathbf{x}, g\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$$

erfüllt, also winkeltreu ist, heißt orthogonal. Da folglich für g auch $\|g\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$ gilt, handelt es sich um eine Isometrie, also eine Abbildung, die die Längen erhält. Umgekehrt ist jede lineare Abbildung $g : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$, die $\|g\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$ erfüllt, orthogonal. Vergleiche hierzu beispielsweise Fischer (2002, Abschnitt 5.5) oder Huppert und Willems (2006, Abschnitt 9.1).

Bevor die Menge aller Isometrien auf \mathbb{R}^k betrachtet werden kann, seien zunächst noch folgende Notationen gegeben, die sowohl in diesem als auch in den nächsten Kapiteln verwendet werden.

Notation 2.9

Der d -dimensionale Nullvektor wird mit $\mathbb{0}_d$ bezeichnet. $\mathbb{O}_{d_1 \times d_2}$ beschreibt die $d_1 \times d_2$ -dimensionale Nullmatrix. $\mathbb{1}_d$ ist der d -dimensionale Einser-Vektor und \mathbb{I}_d die $d \times d$ -dimensionale Einheitsmatrix. Die Identitätsfunktion wird mit id notiert. $\mathbf{e}_{d,i}$ ist der d -dimensionale Einheitsvektor mit 1 in der i -ten Komponente.

Die Menge aller Isometrien auf dem euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^k bildet die orthogonale Gruppe $O(k)$. Da sich jede lineare Abbildung $\mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ durch eine Matrix im $\mathbb{R}^{k \times k}$

repräsentieren lässt, wird häufig auch die Menge aller reellwertigen, orthogonalen $k \times k$ -Matrizen

$$O(k) = \{ \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{k \times k} : \mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \mathbb{I}_k \}$$

als orthogonale Gruppe bezeichnet. Auch in dieser Arbeit werden beide Begriffe ineinander übergehen.

Ist $\mathbf{A} \in O(k)$, so gilt für die Determinante $\det(\mathbf{A}) \in \{-1, 1\}$. Die Menge der orthogonalen Abbildungen beziehungsweise Matrizen mit Determinante 1 ist eine Untergruppe der $O(k)$ und bildet die sogenannte spezielle orthogonale Gruppe $SO(k)$. Es ist der Index $|O(k) : SO(k)| = 2$ und für jedes $\mathbf{A} \in O(k)$ mit $\det(\mathbf{A}) = -1$ ist

$$O(k) = SO(k) \dot{\cup} \mathbf{A} SO(k) .$$

Weiterhin sei folgende wichtige Eigenschaft von orthogonalen Abbildungen angegeben, vergleiche Huppert und Willems (2006, Abschnitt 9.1). Sei dazu $\mathbf{A} \in O(k)$. Dann existiert eine orthogonale Zerlegung

$$\mathbb{R}^k = V_1 \perp \dots \perp V_\ell \quad \text{mit} \quad \ell \leq k$$

des euklidischen Vektorraumes in Untervektorräume mit $\mathbf{A} V_j = V_j$. Dabei liegt einer der folgenden Fälle vor:

- V_j ist eindimensional mit Basis $\{\mathbf{v}_j\}$ und

$$\mathbf{A} \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_j \quad (2.16) \quad \text{oder} \quad \mathbf{A} \mathbf{v}_j = -\mathbf{v}_j \quad (2.17)$$

- V_j ist zweidimensional und für jede Orthonormalbasis $\{\mathbf{v}_{j1}, \mathbf{v}_{j2}\}$ von V_j gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \mathbf{v}_{j1} &= \cos(\varphi_j) \mathbf{v}_{j1} + \sin(\varphi_j) \mathbf{v}_{j2} \\ \mathbf{A} \mathbf{v}_{j2} &= -\sin(\varphi_j) \mathbf{v}_{j1} + \cos(\varphi_j) \mathbf{v}_{j2} \end{aligned} \quad (2.18)$$

mit $0 < \varphi_j < \pi$. Insbesondere ist $\det(\mathbf{A}|_{V_j}) = 1$. Dabei ist $\mathbf{A}|_{V_j}$ die Einschränkung von \mathbf{A} auf den Untervektorraum V_j mit $\mathbf{A}|_{V_j} \mathbf{v} = \mathbf{A} \mathbf{v}$ für alle $\mathbf{v} \in V_j$, vergleiche Huppert und Willems (2006, Definition 3.1.9).

Dies bedeutet, dass sich jede orthogonale Abbildung aus Identitäten (2.16), Spiegelungen (2.17) und Rotationen (2.18) auf Untervektorräumen zusammensetzt. Trotzdem werden im späteren Verlauf dieser Arbeit teilweise Designs als rotationsinvariant bezeichnet, auch wenn die zugrundeliegende Transformationsgruppe nicht ausschließlich auf Rotationen beruht.

Die orthogonale Gruppe $O(k)$ und die spezielle orthogonale Gruppe $SO(k)$ sind sogenannte Lie-Gruppen. Dies sind (reelle) analytische Mannigfaltigkeiten, die zusätzlich die Struktur einer Gruppe besitzen. Dabei müssen die Gruppenverknüpfung und die Inversenbildung wiederum analytisch sein. Häufig wird auch von einer glatten Mannigfaltigkeit mit Gruppenstruktur gesprochen, deren Verknüpfung und Inversenbildung beliebig oft differenzierbar sind. Vergleiche dazu beispielsweise Wijsman (1990, Abschnitt 5.1).

Alle Lie-Gruppen wiederum sind lokal kompakte Gruppen. Dies sind Gruppen, die mit einer Topologie versehen sind und bei denen jeder Punkt (jedes Gruppenelement) eine Umgebungsbasis aus kompakten Mengen besitzt. Somit sind insbesondere $O(k)$ und $SO(k)$ lokal kompakte Gruppen.

Für diese Arbeit sind Untergruppen der orthogonalen beziehungsweise speziellen orthogonalen Gruppe wichtig, die jeweils die erste Komponente der zu transformierenden Vektoren festhalten. Dies wird nun kurz definiert.

Definition 2.10

Es sei

$$O(k; 1) = \{ \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{k \times k} : \mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \mathbb{I}_k \text{ und } \mathbf{A} \mathbf{e}_{k,1} = \mathbf{e}_{k,1} \}$$

die orthogonale Gruppe des k -dimensionalen euklidischen Raumes, die nur auf den Komponenten x_2, \dots, x_k operiert und die x_1 -Komponente unverändert lässt. Analog ergibt sich die spezielle orthogonale Gruppe nur auf den Komponenten x_2, \dots, x_k zu

$$SO(k; 1) = SO(k) \cap O(k; 1) .$$

Aus $\mathbf{A} \mathbf{e}_{k,1} = \mathbf{e}_{k,1}$ lässt sich ablesen, dass die erste Spalte von \mathbf{A} die Gestalt des ersten Einheitsvektors $\mathbf{e}_{k,1}$ haben muss. Aber auch die erste Zeile hat diese Form, denn

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{e}_{k,1} = \mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{e}_{k,1} = \mathbb{I}_k \mathbf{e}_{k,1} = \mathbf{e}_{k,1} .$$

Damit lässt sich anschaulicher schreiben:

$$\begin{aligned} O(k; 1) &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_{k-1}^\top \\ \mathbb{O}_{k-1} & \mathbf{B} \end{pmatrix} : \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times (k-1)} \text{ und } \mathbf{B}^\top \mathbf{B} = \mathbb{I}_{k-1} \right\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_{k-1}^\top \\ \mathbb{O}_{k-1} & \mathbf{B} \end{pmatrix} : \mathbf{B} \in O(k-1) \right\} \end{aligned}$$

Bemerkung 2.11

Der Orbit der orthogonalen Gruppe $O(k)$ für $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)^\top \in \mathbb{R}^k$ ist die Sphäre

$$O(k)\mathbf{x} = \{g\mathbf{x} : g \in O(k)\} = \mathbb{S}_{k-1}(\|\mathbf{x}\|) .$$

Es handelt sich also um die Menge aller Punkte, die zum Ursprung \mathbb{O}_k den gleichen Abstand, nämlich $\|\mathbf{x}\|$, haben. Für die Orbits der speziellen orthogonalen Gruppe gilt ebenfalls $SO(k)\mathbf{x} = \mathbb{S}_{k-1}(\|\mathbf{x}\|)$.

Bei den Gruppen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$ ist dies etwas komplizierter. Hier bleibt zwar auch der Abstand zum Ursprung \mathbb{O}_k konstant, nur liegt der Orbit ausschließlich in der Hyperebene, die x_1 fixiert. Somit ist auch der Abstand dieser Punkte zum Punkt $(x_1, 0, \dots, 0)^\top$ konstant $\sqrt{x_2^2 + \dots + x_k^2}$, also

$$O(k; 1)\mathbf{x} = \mathbb{S}_{k-1}(\|\mathbf{x}\|) \cap \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k : y_1 = x_1\} = \{x_1\} \times \mathbb{S}_{k-2} \left(\sqrt{x_2^2 + \dots + x_k^2} \right) .$$

Für $SO(k; 1)$ gilt analog $SO(k; 1)\mathbf{x} = \{x_1\} \times \mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{x_2^2 + \dots + x_k^2})$.

Abschließend sei hier noch auf eine später häufig verwendete orthogonale Matrix eingegangen, die Householder-Matrix.

Für jeden sogenannten Householder-Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^k$ beschreibt

$$\mathbf{H} = \mathbb{I}_k - \frac{2}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} \mathbf{v} \mathbf{v}^\top \tag{2.19}$$

eine orthogonale und symmetrische Spiegelmatrix, die Householder-Matrix. Für ein gegebenes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$ ist $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$ die Spiegelung von \mathbf{x} an der Hyperebene $\text{span}\{\mathbf{v}\}^\perp = \{\mathbf{v}\mathbf{v} : \mathbf{v} \in \mathbb{R}\}^\perp = \{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^k : \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 0\}$, die durch die Menge aller zu \mathbf{v} orthogonalen Vektoren gebildet wird. Siehe Quarteroni et al. (2002, Abschnitt 5.6).

Normalerweise werden Matrizen dieser Form häufig in der numerischen Mathematik und insbesondere dort bei einer effizienten Implementation der QR-Zerlegung verwendet. Hier hingegen werden sie nur als Hilfsmittel dienen, um einen regulären Simplex in eine bestimmte Hyperebene zu legen.

3 Invarianz und Äquivarianz

Nachdem im Kapitel 2 die Grundlagen der Designtheorie aufgezeigt wurden, werden im nun folgenden Kapitel die Begriffe Invarianz und Äquivarianz definiert und deren Anwendung auf Versuchspläne sowie deren Optimierung dargestellt. Dabei wird immer wieder Bezug zu den Ausführungen, Definitionen und Sätzen aus Schwabe (1996, Seite 20 bis 23) und der eigenen Veröffentlichung Radloff und Schwabe (2016) genommen.

Beide Begriffe basieren auf der bijektiven Abbildung $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$, die den Versuchsbereich \mathcal{X} in einen „anderen“ Versuchsbereich \mathcal{Z} transformiert. Dabei müssen die beiden Versuchsbereiche im gleichen k -dimensionalen euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^k eingebettet sein, also $\mathcal{X}, \mathcal{Z} \subseteq \mathbb{R}^k$. So lässt sich beispielsweise die k -dimensionale Einheitskugel $\mathcal{X} = \mathbb{B}_k$ auf eine beliebige k -dimensionale Kugel $\mathcal{Z} = \mathbb{B}_k(r)$ mit $r > 0$ (Skalierung) oder sogar einen beliebigen k -dimensionalen Ellipsoiden

$$\mathcal{Z} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^k : \frac{x_1^2}{r_1^2} + \dots + \frac{x_k^2}{r_k^2} \leq 1 \right\}$$

mit den Halbachsen $r_1, \dots, r_k > 0$ überführen. Im gleichen Sinn sind auch orthogonale Abbildungen für g möglich, wobei hier beide Versuchsbereiche identisch sind ($\mathcal{X} = \mathcal{Z}$).

Für die folgende Definition der sogenannten lineare Transformation der Regressionsfunktion muss deshalb der bisherige Definitionsbereich der Regressionsfunktion $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^p$ auf $\mathcal{X} \cup \mathcal{Z}$ erweitert werden.

Definition 3.1

Eine bijektive Abbildung $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$ induziert eine lineare Transformation der Regressionsfunktion $f : \mathcal{X} \cup \mathcal{Z} \rightarrow \mathbb{R}^p$, sofern für g eine reguläre $p \times p$ -Matrix Q_g mit

$$f(g(\mathbf{x})) = Q_g f(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} \tag{3.1}$$

existiert.

Die Transformation \mathbf{g} operiert nicht nur auf dem Versuchsbereich \mathcal{X} , sondern kann auch ein Design ξ auf \mathcal{X} verändern. Dies führt zum Begriff des induzierten Designs.

Definition 3.2

Durch

$$\xi^{\mathbf{g}}(A) = \xi(\mathbf{g}^{-1}(A)) \quad \forall A \subseteq \mathcal{Z} \text{ messbar}$$

wird das induzierte Design $\xi^{\mathbf{g}}$ bestimmt.

Dabei ist das induzierte Design $\xi^{\mathbf{g}}$ aufgrund des Maßübertragungssatzes wiederum ein Maß mit geeigneter Sigma-Algebra, nämlich das Bildmaß von ξ unter \mathbf{g} , und damit ein Design auf \mathcal{Z} , vergleiche Elstrodt (2007, Seite 87).

3.1 Äquivarianz

Im folgenden Unterkapitel wird wie bereits in (2.2) gefordert, dass die Ein-Punkt-Informationsmatrix die Form

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$$

hat. Dabei ist wiederum $\lambda : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die Intensitätsfunktion, welche hier nur vom Wert des linearen Prädiktors $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$ abhängt.

Induziert die bijektive Abbildung $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$ eine lineare Transformation der Regressionsfunktion \mathbf{f} , also existiert eine $p \times p$ -Matrix $\mathbf{Q}_{\mathbf{g}}$ mit $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{Q}_{\mathbf{g}} \mathbf{f}(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, so wäre es wünschenswert, wenn der Wert des linearen Prädiktors unverändert wäre. Diese Situation lässt sich herstellen, indem nicht nur der Versuchsbereich \mathcal{X} transformiert wird, sondern in analoger Art und Weise auch der Parameterbereich \mathcal{B} .

Normalerweise müsste bei dieser Transformation hier auch zwischen Parameterbereich \mathcal{B} und transformiertem Parameterbereich unterschieden werden, wobei diese wiederum im gleichen p -dimensionalen euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^p eingebettet sein müssten. Da in der Versuchsplanung bei vielen, insbesondere den hier betrachteten, Modellen häufig keine konkreten Anforderungen an die Form des Parameterbereiches gestellt werden, kann auch hier wie bei der Modellspezifikation im Abschnitt 2.1 der Einfachheit halber $\mathcal{B} = \mathbb{R}^p$ oder

spezieller für die multiple Regression $\mathcal{B} = \mathbb{R}^{k+1}$ gesetzt werden. Folglich sei $\tilde{\mathbf{g}} : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ die nötige Transformation, die

$$\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$$

erfüllt. Sofern $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$ eine lineare Transformation der Regressionsfunktion \mathbf{f} induziert, stellt

$$\tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta} \quad (3.2)$$

eine solche Transformation für die reguläre Matrix \mathbf{Q}_g dar, denn

$$\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}))^\top (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{Q}_g^\top (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}.$$

Solch ein Verhalten wird als Äquivarianz bezeichnet.

Eine Transformation des Versuchsbereiches zieht ebenso eine Transformation der Designpunkte des Versuchsplans nach sich. Aber wie ändern sich die Informationsmatrix und der Wert der Kriteriumsfunktion, wenn nun die Äquivarianz ausgenutzt wird und zusätzlich die Parametervektoren wie in (3.2) mittransformiert werden?

Lemma 3.3

Induziert die bijektive Abbildung $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$ eine lineare Transformation der Regressionsfunktion \mathbf{f} und ist $\tilde{\mathbf{g}} : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ die zugehörige Transformation des Parameterbereiches aus (3.2), so ist

$$\mathbf{M}(\xi^g, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta})) = \mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g^\top$$

die entsprechende Fisher-Informationsmatrix.

Beweis. Es ist

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\xi^g, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta})) &= \int_{\mathcal{Z}} \mathbf{M}(\mathbf{z}, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta})) \xi^g(d\mathbf{z}) \\ &= \int_{\mathcal{Z}} \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{z})^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta})) \mathbf{f}(\mathbf{z}) \mathbf{f}(\mathbf{z})^\top \xi^g(d\mathbf{z}) \\ &= \int_{\mathcal{X}} \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta})) \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \xi(d\mathbf{x}) \\ &= \int_{\mathcal{X}} \lambda((\mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}))^\top (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}) (\mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}))^\top \xi(d\mathbf{x}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathcal{X}} \lambda \left(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{Q}_g^\top (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta} \right) \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{Q}_g^\top \xi(d\mathbf{x}) \\
&= \int_{\mathcal{X}} \lambda \left(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta} \right) \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{Q}_g^\top \xi(d\mathbf{x}) \\
&= \mathbf{Q}_g \int_{\mathcal{X}} \lambda \left(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta} \right) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \xi(d\mathbf{x}) \mathbf{Q}_g^\top \\
&= \mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g^\top . \quad \square
\end{aligned}$$

Ein Optimalitätskriterium φ wird als äquivariant bezüglich einer Transformation $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Z}$ des Versuchsbereichs und der korrespondierenden Transformation $\tilde{\mathbf{g}} : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ des Parameterbereiches bezeichnet, sofern eine Konstante $c_g > 0$ existiert und

$$\varphi(\mathbf{M}(\xi^g, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}))) = c_g \varphi(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})) \quad \text{für alle } \xi \in \Xi_{\mathcal{X}} ,$$

also $\varphi(\mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g^\top) = c_g \varphi(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}))$ für alle $\xi \in \Xi_{\mathcal{X}}$ gilt.

Im speziellen Fall der D -Optimalität existiert für alle invertierbaren linearen Abbildungen \mathbf{g} , repräsentiert durch \mathbf{Q}_g , diese Konstante in Form von $c_g = \det(\mathbf{Q}_g)^2 > 0$.

Die Äquivarianz überträgt sich auch auf die lokale Optimalität, da hier die Informationsmatrix vom Parametervektor $\boldsymbol{\beta}$ abhängt. Daraus ergibt sich als Konsequenz: Ist $\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*$ ein lokal optimales Design auf \mathcal{X} für $\boldsymbol{\beta}^0$ bezüglich φ , dann ist $(\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*)^g$ lokal optimal auf \mathcal{Z} für $\tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}^0)$ und umgekehrt. Anderenfalls würde, wenn ein besseres Design $\tilde{\xi}$ für $\tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}^0)$ existiert, $(\tilde{\xi})^{g^{-1}}$ ein besseres Design für $\boldsymbol{\beta}^0$ sein; ein Widerspruch. Somit ist die lokale Optimalität im Allgemeinen nicht invariant.

Der Begriff der Invarianz wird im Folgenden in vielen seiner Facetten erläutert.

3.2 Invarianz, invariante Maße und Designs

Nach dem Begriff der Äquivarianz ist auch der Begriff der Invarianz essentiell, um die Komplexität bei der Bestimmung von (lokal) optimalen Designs zu reduzieren. Bevor invariante Maße und Designs im Fokus liegen, wird zunächst die Invarianz von Optimalitätskriterien betrachtet.

Grundsätzlich unterscheidet sich die Äquivarianz, die sich nur auf eine einzelne bijektive Abbildung $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ bezieht, von der Invarianz, die immer bezüglich einer Gruppe G von bijektiven Transformationen $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ Anwendung findet. Hierbei sei auf einen identischen Werte- und Definitionsbereich hingewiesen, da anderenfalls keine Verkettungen der Gruppenelemente, den bijektiven Abbildungen, möglich wären.

Induziert jede Transformation $\mathbf{g} \in G$ eine lineare Transformation der Regressionsfunktion $\mathbf{f} : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^p$, also existiert für jedes \mathbf{g} eine reguläre $p \times p$ -Matrix \mathbf{Q}_g mit

$$\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} ,$$

so induziert die Gruppe G lineare Transformationen der Regressionsfunktion \mathbf{f} . Ferner ist dann auch $\{\mathbf{Q}_g : \mathbf{g} \in G\}$ eine Gruppe mit $\mathbf{Q}_{g^{-1}} = \mathbf{Q}_g^{-1}$.

Folglich wird wie bei der Äquivarianz auch der Parameterbereich \mathcal{B} durch ein geeignetes $\tilde{\mathbf{g}} : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ mittransformiert, sodass $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$ ist. Wie in (3.2) ist dann $\tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta}$.

Aus der Definition der Äquivarianz von Optimalitätskriterien lässt sich direkt deren Invarianz ableiten. Ein Optimalitätskriterium φ wird als invariant bezüglich einer Gruppe G von Transformationen $\mathbf{g} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ des Versuchsbereichs und der korrespondierenden Transformationen $\tilde{\mathbf{g}} : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ des Parameterbereiches bezeichnet, sofern $c_g = 1$ für alle $\mathbf{g} \in G$ ist, also

$$\varphi(\mathbf{M}(\xi^g, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}))) = \varphi(\mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g^\top) = \varphi(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})) \quad \forall \mathbf{g} \in G .$$

Im Falle von linearen Modellen, bei denen keine Abhängigkeit der Informationsmatrix vom zuvor gewählten Parametervektor besteht, ergibt sich $\mathbf{M}(\xi^g) = \mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi) \mathbf{Q}_g^\top$ und $\varphi(\mathbf{M}(\xi^g)) = \varphi(\mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi) \mathbf{Q}_g^\top) = \varphi(\mathbf{M}(\xi))$. Bei linearen Modellen ist bekannt, welche Bedingungen die transformierenden Matrizen \mathbf{Q}_g beziehungsweise die ganze Gruppe G erfüllen müssen, um den Wert der Kriteriumsfunktion unverändert zu lassen. So ist es zum Beispiel im speziellen Fall der D -Optimalität ausreichend, wenn unimodulare Matrizen \mathbf{Q}_g vorliegen. Dies sind Matrizen mit Determinante -1 oder 1 und gehören folglich zur orthogonalen Gruppe. Aber genau dieses Verhalten ist auch bei den nichtlinearen Modellen erforderlich.

Aber wie sieht es konkret bei den nichtlinearen multiplen Regressionsmodellen, die (2.1) und (2.2) erfüllen, aus?

Bemerkung 3.4

Das D -Kriterium ist invariant in Bezug auf orthogonale Abbildungen, das heißt, für jede orthogonale Abbildung $\mathbf{g} : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ existiert eine Transformation $\tilde{\mathbf{g}}$ auf $\boldsymbol{\beta}$ derart, dass $\det(\mathbf{M}(\xi^{\mathbf{g}}, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}))) = \det(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}))$. Diese wird nun näher spezifiziert. Zu jeder orthogonalen Abbildung \mathbf{g} existiert eine eindeutige (orthogonale) Matrix \mathbf{R}_g , $\det(\mathbf{R}_g) = \pm 1$, sodass $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{R}_g \mathbf{x}$ erfüllt ist. Dann wird

$$\mathbf{Q}_g = \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \mathbf{R}_g \end{pmatrix}$$

definiert. \mathbf{Q}_g ist dabei wiederum eine orthogonale $(k+1) \times (k+1)$ -Matrix mit Determinante ± 1 , da $\det(\mathbf{Q}_g) = \det(\mathbf{R}_g)$, sodass $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x})$ mit $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (1, x_1, \dots, x_k)^\top$, der Regressionsfunktion der multiplen Regression, ist. Mit der korrespondierenden orthogonalen Abbildung $\tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{Q}_g \boldsymbol{\beta}$, wobei die letzte Gleichheit aufgrund der Orthogonalität gilt, ergibt sich $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$.

Als Informationsmatrix von $\xi^{\mathbf{g}} = \xi \circ \mathbf{g}^{-1}$ ergibt sich dann $\mathbf{M}(\xi^{\mathbf{g}}, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta})) = \mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g^\top$ und es ist

$$\det(\mathbf{M}(\xi^{\mathbf{g}}, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}))) = \det(\mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) \mathbf{Q}_g^\top) = \det(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})) .$$

Da zu den orthogonalen Abbildungen, wie bereits im Abschnitt 2.6 beschrieben, vor allem Rotationen zählen, wird hier häufig nur von Rotationsäquivalenz gesprochen. Dies bedeutet: Wenn das Design oder der Versuchsbereich rotiert wird, dann muss auch der Parameterraum auf beschriebener Art und Weise mitrotiert werden.

Bei der Herleitung der optimalen Designs in den folgenden Kapiteln wird aber eher die umgekehrte Richtung angewendet. Aus einer Transformation, hier orthogonalen Abbildung, des Parameterbereiches lässt sich die korrespondierende Transformation des Versuchsbereiches und damit des Designs bestimmen.

Nachdem nun der Begriff der invarianten Kriteriumsfunction besprochen wurde, stellen sich die Fragen, ob es auch invariante Designs gibt und wie diese bei der Komplexitätsreduktion helfen.

Da sich aus jedem Design in gewisser Art und Weise invariante Designs, sogenannte symmetrisierte Designs, konstruieren lassen und diese zumindest nicht schlechter als die Ursprungsdesigns sind, kann die Suche des optimalen Designs in der Menge der invarianten Designs erfolgen. Natürlich ließen sich gegebenenfalls weitere Designs konstruieren, die ebenfalls optimal sind. Doch mit der Bestimmung eines optimalen Designs ist das eigentliche Ziel erreicht.

Dabei wird ein Design ξ beziehungsweise ein Wahrscheinlichkeitsmaß als invariant unter einer Gruppe G bezeichnet, sofern

$$\xi^g = \xi \quad \forall g \in G$$

ist.

Auf der k -dimensionalen Einheitskugel \mathbb{B}_k lässt sich recht schnell ein Borel-Wahrscheinlichkeitsmaß $\mu_{\mathbb{B}_k}$ konstruieren, welches invariant unter der orthogonalen Gruppe $O(k)$ und der speziellen orthogonalen Gruppe $SO(k)$ ist:

$$\mu_{\mathbb{B}_k}(A) = \frac{\mu_{\text{Lebesgue}}^k(A \cap \mathbb{B}_k)}{\mu_{\text{Lebesgue}}^k(\mathbb{B}_k)} \quad \forall A \text{ Borel-Menge in } \mathbb{R}^k .$$

Dabei beschreibt μ_{Lebesgue}^k das Lebesgue-Maß eingebettet im k -dimensionalen euklidischen Vektorraum.

Dieses Verfahren lässt sich leider nicht auf die $(k-1)$ -dimensionale Mannigfaltigkeit der Sphäre \mathbb{S}_{k-1} verallgemeinern. Eine Möglichkeit besteht aber darin, die Fläche auf der Sphäre als entsprechenden Kugelsektor zu betrachten und diesen ins Verhältnis zum Kugelvolumen zu setzen. Demzufolge ist

$$\mu_{\mathbb{S}_{k-1}}(A) = \frac{\mu_{\text{Lebesgue}}^k(\{t\mathbf{x} : \mathbf{x} \in A \cap \mathbb{S}_{k-1}, t \in [0, 1]\})}{\mu_{\text{Lebesgue}}^k(\mathbb{B}_k)} \quad \forall A \text{ Borel-Menge in } \mathbb{R}^k . \quad (3.3)$$

Somit sind in gewisser Art und Weise sowohl eine Gleichverteilung auf der Einheitskugel als auch auf der Einheitssphäre angegeben. Durch geeignete Skalierung lassen sich diese Maße auch auf Sphären und Kugeln beliebigen Radius $r > 0$ überführen,

$$\mu_{\mathbb{S}_{k-1}(r)} \quad \text{und} \quad \mu_{\mathbb{B}_k(r)} . \quad (3.4)$$

Aber nicht immer lassen sich direkt invariante Maße bezüglich einer Gruppe G angeben. Ist die Gruppe G endlich, also $|G| < \infty$, so lässt sich das symmetrisierte Design $\bar{\xi}$ bezüglich G als

$$\bar{\xi} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \xi^g \quad (3.5)$$

definieren. Dabei ist das symmetrisierte Design $\bar{\xi}$ wiederum ein Design und ist invariant bezüglich der Gruppe G . Der Beweis dazu wurde beispielsweise in Schwabe (1996, Seite 21) erbracht.

Um eine Verallgemeinerung dieser symmetrisierten Designs für unendliche Gruppen zu definieren sind noch zwei essentielle Begriffe und deren Eigenschaften einzuführen.

Zum Ersten wird ein Maß μ auf der Gruppe G als linksseitig invariant beziehungsweise als ein linksseitiges Haar-Maß bezeichnet, wenn

$$\mu(gH) = \mu(H) \quad \text{für alle } g \in G \text{ und } H \subseteq G \text{ messbar}$$

ist. Für jede lokal kompakte Gruppe G , worunter auch die orthogonale Gruppe $O(k)$ und die spezielle orthogonale Gruppe $SO(k)$ zählen, existiert ein von null verschiedenes, bis auf einen konstanten reellen Faktor eindeutiges, linksseitiges Haar-Maß, vergleiche Wijsman (1990, Abschnitt 7.1). Folglich ist auch das zugehörige Wahrscheinlichkeitsmaß eindeutig. In Christensen (1970) wird demonstriert, dass sich das Haar-Maß insbesondere der Gruppen $O(k)$ und $SO(k)$ bis auf einen positiven Faktor genauso verhält wie die Gleichverteilung $\mu_{\mathbb{S}_{k-1}}$ auf der Einheitskugel. Die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsmaße $\mu_{O(k)}$ und $\mu_{SO(k)}$ sind dann wieder identisch.

Zum Zweiten bildet $\kappa : \Omega_1 \times \mathfrak{A}_2 \rightarrow [0, 1]$ mit den beiden Messräumen $(\Omega_1, \mathfrak{A}_1)$ und $(\Omega_2, \mathfrak{A}_2)$ einen stochastischen Kern oder Markov-Kern, sofern

- (i) $\kappa(\cdot, A_2)$ für jedes $A_2 \in \mathfrak{A}_2$ \mathfrak{A}_1 -messbar und
- (ii) $\kappa(\omega_1, \cdot)$ für jedes $\omega_1 \in \Omega_1$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf $(\Omega_2, \mathfrak{A}_2)$

ist. Vergleiche dazu Klenke (2013, Abschnitt 8.3). Existiert zusätzlich ein Wahrscheinlichkeitsmaß μ auf $(\Omega_1, \mathfrak{A}_1)$, so beschreibt

$$\nu(A_2) = \int_{\Omega_1} \kappa(\omega_1, A_2) \mu(d\omega_1) \quad \forall A_2 \in \mathfrak{A}_2$$

ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf $(\Omega_2, \mathfrak{A}_2)$.

Damit lässt sich solch ein Bildmaß ξ^g für lokal kompakte Gruppen G auch als Markov-Kern betrachten. Mit $\kappa(g, \cdot) = \xi^g(\cdot)$ liegt für alle $g \in G$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß vor. Sei μ_G das Haar-Wahrscheinlichkeitsmaß auf G , dann ist durch

$$\bar{\xi}(A) = \int_G \kappa(g, A) \mu_G(dg) \quad \forall A \text{ Borel-Menge in } \mathbb{R}^k \quad (3.6)$$

auch das symmetrisierte Design $\bar{\xi}$ (Maß) für unendliche Gruppen G gegeben.

Als wichtige Eigenschaft eines symmetrisierten Designs $\bar{\xi}$ sei dessen Invarianz bezüglich G erwähnt. Denn für beliebiges $\check{\mathbf{g}} \in G$ ist

$$\begin{aligned}\bar{\xi}^{\check{\mathbf{g}}}(A) &= \bar{\xi}(\check{\mathbf{g}}^{-1}(A)) = \int_G \kappa(\mathbf{g}, \check{\mathbf{g}}^{-1}(A)) \mu_G(d\mathbf{g}) = \int_G \xi^{\mathbf{g}}(\check{\mathbf{g}}^{-1}(A)) \mu_G(d\mathbf{g}) \\ &= \int_G \xi(\mathbf{g}^{-1}(\check{\mathbf{g}}^{-1}(A))) \mu_G(d\mathbf{g}) = \int_G \xi((\check{\mathbf{g}}\mathbf{g})^{-1}(A)) \mu_G(d\mathbf{g}) .\end{aligned}$$

Mittels Substitution von $\check{\mathbf{g}}\mathbf{g} = \check{\mathbf{g}}$ und $\check{\mathbf{g}}G = G$ ergibt sich

$$\bar{\xi}^{\check{\mathbf{g}}}(A) = \int_{\check{\mathbf{g}}G} \xi(\check{\mathbf{g}}^{-1}(A)) \mu_G(d\check{\mathbf{g}}) = \int_G \xi^{\check{\mathbf{g}}}(A) \mu_G(d\check{\mathbf{g}}) = \int_G \kappa(\check{\mathbf{g}}, A) \mu_G(d\check{\mathbf{g}}) = \bar{\xi}(A) .$$

Gleichzeitig generiert sich ein bereits bezüglich G invariantes Design ξ durch Symmetrisierung selbst, also $\bar{\xi} = \xi$. Folglich sind die symmetrisierten Designs genau die invarianten Designs.

Der Vorteil der symmetrisierten beziehungsweise invarianten Designs zeigt sich bei der Optimierung. Ist die Kriteriumsfunktion φ konkav und invariant bezüglich der Gruppe G , dann gilt

$$\varphi(\bar{\xi}) \geq \varphi(\xi) \quad \forall \xi \in \Xi_{\mathcal{X}} .$$

Dies folgt recht schnell aus der Jensen'schen Ungleichung für Konkavität, siehe Elstrodt (2007, Seite 221), sowie unter Ausnutzung der Invarianz von φ und Normiertheit von μ_G , da

$$\begin{aligned}\varphi(\bar{\xi}) &= \varphi\left(\int_G \xi^{\mathbf{g}} \mu_G(d\mathbf{g})\right) \geq \int_G \varphi(\xi^{\mathbf{g}}) \mu_G(d\mathbf{g}) \\ &= \int_G \varphi(\xi) \mu_G(d\mathbf{g}) = \varphi(\xi) \int_G 1 \mu_G(d\mathbf{g}) = \varphi(\xi) .\end{aligned}$$

Zusammenfassend lässt sich sagen: Induziert die Gruppe G eine lineare Transformation auf \mathbf{f} , also insbesondere bei der orthogonalen und speziellen orthogonalen Gruppe, dann sind die invarianten Designs bezüglich des (lokalen) D -Kriteriums — sofern auch β^0 invariant bezüglich aller durch G induzierten Transformationen $\check{\mathbf{g}}$ ist — zumindest nicht schlechter als Designs, die nicht invariant sind. Somit lässt sich die Suche nach (lokal) optimalen Versuchsplänen auf invariante Designs einschränken, welche aus der Symmetrisierung hervorgehen.

4 Monotone Intensitätsfunktionen

Dieses Kapitel beruht auf den Erkenntnissen der Publikation von Radloff und Schwabe (2019a) und gibt diese wieder.

Auch wenn zu Anfang noch nicht ersichtlich, bezieht sich dieses Kapitel auf eine Klasse von Modellen, die über eine monotone Intensitätsfunktion verfügen. Diese Eigenschaft wird dann explizit in der Forderung (A2) auf Seite 54 benötigt.

Auch in diesem Kapitel bleibt die Forderung bestehen, dass das zu untersuchende Modell eine Ein-Punkt-Informationsmatrix der Form

$$M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$$

wie in (2.2) hat. An die Intensitätsfunktion $\lambda : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die hier wiederum nur vom Wert des linearen Prädiktors abhängt, werden im Laufe des Kapitels weitere Forderungen gestellt. Unter diesen Bedingungen werden die zu ermittelten (lokal) D -optimalen Designs besondere Eigenschaften, insbesondere in ihrer Gestalt, besitzen.

Aber bevor die Resultate für die speziellen nichtlinearen Modelle folgen, sollen zunächst das lineare Modell, als Spezialfall von (2.2) mit $\lambda \equiv \frac{1}{\sigma^2}$ betrachtet und die bekannten Resultate zusammengetragen werden.

4.1 Das lineare Modell

Zu Beginn beschäftigt sich dieses Kapitel mit linearen Modellen, die in der Literatur bereits gut untersucht sind und einen Spezialfall der nichtlinearen Modelle darstellen. Hierbei ist die Intensitätsfunktion λ konstant gleich $\frac{1}{\sigma^2}$, vergleiche Beispiel 2.6, und hängt nicht vom gegebenen Parameter $\boldsymbol{\beta}$ ab. Folglich sind die Informationsmatrix und das D -optimale Design unabhängig von $\boldsymbol{\beta}$. Zur Vereinfachung kann deshalb die Fisher-Informationsmatrix

des Designs als $\mathbf{M}(\xi)$ statt $\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta})$ geschrieben werden. In Pukelsheim (1993, Abschnitt 15.12), zum Beispiel, kann das folgende leicht angepasste Resultat für die multiple Regression mit Regressionsfunktion

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (1, x_1, \dots, x_k)^\top$$

gefunden werden.

Satz 4.1

Im linearen Fall der multiplen Regression bilden die (gleichgewichteten) Ecken eines beliebig rotierten k -dimensionalen regulären Simplex, dessen Ecken auf der Oberfläche des Versuchsbereiches $\mathcal{X} = \mathbb{B}_k$, also auf der Sphäre \mathbb{S}_{k-1} liegen, ein D -optimales Design auf der Einheitskugel \mathbb{B}_k . Die zugehörige Informationsmatrix ist die Diagonalmatrix

$$\mathbf{M}(\xi) = \frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) .$$

Dabei bedeutet die Regularität des Simplex, dass dessen Kanten alle die gleiche Länge haben.

Bemerkung 4.2

In einer Dimension vereinfacht sich der Versuchsbereich zu einer Strecke beziehungsweise einem Intervall, sodass 1 und -1 die zwei Designpunkte sind. In zwei Dimensionen sind es die Ecken eines gleichseitigen Dreiecks. Und in drei Dimensionen bilden die Ecken eines regulären Tetraeders ein optimales Design.

Im k -dimensionalen Fall, $k \geq 1$, ist eine mögliche Darstellung der $k + 1$ Designpunkte aus Bemerkung 4.29 mit

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\boldsymbol{\beta}}^0}{|\tilde{\boldsymbol{\beta}}^0|} &= -\frac{1}{\sqrt{k}} \mathbb{1}_k , \\ x_{12}^* &= -\frac{1}{k} \text{ und} \\ \mathbf{H} &= \mathbb{I}_k \end{aligned}$$

in (4.12) gegeben. Konkret handelt es sich hierbei um den Punkt $-\frac{1}{\sqrt{k}} \mathbf{1}_k$ und die Punkte resultierend aus den Spalten von

$$-\frac{\sqrt{k+1}-1}{\sqrt{k}^3} \mathbf{1}_k \mathbf{1}_k^\top + \frac{\sqrt{k+1}}{\sqrt{k}} \mathbb{I}_k .$$

Diese Trägerpunkte können mit einer beliebigen Rotation beziehungsweise orthogonalen Abbildung des \mathbb{R}^k transformiert werden. Die so erhaltenen Punkte bilden aufgrund der Invarianz des D -Kriteriums gegenüber orthogonalen Abbildungen, vergleiche Bemerkung 3.4, ebenfalls ein D -optimales Design.

Lemma 4.3

Das gleichverteilte Design $\mu_{\mathbb{S}_{k-1}}$, siehe (3.3), auf der k -dimensionalen Sphäre \mathbb{S}_{k-1} hat die gleiche Informationsmatrix wie das optimale Design aus Satz 4.1: $\frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k})$.

Beweis. Sei $\xi = \mu_{\mathbb{S}_{k-1}}$ das (stetig) gleichverteilte Design (oder besser: stetig gleichverteilte Wahrscheinlichkeitsmaß) auf \mathbb{S}_{k-1} . So sind nachfolgende Momente endlich und existent. Zunächst sei $k \geq 2$. Für alle $i \in \{1, 2, \dots, k\}$ sei $(X_1, \dots, X_i, \dots, X_k) \sim \xi$. ξ ist invariant bezüglich eines Vorzeichenwechsels (spezielle Spiegelungen) und der Permutation der Komponenten. Folglich ist $(X_1, \dots, -X_i, \dots, X_k), (X_i, \dots, X_1, \dots, X_k) \sim \xi$. Somit ist $E(X_i) = E(-X_i)$ und weiter $E(X_i) = 0$ für alle i sowie $E(X_i X_j) = E((-X_i) X_j)$ und dadurch $E(X_i X_j) = 0$ für alle $i \neq j$. Außerdem ist $E(X_1^2) = E(X_i^2)$ für alle i und damit

$$k E(X_1^2) = E(X_1^2) + \dots + E(X_k^2) = E(X_1^2 + \dots + X_k^2) = E(1) = 1 .$$

Demzufolge ist $E(X_1^2) = \dots = E(X_k^2) = \frac{1}{k}$. Damit ist offensichtlich

$$\mathbf{M}(\xi) = \int_{\mathbb{B}_k} \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{f} \mathbf{f}^\top d\xi = \frac{1}{\sigma^2} \int_{\mathbb{S}_{k-1}} (1, x_1, \dots, x_k)^\top (1, x_1, \dots, x_k) \xi(d\mathbf{x}) = \frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) .$$

Für $k = 1$ sind die Sphäre \mathbb{S}_0 und die Ecken des Simplex $[-1, 1]$ identisch, nämlich -1 und 1 . Deshalb stimmen die Informationsmatrizen überein. \square

Folglich ist das (stetig) gleichverteilte Design $\mu_{\mathbb{S}_{k-1}}$ auch D -optimal.

Auch das k -dimensionale Kreuzpolytop und der k -dimensionale Würfel, jeweils mit den Ecken auf der Einheitssphäre \mathbb{S}_{k-1} , besitzen diese Informationsmatrix und sind damit D -optimal, wie das folgende Lemma zeigt.

Lemma 4.4

Die Informationsmatrix des Designs für die multiple Regression, bestehend aus den gleichgewichteten und jeweils auf der Einheitskugel \mathbb{S}_{k-1} liegenden Ecken

- des k -dimensionalen Kreuzpolytops beziehungsweise
- des k -dimensionalen Würfels,

ist die Diagonalmatrix $\frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k})$.

Beweis. Das k -dimensionale Kreuzpolytop besitzt die $2k$ Ecken $\mathbf{e}_{k,1}, -\mathbf{e}_{k,1}, \dots, \mathbf{e}_{k,k}, -\mathbf{e}_{k,k}$. Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{e}_{k,i})\mathbf{f}(\mathbf{e}_{k,i})^\top + \mathbf{f}(-\mathbf{e}_{k,i})\mathbf{f}(-\mathbf{e}_{k,i})^\top &= \begin{pmatrix} 2 & & \mathbb{O} \\ & & \\ \mathbb{O} & & 2 \end{pmatrix} \\ &= 2(\mathbf{e}_{k+1,1}\mathbf{e}_{k+1,1}^\top + \mathbf{e}_{k+1,i+1}\mathbf{e}_{k+1,i+1}^\top) \end{aligned}$$

für $i = 1, \dots, k$. Dies aufsummiert über alle k Eckenpaare ($\mathbf{e}_{k,i}$ und $-\mathbf{e}_{k,i}$) und mit $\frac{1}{2k}$ gewichtet ergibt unter Beachtung des Vorfaktors $\frac{1}{\sigma^2}$ die Informationsmatrix

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k} \sum_{i=1}^k (\mathbf{f}(\mathbf{e}_{k,i})\mathbf{f}(\mathbf{e}_{k,i})^\top + \mathbf{f}(-\mathbf{e}_{k,i})\mathbf{f}(-\mathbf{e}_{k,i})^\top) \\ &= \frac{1}{2k} \sum_{i=1}^k 2\mathbf{e}_{k+1,1}\mathbf{e}_{k+1,1}^\top + \frac{1}{2k} \sum_{i=1}^k 2\mathbf{e}_{k+1,i+1}\mathbf{e}_{k+1,i+1}^\top \\ &= \mathbf{e}_{k+1,1}\mathbf{e}_{k+1,1}^\top + \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{e}_{k+1,i+1}\mathbf{e}_{k+1,i+1}^\top \end{aligned}$$

und folglich den ersten Teil der Behauptung.

Der k -dimensionale Würfel besitzt die 2^k Ecken $\mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{k}}(\pm 1, \dots, \pm 1) \in \mathbb{R}^k$. Daraus ergibt sich für die Ein-Punkt-Informationsmatrix für eine Ecke

$$\mathbf{f}(\mathbf{v})\mathbf{f}(\mathbf{v})^\top = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{v}^\top \\ \mathbf{v} & \mathbf{v}\mathbf{v}^\top \end{pmatrix}.$$

Während das Aufsummieren aller Würfecken

$$\sum_{\mathbf{v}} \mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{k}} \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^k} \mathbf{w} = \mathbb{O}_k$$

noch recht schnell ersichtlich ist, da in jeder Komponente jeweils 2^{k-1} -mal -1 und 1 auftreten, benötigt es für $\sum_{\mathbf{v}} \mathbf{v} \mathbf{v}^\top$ eine vollständige Induktion.

Es soll gezeigt werden, dass

$$\sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top = 2^i \mathbb{I}_i \quad \text{für } i \in \mathbb{N}$$

ist. Für $i = 1$ ist $(-1) \cdot (-1) + 1 \cdot 1 = 2 = 2^1$. Nun ist

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^{i+1}} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top &= \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} (\mathbf{w}^\top, -1)^\top (\mathbf{w}^\top, -1) + \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} (\mathbf{w}^\top, 1)^\top (\mathbf{w}^\top, 1) \\ &= \begin{pmatrix} \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top & - \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w} \\ - \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w}^\top & \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top & \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w} \\ \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w}^\top & \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^i} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top & \mathbb{O}_i \\ \mathbb{O}_i^\top & 2 \cdot 2^i \end{pmatrix} = 2^{i+1} \mathbb{I}_{i+1}. \end{aligned}$$

Damit folgt unter Beachtung des Vorfaktors $\frac{1}{\sigma^2}$ für die Informationsmatrix des k -dimensionalen Würfels

$$\frac{1}{2^k} \sum_{\mathbf{v}} \mathbf{f}(\mathbf{v}) \mathbf{f}(\mathbf{v})^\top = \frac{1}{2^k} \begin{pmatrix} 2^k & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \frac{1}{k} \sum_{\mathbf{w} \in \{-1,1\}^k} \mathbf{w} \mathbf{w}^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \frac{1}{k} \mathbb{I}_k \end{pmatrix}.$$

Damit ist der zweite Teil des Lemmas gezeigt. \square

Bevor zu den nichtlinearen Modellen übergegangen wird, sollen noch kurz zwei Bemerkungen erfolgen.

Bemerkung 4.5

Wie in Bemerkung 3.4 lassen sich diese Designs beliebig rotieren beziehungsweise durch eine orthogonale Abbildung $\mathbf{g} : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ transformieren, ohne dass sich die Informations-

matrix verändert. Dazu existiert die (orthogonale) Matrix \mathbf{R}_g mit $\det(\mathbf{R}_g) = \pm 1$. Folglich transformiert die Matrix

$$\mathbf{Q}_g = \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \mathbf{R}_g \end{pmatrix}$$

dann die Regressionsfunktion bezüglich der multiplen Regression. Mit \mathbf{Q}_g wird ebenfalls die Informationsmatrix äquivariant transformiert, vergleiche dazu Lemma 3.3.

Da aber die Informationsmatrix $\frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k})$ hier eine Diagonalmatrix ist, die abgesehen vom Vorfaktor $\frac{1}{\sigma^2}$ bis auf den ersten Diagonaleintrag 1 alles identische Diagonalelemente $\frac{1}{k}$ besitzt, ist die Informationsmatrix sogar invariant.

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_g \frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) \mathbf{Q}_g^\top &= \frac{1}{\sigma^2} \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \mathbf{R}_g \end{pmatrix} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \mathbf{R}_g^\top \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sigma^2} \begin{pmatrix} 1 & & & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \mathbf{R}_g \text{diag}(\frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) \mathbf{R}_g^\top & & \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sigma^2} \begin{pmatrix} 1 & & & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \text{diag}(\frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) \mathbf{R}_g \mathbf{R}_g^\top & & \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sigma^2} \text{diag}(1, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}) \end{aligned}$$

Somit bleiben die Informationsmatrix und auch die Optimalität des Designs erhalten.

Bemerkung 4.6

In diesem Abschnitt wurden bisher nur der Simplex, das Kreuzpolytop und der Würfel betrachtet. Dies sind auch die einzigen regulären konvexen Polytope, die in allen Dimensionen existieren. Es gibt noch weitere reguläre Polytope, die dann aber nur in bestimmten Dimensionen auftreten. Im zweidimensionalen euklidischen Raum erfüllen alle regulären n -Ecke die Bedingung. Im dreidimensionalen Raum gibt es noch das Dodekaeder und das Ikosaeder. Das 24-, 120- und 600-Zell komplettieren die regulären Polytope in vier Dimensionen. In höheren Dimensionen gibt es keine weiteren regulären Polytope.

All diesen aufgezählten Körpern ist gemein, dass sie aufgrund ihrer Symmetrien die selbe Informationsmatrix, wie im Lemma 4.4 gegeben, besitzen. Dies sei hier ohne Beweis angeführt.

4.2 Nichtlineares Modell – Monotone Intensitätsfunktion

In diesem Abschnitt wird das erste Hauptresultat hergeleitet. Die Konzepte der Invarianz und Äquivarianz, siehe Kapitel 3, helfen bei der Reduktion der Komplexität dieses Vorhabens.

Wie im Abschnitt 3.1 erläutert ist das D -Kriterium für nichtlineare multiple Regressionsmodelle äquivariant in Bezug auf orthogonale Abbildungen, das heißt, für jede orthogonale Abbildung $\mathbf{g} : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ und zugehörige Matrix \mathbf{R}_g mit $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{R}_g \mathbf{x}$ erfüllt die ebenfalls orthogonale Matrix

$$\mathbf{Q}_g = \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_k^\top \\ \mathbb{O}_k & \mathbf{R}_g \end{pmatrix}$$

sowohl $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x})$ als auch $\tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{Q}_g \boldsymbol{\beta}$. Damit ist $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x}))^\top \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$ und $\det(\mathbf{M}(\xi^g, \tilde{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\beta}))) = \det(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}))$ sichergestellt.

Als erste Aussage auf dem Weg zu den optimalen Designs in dieser Arbeit wird folgendes Lemma benötigt.

Lemma 4.7

Die Trägerpunkte eines jeden (lokal) D -optimalen Designs für die durch (2.1) und (2.2) beschriebene Klasse von nichtlinearen multiplen Regressionsmodellen mit nichtnegativer Intensitätsfunktion λ befinden sich auf dem Rand der Kugel $\mathcal{X} = \mathbb{B}_k$, also auf der Sphäre \mathbb{S}_{k-1} .

Bemerkung 4.8

Der nun folgende Beweis orientiert sich sehr stark an Schmidt und Schwabe (2017, Lemma 1). Ihr Beweis beruht darauf, das Polytop in Scheiben (Schnitte mit Hyperebenen) zu zerlegen, in denen jeweils $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}$ konstant ist, sodass die konvexe Sensitivitätsfunktion ihre Maxima auf dem Rand dieser Hyperpolytope beziehungsweise genauer sogar nur in dessen Eckpunkten annehmen muss. Alle diese Ecken, vereinigt über alle diese Hyperpolytope, ergeben die Kanten des Polytops.

Für das Lemma 4.7 werden die Ränder der Schnitte mit den Hyperebenen Sphären sein. Hier lässt sich das Resultat nicht auf Ecken präzisieren, da die Sphären keine Ecken haben. Die Vereinigung der Ränder ergibt dann wiederum die Sphäre \mathbb{S}_{k-1} .

Eine andere Möglichkeit des eher direkten Beweises stellen die Ansätze in der Arbeit von Ehrenfeld (1956) dar. Diese werden hier aber nicht aufgezeigt.

Beweis von Lemma 4.7. Nach Satz 2.8 muss zur Bestimmung der Trägerpunkte des (lokal) D -optimalen Designs ξ^* die Sensitivitätsfunktion (2.14)

$$\lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{M}^{-1}(\xi^*, \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

auf $\mathbf{x} \in \mathbb{B}_k$ maximiert werden. Die Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi^*, \boldsymbol{\beta}^0)$ ist positiv semidefinit. Da sie aber hier gleichzeitig auch invertierbar sein muss, kann sogar positive Definitheit vorausgesetzt werden. Beim Invertieren bleibt $\mathbf{A} = \mathbf{M}^{-1}(\xi^*, \boldsymbol{\beta}^0)$ positiv definit.

Von der Matrix \mathbf{A} kann nun die erste Zeile und erste Spalte in der Form

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \mathbf{a}^\top \\ \mathbf{a} & \mathbf{A}_{11} \end{pmatrix}$$

abgetrennt werden. Die Matrix \mathbf{A}_{11} ist dabei ebenfalls positiv definit.

Für die multiple Regression muss insbesondere

$$\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{A} \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \mathbf{A}_{11} \mathbf{x} + 2\mathbf{a}^\top \mathbf{x} + a_{11}$$

maximiert werden. Dies ist aufgrund der positiven Definitheit von \mathbf{A}_{11} streng konvex.

Für ein beliebiges $a \in \mathbb{R}$ sei $H_a = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k : \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0 = a\}$ die Hyperebene, auf der der lineare Prädiktor konstant a ist. Folglich ist auf jeder dieser Hyperebenen auch $\lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) = \lambda(a)$ jeweils konstant. Die Sensitivitätsfunktion, eingeschränkt auf die Hyperebene H_a , nimmt ihre Maxima folglich auf dem Rand von $\mathbb{B}_k \cap H_a$ an — eine Sphäre eingebettet im \mathbb{R}^k . Folglich wird die Sensitivitätsfunktion auf der Sphäre \mathbb{S}_{k-1} maximiert, sodass dies der mögliche Ort aller Trägerpunkte des D -optimalen Designs ξ^* ist. \square

Bemerkung 4.9

Für jeden gegebenen Parametervektor $\boldsymbol{\beta}^0 = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top$ existiert eine orthogonale Abbildung beziehungsweise Rotation $\tilde{\mathbf{g}}$ derart, dass $\tilde{\mathbf{g}}(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top = (\beta_0, \tilde{\beta}_1, 0, \dots, 0)^\top$ mit $\tilde{\beta}_1 = \|(\beta_1, \dots, \beta_k)^\top\|$, wobei $\|\cdot\|$ die euklidische Norm ist. Es wird also die erste Komponente β_0 unverändert belassen und $(\beta_1, \dots, \beta_k)^\top$ vollständig in die β_1 -Richtung gedreht.

Während bei der Äquivarianz im Kapitel 3 meist davon ausgegangen wurde, dass eine Transformation des Versuchsbereiches eine Transformation des Parameterbereiches nach

sich zieht, lässt sich umgekehrt von einer orthogonalen Transformation $\tilde{\mathbf{g}}$ des Parameterbereiches eine orthogonale Transformation \mathbf{g} des Versuchsbereiches herleiten, sodass sich mit Hilfe der Äquivarianz die (lokal) optimalen Designs mittels \mathbf{g} beziehungsweise \mathbf{g}^{-1} ebenfalls übertragen lassen. Hierbei sei noch angemerkt, dass die orthogonale Abbildung die k -dimensionale Kugel, den Versuchsbereich, eigentlich nicht verändert.

Somit wird das eigentliche Problem zunächst auf den Fall

$$\beta_0 \in \mathbb{R} \text{ beliebig, } \beta_1 \geq 0, \quad \beta_2 = \dots = \beta_k = 0 \quad (4.1)$$

überführt. Dann wird das optimale Design bestimmt und dieses dann wieder zurücktransformiert.

Die Suche nach einem (lokal) optimalen Design mit einer Anfangsvermutung für den Parametervektor im ganzen Parameterbereich reduziert sich so ausschließlich auf die Länge des Vektors $(\beta_1, \dots, \beta_k)^\top$.

Im Folgenden werden deshalb alle Transformationen zur Ausnutzung der Äquivarianz ignoriert und es wird nur für den Fall (4.1) versucht ein (lokal) D -optimales Design zu bestimmen.

Falls $(\beta_1, \dots, \beta_k)^\top = \mathbb{O}_k$ ist, dann ist eine Transformation $\tilde{\mathbf{g}}$ gar nicht erst nötig, da

$$\beta_1 = \tilde{\beta}_1 = \|(\beta_1, \dots, \beta_k)^\top\| = 0.$$

Die nun folgenden Resultate beziehen sich in der Regel auf die Konstellation (4.1) mit $\beta_1 > 0$. Der Fall $\beta_1 = 0$ wird in der nachstehenden Bemerkung diskutiert.

Bemerkung 4.10

Ist $\beta_1 = 0$ in (4.1), dann sind $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0 = \beta_0$ und $\lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) = \lambda(\beta_0)$ konstant. Damit hängt die Informationsmatrix zwar immer noch von $\boldsymbol{\beta}^0$ ab, aber sie ist proportional zu der im linearen Modell. Damit ist das D -optimale Design im linearen Modell auch in der soeben diskutierten Konstellation für $(\beta_1, \dots, \beta_k)^\top = \mathbb{O}_k$ optimal. Wie im Satz 4.1 und Lemma 4.3 besteht ein mögliches diskretisiertes Design aus den gleichgewichteten Eckpunkten eines regulären Simplex, der in diese Sphäre eingeschrieben ist. Die Orientierung des Simplex ist dabei wiederum beliebig. Lemma 4.4, sowie die Bemerkungen 4.5 und 4.6 sollen nicht unerwähnt bleiben, da sie unter anderem auch beliebig rotierte Kreuzpolytope und Würfel erlauben. Trotzdem ist das Simplex-Design das Design mit den wenigsten Trägerpunkten.

Für das nachstehende Lemma sei an die Gruppen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$ aus Definition 2.10 erinnert. Es sind die orthogonale und spezielle orthogonale Gruppe und somit im Wesentlichen alle Rotationen und Spiegelungen, die x_1 festhalten und nur auf x_2, \dots, x_k operieren.

Lemma 4.11

Für alle β^0 , welche (4.1) erfüllen, ist das D -Kriterium invariant bezüglich der Gruppen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$.

Beweis. Falls $\mathbf{g} \in O(k; 1)$ eine orthogonale Transformation nur auf x_2, \dots, x_k mit zugehöriger $(k-1) \times (k-1)$ -Matrix $\mathbf{R}_g \in O(k-1)$ ist, wird analog zu Bemerkung 3.4

$$\mathbf{Q}_g = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \mathbb{O}_{2 \times (k-1)} \\ \mathbb{O}_{(k-1) \times 2} & \mathbf{R}_g \end{pmatrix}$$

definiert. \mathbf{Q}_g ist orthogonal mit Determinante ± 1 und erfüllt $\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{Q}_g \mathbf{f}(\mathbf{x})$. Folglich ist $\tilde{\mathbf{g}}(\beta^0) = (\mathbf{Q}_g^\top)^{-1} \beta^0 = \mathbf{Q}_g \beta^0$. Für alle β^0 , welche (4.1) erfüllen, ergibt sich also $\tilde{\mathbf{g}}(\beta^0) = \beta^0$ und somit

$$\det(\mathbf{M}(\xi^g, \beta^0)) = \det(\mathbf{M}(\xi^g, \tilde{\mathbf{g}}(\beta^0))) = \det(\mathbf{Q}_g \mathbf{M}(\xi, \beta^0) \mathbf{Q}_g^\top) = \det(\mathbf{M}(\xi, \beta^0)) .$$

Analog gilt dies auch für $SO(k; 1)$. □

Demzufolge lässt sich ein optimales Design innerhalb der Klasse der $O(k; 1)$ - beziehungsweise $SO(k; 1)$ -invarianten Designs auf der Kugeloberfläche finden. Zu diesem Zweck kann nun das Konzept der marginalen und bedingten Designs, siehe Cook und Thibodeau (1980), genutzt werden. Die entstehende Zerlegung erleichtert im nächsten Schritt die Bestimmung der Fisher-Informationsmatrix.

Lemma 4.12

Für alle β^0 , welche (4.1) erfüllen, sind die bezüglich der Gruppen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$ invarianten Designs (auf der Sphäre) durch $\xi_1 \otimes \bar{\eta}$ gegeben, wobei ξ_1 ein marginales Design auf der Komponente x_1 und $\bar{\eta}$ ein Markov-Kern (bedingtes Design) auf den Komponenten x_2, \dots, x_k sind. Für festes $x_1 \in [-1, 1]$ ist der Kern $\bar{\eta}(x_1, \cdot)$ die (stetige) Gleichverteilung auf der Oberfläche einer $(k-1)$ -dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{1-x_1^2}$.

Bemerkung 4.13

Ist $x_1 \in \{-1, 1\}$, dann ist die $(k-1)$ -dimensionale Kugel mit der Gleichverteilung zu einem einzelnen Punkt degeneriert. Somit handelt es sich nur um ein Ein-Punkt-Maß.

Beweis von Lemma 4.12. Jedes Design beziehungsweise Wahrscheinlichkeitsmaß ξ auf dem k -dimensionalen Borel'schen Meßraum $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}(\mathbb{R}^k)) = (\mathbb{R} \times \mathbb{R}^{k-1}, \mathcal{B}(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{B}(\mathbb{R}^{k-1}))$ kann in ein marginales Wahrscheinlichkeitsmaß ξ_1 auf $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ mit $\xi_1(A) = \xi(A \times \mathbb{R}^{k-1})$ und einen Markov-Kern η von $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ nach $(\mathbb{R}^{k-1}, \mathcal{B}(\mathbb{R}^{k-1}))$ (eindeutig bis auf Nullmengen) aufgesplittet werden, siehe zum Beispiel Klenke (2013, Abschnitt 8.3). Folglich ist

$$\xi = \xi_1 \otimes \eta .$$

Der Fokus soll nur auf Designs liegen, die auf dem Rand der k -dimensionalen Kugel, der Sphäre \mathbb{S}_{k-1} , definiert sind. Somit können die Definitionsbereiche dieser Maße und Kerne eingeschränkt werden. Es gilt $\xi(\mathbb{S}_{k-1}) = 1$, $\xi_1([-1, 1]) = 1$ und $\eta(x_1, \mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})) = 1$ für alle $x_1 \in [-1, 1]$.

Jedes bezüglich $O(k; 1)$ oder $SO(k; 1)$ invariante Design ξ besteht aus einem $O(k-1)$ - beziehungsweise $SO(k-1)$ -invarianten Kern η , das heißt, für den Kern ist $\eta(x_1, \cdot)$ invariant für alle x_1 . Die Gruppe $O(k; 1)$ beziehungsweise $SO(k; 1)$ aller (speziellen) orthogonalen Transformationen von x_2, \dots, x_k ist eine lokal kompakte Gruppe, vergleiche Abschnitt 2.6, sodass das Haar'sche Wahrscheinlichkeitsmaß das eindeutige invariante Wahrscheinlichkeitsmaß in Bezug auf diese Gruppe ist, siehe Halmos (1974, §60). Die (stetige) Gleichverteilung ist ein solches invariantes Maß. Folglich muss $\eta(x_1, \cdot)$ das (stetige) Gleichverteilungsmaß $\mu_{\mathbb{S}_{k-1}(\sqrt{1-x_1^2})}$ auf $\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})$ sein, vergleiche (3.4). In Anlehnung an die symmetrisierten Designs wird η mit $\bar{\eta}$ bezeichnet. \square

Lemma 4.14

Sei β^0 in der Gestalt von (4.1). Die Informationsmatrix der multiplen Regression für das Design $\xi_1 \otimes \bar{\eta}$, wie es im Lemma 4.12 definiert wurde, lautet

$$\mathbf{M}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \beta^0) = \left(\begin{array}{cc|c} \int q \, d\xi_1 & \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \mathbb{O}_{2 \times (k-1)} \\ \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 & \\ \hline \mathbb{O}_{(k-1) \times 2} & & \frac{1}{k-1} \int q (1 - \text{id}^2) \, d\xi_1 \, \mathbb{I}_{k-1} \end{array} \right) . \quad (4.2)$$

Dabei sei $q(x_1) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1)$ mit $\beta^0 = (\beta_0, \beta_1, 0, \dots, 0)^\top$.

Bemerkung 4.15

In der Fisher-Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \beta^0)$ wurde noch einmal explizit der vorgegebene Parameterwert β^0 erwähnt, wobei dieser (4.1) folgt. Im weiteren Verlauf wird deshalb darauf aber häufig verzichtet. Meist wird nur das nötige β_0 und β_1 erwähnt oder dies in der Funktion q implizit vorausgesetzt. Diese Kurzschreibweise $q(x_1)$ für die Intensitätsfunktion λ , angewendet auf den linearen Prädiktor $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \beta^0$ mit gegebenen β^0 , soll den Fokus auf die Abhängigkeit von der x_1 -Komponente legen. Deshalb taucht β^0 auch nicht mehr auf der rechten Seite von (4.2) auf, obwohl es natürlich davon abhängt.

Beweis von Lemma 4.14. Sei $\tilde{\mathbf{x}} = (x_2, \dots, x_k)^\top$. Es muss

$$\int_{\mathbb{S}_{k-1}} q(x_1) x_i^\kappa x_j^\nu (\xi_1 \otimes \bar{\eta})(d(x_1, \tilde{\mathbf{x}})) = \int_{[-1,1]} q(x_1) \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_i^\kappa x_j^\nu \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) \xi_1(dx_1)$$

für $i, j \in \{1, \dots, k\}$ und $\kappa, \nu \in \{0, 1\}$ bestimmt werden, wobei $i = j$ zulässig ist. Effektiv braucht nur das innere Integral mit (stetigem) Gleichverteilungsmaß $\bar{\eta}(x_1, \cdot)$ betrachtet werden, wobei x_1 -Faktoren herausgezogen werden können. Demzufolge ist

$$\int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = 1$$

und für $j \in \{2, 3, \dots, k\}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_j \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) \\ &= \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2}) \cap \{x_j > 0\}} x_j \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) + \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2}) \cap \{x_j < 0\}} x_j \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) + \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2}) \cap \{x_j = 0\}} 0 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) \\ &= \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2}) \cap \{x_j > 0\}} x_j \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) - \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2}) \cap \{x_j > 0\}} x_j \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = 0. \end{aligned}$$

Auch im Falle $i, j \in \{2, 3, \dots, k\}$ mit $i \neq j$ und $\kappa = \nu = 1$ kann das innere Integral im Wesentlichen auf die Bereiche $\{x_i > 0\} \cap \{x_j > 0\}$, $\{x_i < 0\} \cap \{x_j > 0\}$, $\{x_i > 0\} \cap \{x_j < 0\}$ und $\{x_i < 0\} \cap \{x_j < 0\}$ (und einige Nullterme) aufgeteilt werden, die sich gegenseitig aufheben, woraus $\int x_i x_j \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = 0$ folgt.

Für die Diagonalelemente muss nun $\int x_j^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}})$ für $j \in \{2, 3, \dots, k\}$ bestimmt werden.

Aufgrund der (stetigen) Gleichverteilung ist dieses Integral unabhängig von der Wahl der Komponente x_2, \dots, x_k , also

$$\begin{aligned} (k-1) \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_j^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) &= \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_2^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) + \dots + \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_k^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) \\ &= \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_2^2 + \dots + x_k^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} 1 - x_1^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = 1 - x_1^2. \end{aligned}$$

Hierbei sei noch kurz angemerkt, dass $x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_k^2 = 1$ und damit $x_2^2 + \dots + x_k^2 = 1 - x_1^2$ aufgrund der Lage auf der Einheitssphäre ist.

Da nun für alle Kombinationen das innere Integral bekannt ist, kann direkt das äußere Integral und damit die Informationsmatrix wie in (4.2) bestimmt werden. \square

Um den Äquivalenzsatz von Kiefer und Wolfowitz für D -Optimalität, vergleiche Satz 2.8, anwenden zu können, wird die Struktur der Sensitivitätsfunktion, siehe (2.14),

$$\psi(\mathbf{x}, \xi_1 \otimes \bar{\eta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{M}^{-1}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

genauer analysiert. Dabei fällt auf, dass hier die positive Semidefinitheit der Informationsmatrix nicht ausreicht, sondern diese regulär und damit auch positiv definit sein muss. Die Forderung nach Regularität der Informationsmatrix ist auch sinnvoll, da anderenfalls der Parametervektor $\boldsymbol{\beta}$ nicht vollständig schätzbar wäre.

Lemma 4.16

Erfülle $\boldsymbol{\beta}^0$ wieder die Bedingung (4.1). Für die bezüglich $O(k; 1)$ beziehungsweise $SO(k; 1)$ invarianten Designs $\xi_1 \otimes \bar{\eta}$ ist die Sensitivitätsfunktion ψ ebenfalls invariant bezüglich derartiger orthogonaler Transformationen und insbesondere in Bezug auf Rotationen. Die Sensitivitätsfunktion hat daher die Form

$$\psi(\mathbf{x}, \xi_1 \otimes \bar{\eta}) = q(x_1) \cdot p_1(x_1) \quad \text{für } \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)^\top \in \mathbb{S}_{k-1},$$

wobei p_1 ein Polynom vom Grad (höchstens) zwei in x_1 ist. Somit ist die Sensitivitätsfunktion konstant auf den Orbits der orthogonalen Transformationen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$, vergleiche Bemerkung 2.11.

Beweis. Bezeichne $D = \int q \, d\xi_1 \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 - \left(\int q \, \text{id} \, d\xi_1 \right)^2$ die Determinante des 2×2 -Blocks oben links in der Darstellung (4.2) der Informationsmatrix aus Lemma 4.14. Da generell gefordert wird, dass die Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \beta^0)$ regulär ist, und diese nach (4.2) eine Blockdiagonalstruktur hat, muss auch für den 2×2 -Block gelten, dass dessen Determinante $D \neq 0$ ist. Somit ergibt sich

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \beta^0) = \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{D} \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 & -\frac{1}{D} \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \mathbb{O}_{2 \times (k-1)} \\ -\frac{1}{D} \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \frac{1}{D} \int q \, d\xi_1 & \\ \hline & \mathbb{O}_{(k-1) \times 2} & \frac{k-1}{\int q(1-\text{id}^2) \, d\xi_1} \mathbb{I}_{k-1} \end{array} \right).$$

Mit $x_2^2 + \dots + x_k^2 = 1 - x_1^2$ folgt weiter

$$\psi(\mathbf{x}, \xi_1 \otimes \bar{\eta}) = q(x_1) \cdot p_1(x_1),$$

wobei

$$p_1(x_1) = \frac{1}{D} \left(\int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 - 2x_1 \int q \, \text{id} \, d\xi_1 + x_1^2 \int q \, d\xi_1 \right) + \frac{(k-1)(1-x_1^2)}{\int q(1-\text{id}^2) \, d\xi_1}$$

ein Polynom (höchstens) zweiten Grades in x_1 ist.

Wenn $k = 1$ ist, entfallen der Diagonalmatrixanteil $\frac{k-1}{\int q(1-\text{id}^2) \, d\xi_1} \mathbb{I}_{k-1}$ der invertierten Informationsmatrix und damit der letzte Summand $\frac{(k-1)(1-x_1^2)}{\int q(1-\text{id}^2) \, d\xi_1}$ im Polynom p_1 . \square

Bemerkung 4.17

Wie bereits angemerkt, ist die Invertierbarkeit beziehungsweise Regularität der Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \beta^0)$ zwingend, um den Parametervektor β vollständig schätzen zu können. Aus diesem Grund musste auch die Determinante D des oberen 2×2 -Blocks ungleich null sein. Dies geht aber nicht, wenn ξ_1 nur eine einzige Trägerstelle x_{11} hätte, denn

$$D = \int q \, d\xi_1 \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 - \left(\int q \, \text{id} \, d\xi_1 \right)^2 = q(x_{11}) \cdot q(x_{11}) x_{11}^2 - (q(x_{11}) x_{11})^2 = 0.$$

Damit sind immer mindestens zwei Trägerstellen des marginalen Designs ξ_1 nötig. Umgekehrt garantieren zwei Trägerstellen noch keine reguläre Informationsmatrix. So ist beispielsweise für $k > 1$ und $x_{11} = 1$ und $x_{12} = -1$ der untere Diagonalkblock der Informationsmatrix gleich $\mathbb{O}_{(k-1) \times (k-1)}$, da $\int q(1-\text{id}^2) \, d\xi_1 = 0$, und damit nicht regulär. Dass

für die später untersuchten, speziellen Modelle genau zwei Trägerstellen ausreichen (und wie diese aussehen), wird im Lemma 4.22 aufgezeigt.

Als Nächstes werden die folgenden vier Bedingungen an die Intensitätsfunktion λ gestellt, wobei (A1) bis (A3) immer und nur (A4) je nach Bedarf gefordert wird. Diese vier Bedingungen lassen sich bereits unter anderem in Konstantinou et al. (2014) oder Schmidt und Schwabe (2017) finden. Die Bedingung (A2) ist der Grund für die Bezeichnung dieser Modelle als Modelle mit *monotonen* Intensitätsfunktionen.

(A1) λ ist positiv auf \mathbb{R} und zweifach stetig differenzierbar.

(A2) Die erste Ableitung λ' ist positiv auf \mathbb{R} .

(A3) Die zweite Ableitung u'' von $u = \frac{1}{\lambda}$ ist injektiv auf \mathbb{R} .

(A4) Die Funktion $\frac{\lambda'}{\lambda}$ ist nichtwachsend.

Bevor nun mit Hilfe dieser vier Bedingungen optimale Designs bestimmt werden, sollen zunächst die beiden Bedingungen (A3) und (A4) kurz näher untersucht werden.

Bemerkung 4.18

Zur näheren Betrachtung der beiden Bedingungen (A3) und (A4) werden die Bedingungen (A1) und (A2) als erfüllt vorausgesetzt. Somit kann von einer Intensitätsfunktion λ ausgegangen werden, die mit $\lambda > 0$ sowie $\lambda' > 0$ zweifach stetig differenzierbar auf ganz \mathbb{R} ist.

Die Funktion $\frac{\lambda'}{\lambda}$ aus (A4) ist stetig und soll nichtwachsend sein. Also muss für ihre erste Ableitung

$$\left(\frac{\lambda'}{\lambda}\right)' = \frac{\lambda''\lambda - (\lambda')^2}{\lambda^2} \leq 0$$

gelten. Die zweite Ableitung von $u = \frac{1}{\lambda}$ aus (A3) ist

$$u'' = -\frac{\lambda''\lambda - 2(\lambda')^2}{\lambda^3}$$

und ebenfalls stetig, da $\lambda > 0$ ist. Eine reellwertige stetige Funktion ist genau dann injektiv, wenn sie streng monoton ist. Unter der Voraussetzung (A4) und mit $\lambda''\lambda - (\lambda')^2 \geq \lambda''\lambda - 2(\lambda')^2$ ist u'' nichtnegativ und streng monoton. Aus (A4) folgt also (A3).

Zugebenermaßen müssen hier die Bedingungen nicht auf komplett \mathbb{R} , sondern aufgrund der Einheitssphäre nur für das Intervall $x_1 \in [-1, 1]$ gelten. Dies impliziert dann ein z zwischen $\beta_0 - \beta_1$ und $\beta_0 + \beta_1$. Folglich muss u'' im Inneren des Intervalls positiv sein und kann nur an einer Randstelle die Null annehmen. Dies überträgt sich auch wieder zurück auf $(\frac{\lambda'}{\lambda})'$ in (A4), sodass die Ableitung auch im Inneren des Intervalls negativ und damit $\frac{\lambda'}{\lambda}$ (streng) fallend ist.

Bemerkung 4.19

In Konstantinou et al. (2014) oder Schmidt und Schwabe (2017) sieht die Bedingung (A4) etwas anders aus. Dort soll nämlich die Funktion $\frac{\lambda}{\lambda'}$ nichtfallend sein. Allerdings sind beide Aussagen äquivalent, wenn (A1) und (A2) vorausgesetzt werden.

Lemma 4.20

Sei $\beta_1 > 0$. Die Intensitätsfunktion λ erfüllt genau dann die Bedingung (A1), wenn auch die Funktion q mit $q(x_1) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1)$, wie im Lemma 4.14 definiert, die entsprechende Bedingung erfüllt. Analoge Äquivalenzen gelten für die Bedingungen (A2) bis (A4), wobei $u = \frac{1}{q}$ für (A3) sei.

Beweis.

(A1): $q(x_1) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1) > 0$ für alle $x_1 \in \mathbb{R}$. Die innere $(\beta_0 + \beta_1 x_1)$ und die äußere Funktion (λ) sind zweifach stetig differenzierbar, sodass auch die Verkettung zweifach stetig differenzierbar ist. Umgekehrt muss

$$\lambda(z) = q\left(\frac{z - \beta_0}{\beta_1}\right) \quad (4.3)$$

betrachtet werden. Dabei greifen dieselben Argumentationsschritte.

(A2): $q'(x_1) = \beta_1 \lambda'(\beta_0 + \beta_1 x_1)$. Egal ob λ' oder q' positiv ist, aufgrund von $\beta_1 > 0$ ist auch immer das jeweils andere positiv.

$$(A3): \quad \left(\frac{1}{q}\right)''(x_1) = \beta_1^2 \cdot \left(\frac{1}{\lambda}\right)''(\beta_0 + \beta_1 x_1)$$

Die Injektivität von $(\frac{1}{\lambda})''$ überträgt sich auf $(\frac{1}{q})''$. Dies wird auch nicht durch die lineare Transformation $\beta_0 + \beta_1 x_1$, $\beta_1 > 0$, und Skalierung mit $\beta_1^2 > 0$ beeinflusst. Die umgekehrte Betrachtung bezogen auf (4.3) liefert die Rückrichtung.

$$(A4): \quad \left(\frac{q'}{q}\right)(x_1) = \frac{q'(x_1)}{q(x_1)} = \frac{\beta_1 \lambda'(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{\lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1)} = \beta_1 \left(\frac{\lambda'}{\lambda}\right)(\beta_0 + \beta_1 x_1)$$

Die streng wachsende lineare Transformation $\beta_0 + \beta_1 x_1$, verkettet mit der nichtwachsenden Funktion $\frac{\lambda'}{\lambda}$ und dem positiven Vorfaktor β_1 , ergibt wieder eine nichtwachsende Funktion. Die Rückrichtung erfolgt analog mittels (4.3). \square

Damit kann nun beliebig zwischen den Bedingungen für die Intensitätsfunktion λ und die (abgekürzte) Intensitätsfunktion q hin- und hergewechselt werden. Nur bei den konkreten Berechnungen dürfen die positiven Vorfaktoren nicht unterschlagen werden.

Für die beiden konkreten Anwendungen, die Poisson-Regression und die Negativ-Binomial-Regression, vergleiche Beispiele 2.1 und 2.2, wird nun kurz überprüft, ob diese die Bedingungen (A1) bis (A4) erfüllen. Ein ausführlicher Nachweis der Bedingungen erfolgt im Anhang B Lemma B.1 und Lemma B.2. Im Abschnitt 4.3 werden diese Beispiele wieder aufgegriffen.

Beispiel 4.21 (Fortsetzung der Beispiele 2.1 und 2.2)

Bei der Poisson-Regression lautet die Intensitätsfunktion $\lambda_P(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) = \exp(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) = \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)$. Bei der Negativ-Binomial-Regression (oder Poisson-Gamma-Regression) ist es

$$\lambda_{NB}(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) = \frac{\exp(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})}{1 + a^{-1} \exp(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta})} = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}.$$

Die (abgekürzten) Intensitätsfunktionen werden mit q_P und q_{NB} bezeichnet.

$$\begin{aligned} q_P(x_1) &= \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) & q_{NB}(x_1) &= \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)} \\ q'_P(x_1) &= \beta_1 \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) & q'_{NB}(x_1) &= \frac{\beta_1 \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{(1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1))^2} \\ \frac{q'_P(x_1)}{q_P(x_1)} &= \beta_1 & \frac{q'_{NB}(x_1)}{q_{NB}(x_1)} &= \frac{\beta_1}{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)} \end{aligned}$$

Analog sind u_P und u_{NB} die Kehrwerte der (abgekürzten) Intensitätsfunktionen, wie sie in (A3) in Verbindung mit Lemma 4.20 definiert sind:

$$\begin{aligned} u_P(x_1) &= \exp(-\beta_0 - \beta_1 x_1) & u_{NB}(x_1) &= \frac{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)} \\ u''_P(x_1) &= \beta_1^2 \exp(-\beta_0 - \beta_1 x_1) & u''_{NB}(x_1) &= \beta_1^2 \exp(-\beta_0 - \beta_1 x_1) \end{aligned}$$

Beide Regressionsmodelle erfüllen (A1), (A2), (A3) und (A4), solange $\beta_1 > 0$ ist.

Lemma 4.22

Erfüllt die Intensitätsfunktion λ (beziehungsweise q) die Bedingungen (A1), (A2) und (A3) sowie $\lim_{z \rightarrow -\infty} z \lambda(z) = 0$, dann besteht das (lokal) D -optimale marginale Design ξ_1^* aus genau zwei Trägerpunkten x_{11}^*, x_{12}^* . Dabei ist $x_{11}^* = 1$ und $x_{12}^* \in [-1, 1)$. Ferner ist $x_{12}^* \in (-1, 1)$ für $k \geq 2$.

Bemerkung 4.23

ξ_1^* wird (lokal) D -optimales marginales Design genannt, wenn das zugehörige invariante Design $\xi^* = \xi_1^* \otimes \bar{\eta}$ (lokal) D -optimal ist.

Die Intensitätsfunktionen der Poisson-Regression und der Negativ-Binomial-Regression (oder Poisson-Gamma-Regression) erfüllen die zusätzliche Bedingung $\lim_{z \rightarrow -\infty} z \lambda(z) = 0$. Diese Bedingung ähnelt der Bedingung (A5) von Seite 80.

Die grobe Beweisidee, dass aus den Nullstellen von Ableitungen von (polynomiellen) Sensitivitätsfunktionen auf die Anzahl der Extrema und damit Trägerpunkte des optimalen Designs geschlossen werden kann, findet sich teils in Publikationen zu linearen Modellen wieder. Dies wurde dann von Biedermann et al. (2006) für spezielle nichtlineare Modelle abgewandelt. Bereits im Beweis des Lemmas 1 in Konstantinou et al. (2014) wurde für hier vergleichbare Modelle eine ähnliche Ungleichung zur nachfolgenden Bedingung (4.4) untersucht.

Beweis von Lemma 4.22. Mittels des Äquivalenzsatzes von Kiefer und Wolfowitz für D -Optimalität, vergleiche Satz 2.8, soll das (lokal) D -optimale marginale Design ξ_1^* charakterisiert werden. Dies übernimmt die Ungleichungsbedingung

$$k + 1 \geq \psi(\mathbf{x}, \xi_1^* \otimes \bar{\eta}) = q(x_1) \cdot p_1(x_1) \quad \text{für alle } \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)^\top \in \mathbb{B}_k,$$

wobei zusätzlich Gleichheit in den Trägerstellen von ξ_1^* gelten muss. Die Ungleichung ist äquivalent zu

$$\frac{p_1(x_1)}{k + 1} \leq \frac{1}{q(x_1)} \quad \text{für alle } x_1 \in [-1, 1]. \quad (4.4)$$

Die linke Seite der Ungleichung sei mit ℓ , also $\ell(x_1) = \frac{p_1(x_1)}{k+1}$, und die rechte Seite wie in (A3) mit u , also $u(x_1) = \frac{1}{q(x_1)}$, bezeichnet. So lässt sich (4.4) auch als $\ell(x_1) - u(x_1) \leq 0$ $\forall x_1 \in [-1, 1]$ schreiben. Dabei ist ℓ ein Polynom vom Grad (höchstens) 2 und seine zweite Ableitung konstant. Wegen (A3) ist die zweite Ableitung von u injektiv, sodass die zweite Ableitung von $\ell(x_1) - u(x_1)$ höchstens eine Nullstelle haben kann.

Nach dem (verallgemeinerten) Mittelwertsatz der Differentialrechnung, vergleiche beispielsweise Walter (2004, S. 256), kann die erste Ableitung von $\ell(x_1) - u(x_1)$ höchstens zwei Nullstellen aufweisen, sodass $\ell(x_1) - u(x_1)$ aufgrund der Differenzierbarkeit höchstens ein lokales Minimum und ein lokales Maximum hat. Mit der Erkenntnis aus Bemerkung 4.17 hat ξ_1^* aber mindestens zwei Trägerstellen, sodass mindestens eine Trägerstelle auf dem Rand von $[-1, 1]$ liegen muss. Ferner können für $k \geq 2$ nicht beide Trägerstellen auf dem Rand liegen, da sonst ein Zwei-Punkte-Design und folglich eine singuläre Informationsmatrix resultieren würden, vergleiche dazu ebenfalls Bemerkung 4.17.

Die erste Ableitung von $-u$ ist $\frac{q'}{q^2}$. Da Zähler und Nenner wegen (A2) und (A1) positiv sind, ist auch die erste Ableitung von $-u$ positiv. So ist $-u$ (streng) monoton wachsend. Ist der Koeffizient vor dem quadratischen Glied der Parabel $\ell(x_1) = \frac{p_1(x_1)}{k+1}$ positiv, dann geht $\ell(x_1) - u(x_1)$ für $x_1 \rightarrow \infty$ gegen unendlich, sodass die Randträgerstelle bei $x_1 = 1$ liegt. Ist dieser Koeffizient für das optimale Design hingegen negativ, so geht $\ell(x_1) - u(x_1)$ für $x_1 \rightarrow -\infty$ gegen $-\infty$. Da $-\infty$, Randmaximum (ohne gleichzeitig lokales Maximum zu sein), lokales Minimum und lokales Maximum in dieser Reihenfolge nicht auftreten können, kann das Randmaximum nicht bei $x_1 = -1$ sein. Da eine Trägerstelle bei einem optimalen Design nicht ausreicht, muss folglich das Randmaximum bei $x_1 = 1$ liegen.

Ist dieser Koeffizient nun null und der Koeffizient vor dem linearen Glied nichtnegativ, so ist $\ell(x_1) - u(x_1)$ (streng) monoton wachsend und es kann auf $[-1, 1]$ keine zwei Maxima geben. Dies steht aber im Widerspruch dazu, dass es ein optimales Design ist.

Für den Fall, dass der quadratische Koeffizient null und der lineare Koeffizient negativ ist, greift die Bedingung $\lim_{z \rightarrow -\infty} z \lambda(z) = 0$. Unter Beachtung von (A1) ist diese äquivalent zu $\lim_{z \rightarrow -\infty} \frac{u(z)}{z} = -\infty$. Das heißt, dass $-u$ für $x_1 \rightarrow -\infty$ schneller gegen $-\infty$ als ℓ gegen $+\infty$ strebt. Damit geht $\ell(x_1) - u(x_1)$ für $x_1 \rightarrow -\infty$ gegen $-\infty$ und das Randmaximum kann nicht bei $x_1 = -1$ sein. Folglich muss auch hier das Randmaximum bei $x_1 = 1$ liegen. \square

Das nächste Lemma charakterisiert die Gewichte der beiden Trägerstellen der Orbits näher, wohingegen die Position des zweiten Orbits x_{12}^* erst im Satz 4.26 spezifiziert wird.

Lemma 4.24

In der Situation von Lemma 4.22 sind die zu einem (lokal) D -optimalen marginalen Design ξ_1^* mit den Trägerstellen $x_{11}^* = 1$ und $x_{12}^* \in [-1, 1)$ zugehörigen Gewichte

$$\xi_1^*(x_{11}^*) = \frac{1}{k+1} \quad \text{und} \quad \xi_1^*(x_{12}^*) = \frac{k}{k+1}. \quad (4.5)$$

Beweis. Seien kurz $\xi_1^*(x_{11}^*) = \alpha > 0$ und $\xi_1^*(x_{12}^*) = 1 - \alpha > 0$. Dann ist

$$\int q \text{id}^\kappa d\xi_1^* = q(x_{11}^*) x_{11}^{*\kappa} \alpha + q(x_{12}^*) x_{12}^{*\kappa} (1 - \alpha), \quad \kappa \in \{0, 1, 2\},$$

und folglich

$$D = \int q \, d\xi_1^* \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1^* - \left(\int q \, \text{id} \, d\xi_1^* \right)^2 = q(x_{11}^*)q(x_{12}^*)(x_{11}^* - x_{12}^*)^2\alpha(1 - \alpha) .$$

Damit und mit den Formeln aus dem Beweis von Lemma 4.16 lässt sich das Polynom p_1 bestimmen.

$$\begin{aligned} p_1(x_1) &= \frac{q(x_{11}^*)(x_{11}^* - x_1)^2\alpha + q(x_{12}^*)(x_{12}^* - x_1)^2(1 - \alpha)}{q(x_{11}^*)q(x_{12}^*)(x_{11}^* - x_{12}^*)^2\alpha(1 - \alpha)} \\ &\quad + \frac{(k - 1)(1 - x_1^2)}{q(x_{11}^*)(1 - x_{11}^{*2})\alpha + q(x_{12}^*)(1 - x_{12}^{*2})(1 - \alpha)} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Für $x_{11}^* = 1$ wird nun untersucht, ob sich ein α und ein $x_{12}^* \in [-1, 1)$ derart finden lassen, dass ξ_1^* ein (lokal) D -optimales marginales Design ist.

Für $k = 1$ fehlt, wie bereits im Lemma 4.16 erwähnt, der zweite Summand in p_1 . Somit ist $x_{12}^* = -1$ möglich.

Für $x_1 = x_{11}^* = 1$ ergibt sich eingesetzt in (4.6) der Wert $p_1(1) = \frac{1}{q(1)\alpha}$. Zurück zur Ungleichung (4.4) des Äquivalenzsatzes von Kiefer und Wolfowitz, siehe Satz 2.8, ist

$$p_1(x_1) \leq \frac{k + 1}{q(x_1)} .$$

Dabei gilt Gleichheit in dieser Ungleichung für die Trägerstellen des optimalen Designs. Also muss für $x_1 = x_{11}^* = 1$

$$\frac{1}{q(1)\alpha} = \frac{k + 1}{q(1)}$$

gelten. Somit ist $\alpha = \frac{1}{k+1}$ und folglich $1 - \alpha = \frac{k}{k+1}$. Die noch unbekannte und nicht weiter spezifizierte Trägerstelle x_{12}^* in (4.6) eingesetzt ergibt

$$p_1(x_{12}^*) = \frac{1}{q(x_{12}^*)(1 - \alpha)} + \frac{(k - 1)}{q(x_{12}^*)(1 - \alpha)} = \frac{k + 1}{q(x_{12}^*)} ,$$

wobei der zweite Schritt aus dem Ersetzen von $1 - \alpha = \frac{k}{k+1}$ resultiert. Dies ist die Gleichheitsaussage der Ungleichung (4.4) in x_{12}^* . Folglich erfüllt das Design mit $x_{11}^* = 1$ und den Gewichten $\frac{1}{k+1}$ sowie $\frac{k}{k+1}$ genau die Optimalitätsbedingungen. \square

Bemerkung 4.25

Im Vorgriff auf Satz 4.27 wird das diskretisierte Design aus $k + 1$ gleichgewichteten Designpunkten bestehen. Hierbei wird die (stetige) Gleichverteilung in dem x_{12}^* -Orbit durch k Designpunkte analog zum Satz 4.1 ersetzt. Dadurch bleibt die Informationsmatrix unverändert. Die optimalen Gewichte, welche im Lemma 4.24 hergeleitet wurden, erlauben eine

derartige Diskretisierung. Somit kann das optimale Design als exaktes Design mit Stichprobenumfang $k + 1$ oder einem ganzzahligen Vielfachen davon realisiert werden.

Satz 4.26

Es liege die Situation aus Lemma 4.24 vor.

- (a) Für $k \geq 2$ ergibt sich die zweite Trägerstelle $x_{12}^* \in (-1, 1)$ des (lokal) D -optimalen marginalen Designs als Lösung der Gleichung

$$\frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \frac{2(1 + kx_{12}^*)}{k(1 - x_{12}^{*2})}. \quad (4.7)$$

Ist zusätzlich (A4) erfüllt, so ist die Lösung x_{12}^* eindeutig.

- (b) Im Fall $k = 1$ ist die zweite Trägerstelle x_{12}^* entweder die Lösung der Gleichung

$$\frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \frac{2}{1 - x_{12}^*}, \quad (4.8)$$

falls eine derartige Lösung in $[-1, 1)$ existiert, oder anderenfalls $x_{12}^* = -1$.

Ist wiederum zusätzlich (A4) erfüllt, so ist die Lösung x_{12}^* eindeutig.

Beweis. Zu (a): Mit $x_{11}^* = 1$, $\xi_1^*(x_{11}^*) = \frac{1}{k+1}$, $\xi_1^*(x_{12}^*) = \frac{k}{k+1}$ und der Notation aus Lemma 4.24 ergibt sich die Determinante der Informationsmatrix für $k \geq 2$ zu

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0)) &= \left(\int q \, d\xi_1^* \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1^* - \left(\int q \, \text{id} \, d\xi_1^* \right)^2 \right) \\ &\quad \cdot \left(\frac{1}{k-1} \int q(1 - \text{id}^2) \, d\xi_1^* \right)^{k-1} \end{aligned}$$

und logarithmiert weiter zu

$$\begin{aligned} \log \det(\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0)) &= \log \left(q(1)q(x_{12}^*)(1 - x_{12}^*)^2 \frac{k}{(k+1)^2} \right) \\ &\quad + (k-1) \left(\log \left(q(x_{12}^*)(1 - x_{12}^{*2}) \frac{k}{k+1} \right) - \log(k-1) \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Um dies zu optimieren, muss $0 = \frac{d}{dx_{12}^*} \log \det(\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0))$, also

$$0 = \frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} + \frac{-2(1 - x_{12}^*)}{(1 - x_{12}^{*2})^2} + (k-1) \left(\frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} + \frac{-2x_{12}^*}{1 - x_{12}^{*2}} \right)$$

gelöst werden. Wegen $1 - x_{12}^* \neq 0$ und $1 + x_{12}^* \neq 0$ existiert zum einen die Ableitung der Informationsmatrix und zum anderen vereinfacht sich deshalb auch die Gleichung zu (4.7). Die rechte Seite $\frac{2(1+kx_{12}^*)}{k(1-x_{12}^{*2})}$ von (4.7) hat Polstellen in -1 und 1 und ist streng monoton wachsend auf $(-1, 1)$ mit Werten in $(-\infty, \infty)$. Wegen (A1) und (A2) ist $\frac{q'}{q}$ stetig auf \mathbb{R} . Somit existiert eine Schnittstelle zwischen der linken und der rechten Seite von (4.7). Zur Eindeutigkeit: Ist $\frac{q'}{q}$ nichtwachsend in Bezug auf (A4), so ist diese Schnittstelle eindeutig.

Zu (b): Für $k = 1$ verschwindet, wie bereits erwähnt, der dritte Summand des Ausdrucks $\log \det(\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0))$. Deshalb muss

$$\frac{d}{dx_{12}^*} \log \det(\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0)) = \frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} + \frac{-2(1-x_{12}^*)}{(1-x_{12}^*)^2} = 0$$

gelöst werden. Wegen $1 - x_{12}^* \neq 0$ vereinfacht sich diese Bedingung zu (4.8). Besitzt (4.8) keine Lösung in $[-1, 1)$, dann wird das Maximum von $\log \det(\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0))$ auf dem Rand angenommen. Dies ist äquivalent zum Maximieren von $q(x_{12}^*)(1-x_{12}^*)^2$ auf dem Rand, sodass $x_{12}^* = -1$ sein muss.

Zur Eindeutigkeit: Die rechte Seite von (4.8), $\frac{2}{1-x_{12}^*}$, ist wieder streng monoton wachsend auf $[-1, 1)$ mit Werten, die $[1, \infty)$ abdecken. Ist $\frac{q'(-1)}{q(-1)} < 1$, so kann keine Lösung von (4.8) existieren. Somit ist $x_{12}^* = -1$ und eindeutig. Sind hingegen $\frac{q'(-1)}{q(-1)} \geq 1$ und die Bedingung (A4) erfüllt, so ist die Lösung von (4.8) eindeutig. \square

Nun lässt sich das ermittelte (verallgemeinerte) Design diskretisieren.

Satz 4.27

Es existiert ein (lokal) D -optimales Design für das betrachtete Problem, mit $\beta_1 > 0$, $\beta_2 = \dots = \beta_k = 0$, $\beta_0 \in \mathbb{R}$, welches einen Trägerpunkt in $(1, 0, \dots, 0)^\top$ und die anderen k Trägerpunkte in den Ecken eines beliebig rotierten $(k-1)$ -dimensionalen Simplex hat, welcher maximal im Schnitt der k -dimensionalen Einheitskugel und der Hyperebene mit $x_1 = x_{12}^$ aus Satz 4.26 einbeschrieben ist. Die Trägerpunkte sind gleichgewichtet mit $\frac{1}{k+1}$.*

Beweis. Ist $k = 1$, so besteht das (lokal) D -optimale (verallgemeinerte) Design $\xi^* = \xi_1^* \otimes \bar{\eta}$ bereits aus zwei Punkten ($\mathbf{s}_0 = 1$ und $\mathbf{s}_1 = x_{12}^*$) mit gleichen Gewichten $\frac{1}{2}$. Dies ist also ein diskretes Design.

Anderenfalls ist ein expliziter Designpunkt der Pol $\mathbf{s}_0 = (1, 0, \dots, 0)^\top$ mit Gewicht $\frac{1}{k+1}$.

Folglich muss nun nur noch die (stetige) Gleichverteilung auf dem Orbit $\{x_{12}^*\} \times \mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_{12}^{*2}})$ diskretisiert werden.

Mit $\tilde{\mathbf{x}} = (x_2, \dots, x_k)$ ist die betrachtete Informationsmatrix:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\xi^*, \beta^0) &= \int_{\mathbb{B}_d} \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \beta) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \xi^*(d\mathbf{x}) \\ &= \frac{q(1)}{k+1} \mathbf{f}(\mathbf{s}_0) \mathbf{f}(\mathbf{s}_0)^\top + \frac{k q(x_{12}^*)}{k+1} \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_{12}^{*2}})} \mathbf{f}\left(\begin{pmatrix} x_{12}^* \\ \tilde{\mathbf{x}} \end{pmatrix}\right) \mathbf{f}\left(\begin{pmatrix} x_{12}^* \\ \tilde{\mathbf{x}} \end{pmatrix}\right)^\top \bar{\eta}(x_{12}^*, d\tilde{\mathbf{x}}) \end{aligned}$$

Nun soll dieser Orbit auf eine Einheitskugel skaliert und dann ausschließlich die letzten $k-1$ Komponenten angesehen werden. Sei $\mu_{\mathbb{S}_{k-2}}$ die (stetige) Gleichverteilung auf der Kugel \mathbb{S}_{k-2} und sei $\tilde{\mathbf{f}}$ das $(k-1)$ -dimensionale Analogon zu \mathbf{f} und

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \mathbb{O}_{2 \times (k-1)} & \\ x_{12}^* & & \\ & \mathbb{O}_{k-1} & \sqrt{1-x_{12}^{*2}} \mathbb{I}_{k-1} \end{pmatrix}.$$

Damit ist $\mathbf{f}(\begin{pmatrix} x_{12}^* \\ \tilde{\mathbf{x}}^\top \end{pmatrix}) = \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{x}})$ mit $\tilde{\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{1-x_{12}^{*2}}} \tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{S}_{k-2}$ und

$$\mathbf{M}(\xi^*, \beta^0) = \frac{q(1)}{k+1} \mathbf{f}(\mathbf{s}_0) \mathbf{f}(\mathbf{s}_0)^\top + \frac{k q(x_{12}^*)}{k+1} \mathbf{Q} \int_{\mathbb{S}_{k-2}} \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{x}}) \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{x}})^\top \mu_{\mathbb{S}_{k-2}}(d\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{Q}^\top.$$

Seien $\tilde{\mathbf{s}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{s}}_k$ die Ecken des (beliebig rotierten) Simplex aus Satz 4.1 in der $(k-1)$ -dimensionalen Situation und $\tilde{\mathbf{s}}_\kappa = \sqrt{1-x_{12}^{*2}} \tilde{\mathbf{s}}_\kappa$, $\kappa \in \{1, \dots, k\}$, die skalierten Ecken. Durch Ausnutzung des Lemmas 4.3 und Satzes 4.1 ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\xi^*, \beta^0) &= \frac{1}{k+1} q(1) \mathbf{f}(\mathbf{s}_0) \mathbf{f}(\mathbf{s}_0)^\top + \frac{k}{k+1} q(x_{12}^*) \mathbf{Q} \frac{1}{k} \sum_{\kappa=1}^k \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{s}}_\kappa) \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{s}}_\kappa)^\top \mathbf{Q}^\top \\ &= \frac{1}{k+1} \left[q(1) \mathbf{f}(\mathbf{s}_0) \mathbf{f}(\mathbf{s}_0)^\top + \sum_{\kappa=1}^k q(x_{12}^*) \mathbf{f}\left(\begin{pmatrix} x_{12}^* \\ \tilde{\mathbf{s}}_\kappa \end{pmatrix}\right) \mathbf{f}\left(\begin{pmatrix} x_{12}^* \\ \tilde{\mathbf{s}}_\kappa \end{pmatrix}\right)^\top \right]. \end{aligned}$$

Demzufolge hat das konstruierte diskrete Design mit \mathbf{s}_0 und $\mathbf{s}_\kappa = (x_{12}^*, \tilde{\mathbf{s}}_\kappa^\top)^\top$, $\kappa \in \{1, \dots, k\}$, die gleiche Informationsmatrix wie das optimale (verallgemeinerte) Design. Somit ist es auch (lokal) D -optimal. \square

Nun folgen einige weitergehende Bemerkungen zur Anwendung des Satzes 4.27. Doch zuvor werden noch einige Eigenschaften eines regulären Simplex benötigt.

Bemerkung 4.28

Der sogenannte *Standard-Simplex* ist ein regulärer Simplex im euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^k . Er besteht aus den k Eckpunkten

$$\mathbf{e}_{k,1} = (1, 0, \dots, 0)^\top, \quad \mathbf{e}_{k,2} = (0, 1, \dots, 0)^\top, \quad \dots, \quad \mathbf{e}_{k,k} = (0, 0, \dots, 1)^\top.$$

Er spannt aber nur einen $(k-1)$ -dimensionalen Unterraum, eine Hyperebene, auf. Trotzdem lassen sich damit wichtige Eigenschaften eines regulären Simplex herleiten. Der Mittelpunkt dieser k Punkte ist $\frac{1}{k}\mathbf{1}_k = (\frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k})$. Aufgrund der Regularität des Simplex dient dieser Mittelpunkt sowohl als Umkugel- als auch Inkugelmittelpunkt bezüglich des $(k-1)$ -dimensionalen Unterraums. Der Abstand zwischen Koordinatenursprung \mathbb{O}_k und dem Mittelpunkt $\frac{1}{k}\mathbf{1}_k$ beschreibt die Distanz zwischen dem Unterraum, in dem der Standard-Simplex liegt, und dem Koordinatenursprung \mathbb{O}_k und ist

$$\sqrt{k \left(\frac{1}{k}\right)^2} = \frac{1}{\sqrt{k}}. \quad (4.10)$$

Der Abstand zwischen Mittelpunkt und einem beliebigen Eckpunkt beträgt

$$\sqrt{\left(\frac{1}{k} - 1\right)^2 + (k-1) \left(\frac{1}{k}\right)^2} = \sqrt{\frac{k-1}{k}}. \quad (4.11)$$

Dies ist der Umkugelradius. Die Distanz zwischen zwei Eckpunkten, also die Kantenlänge des Standard-Simplex, ist

$$\sqrt{(1)^2 + (-1)^2 + (k-2) \cdot 0^2} = \sqrt{2}.$$

Um den Standard-Simplex zu einem vollständig den euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^k aufspannenden, regulären Simplex S zu ergänzen, wird ein weiterer Punkt benötigt. Dieser liegt auf der Normalen zum obigen Unterraum durch den Punkt $\frac{1}{k}\mathbf{1}_k$, also $a\mathbf{1}_k$ mit $a \in \mathbb{R}$. Aufgrund der Kantenlänge $\sqrt{2}$ ergibt sich $a = \frac{1-\sqrt{k+1}}{k}$. Dieser Punkt liegt zwar innerhalb der Einheitskugel, aber nicht auf deren Rand.

Damit ein regulärer Simplex entsteht, der die Einheitskugel \mathbb{B}_k aufspannt und dessen Eckpunkte auf der Einheitssphäre \mathbb{S}_{k-1} liegen, muss dieser Simplex S noch geeignet skaliert und verschoben werden. Um den Skalierungsfaktor zu bestimmen, hilft der Standard-Simplex im euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^{k+1} , also eine Dimension höher. Dieser besitzt die Kantenlänge $\sqrt{2}$ und den Umkugelradius $\sqrt{\frac{k}{k+1}}$. Folglich muss S im \mathbb{R}^k mit $\sqrt{\frac{k+1}{k}}$ skaliert werden.

Dadurch entsteht ein Simplex mit der Kantenlänge $\sqrt{2}\sqrt{\frac{k+1}{k}}$. Der skalierte Standard-

Simplex beziehungsweise dessen Unterraum besitzt somit einen Abstand zum Koordinatenursprung von $\frac{1}{\sqrt{k}}\sqrt{\frac{k+1}{k}}$. Dessen Umkugelradius beträgt $\sqrt{\frac{k-1}{k}}\sqrt{\frac{k+1}{k}}$. Zur Bestimmung der nötigen Verschiebung stellt sich die Frage, wie weit dieser skalierte Standard-Simplex mit Umkugelradius $\sqrt{\frac{k-1}{k}}\sqrt{\frac{k+1}{k}}$ vom Koordinatenursprung entfernt sein muss, sodass die Eckpunkte auf der Einheitskugel liegen. Dazu wird ein Abstand von

$$\sqrt{(1)^2 - \left(\sqrt{\frac{k-1}{k}}\sqrt{\frac{k+1}{k}}\right)^2} = \frac{1}{k}$$

benötigt. Somit muss um eine Länge von

$$\frac{1}{k} - \frac{1}{\sqrt{k}}\sqrt{\frac{k+1}{k}} = \frac{1 - \sqrt{k+1}}{k}$$

in $\mathbb{1}_k$ -Richtung verschoben werden. Dies entspricht einer Verschiebung von $\frac{1-\sqrt{k+1}}{k\sqrt{k}}\mathbb{1}_k$. Die Eckpunkte des Standard-Simplex lassen sich kompakt als die Spalten der Einheitsmatrix \mathbb{I}_k schreiben. Darauf die Skalierung und Verschiebung angewendet ergibt

$$\sqrt{\frac{k+1}{k}}\mathbb{I}_k + \frac{1 - \sqrt{k+1}}{k\sqrt{k}}\mathbb{1}_k\mathbb{1}_k^\top.$$

Für den $(k+1)$ -ten Eckpunkt folgt

$$\sqrt{\frac{k+1}{k}}\left(\frac{1 - \sqrt{k+1}}{k}\mathbb{1}_k\right) + \frac{1 - \sqrt{k+1}}{k\sqrt{k}}\mathbb{1}_k = -\frac{1}{\sqrt{k}}\mathbb{1}_k.$$

Bemerkung 4.29 (Anwendung des Satzes 4.27)

Soll ein optimales Design für ein vorgegebenes allgemeines $\beta^0 = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top$ bestimmt werden, welches nicht (4.1) erfüllt, so müssen der Versuchsbereich und der Parameterbereich rotiert beziehungsweise orthogonal transformiert werden. Anschließend muss ein (lokal) D -optimales Design gefunden werden, welches dann wieder zurückrotiert beziehungsweise -transformiert wird.

Dazu wird eine geeignete Darstellung eines $(k-1)$ -dimensionalen regulären Simplex, wie der Standard-Simplex aus Bemerkung 4.28, und Satz 4.27 benötigt. Solch ein (lokal) D -optimales Design besteht aus $k+1$ gleichgewichteten Trägerpunkten. Dies sind

$$\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} \quad \text{mit} \quad \tilde{\beta}^0 = (\beta_1, \dots, \beta_k)^\top,$$

der Punkt mit dem größten Wert der Intensitätsfunktion über den kompletten Versuchsbereich \mathbb{B}_k , und die k Eckpunkte eines regulären Simplex, der in einem Orbit einbeschrieben ist, welcher orthogonal zur Achse durch \mathbb{O}_k und dem erstgenannten Trägerpunkt $\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|}$ liegt. Diese k Punkte sind die Spalten von

$$\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} \mathbb{1}_k^\top \left(x_{12}^* + \frac{\sqrt{1 - x_{12}^{*2}}}{\sqrt{k-1}} \right) + \mathbf{H} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k-1}} \sqrt{1 - x_{12}^{*2}}. \quad (4.12)$$

Im zweiten Summanden wird der Standard-Simplex, welcher sich als die Spalten der Identitätsmatrix \mathbb{I}_k schreiben lässt und sich orthogonal zur Achse von \mathbb{O}_k und $\frac{1}{\sqrt{k}} \mathbb{1}_k$ befindet, durch die Householder-Matrix, siehe (2.19),

$$\mathbf{H} = \mathbb{I}_k - \frac{2}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} \mathbf{v} \mathbf{v}^\top \quad \text{mit} \quad \mathbf{v} = \frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} + \frac{1}{\sqrt{k}} \mathbb{1}_k$$

gekippt beziehungsweise gespiegelt, sodass der Standard-Simplex nun orthogonal zu $\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|}$ ist. Dabei ist $\mathbf{H} \mathbb{I}_k = \mathbf{H}$. Wie in Bemerkung 4.28 hat der (gekippte) Standard-Simplex in der Hyperebene einen Umkugelradius von $\sqrt{\frac{k-1}{k}}$, vergleiche (4.11), und muss auf einen Radius von $\sqrt{1 - x_{12}^{*2}}$ an der Orbitposition x_{12}^* skaliert werden. Ist $\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} = -\frac{1}{\sqrt{k}} \mathbb{1}_k$, so wäre $\mathbf{v} = \mathbb{O}_k$ für die Householder-Matrix. Damit ist kein Kippen nötig, sodass in der oben aufgeführten Darstellung $\mathbf{H} = \mathbb{I}_k$ gewählt werden kann.

Der erste Summand verschiebt den skalierten und gekippten Standard-Simplex dann so, dass er sich in der richtigen Distanz zum Pol $\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|}$ befindet. Der Standard-Simplex hat einen Abstand von $\frac{1}{\sqrt{k}}$, vergleiche (4.10), zum Koordinatenursprung. Wird dies mit $\sqrt{\frac{k}{k-1}}$ und $\sqrt{1 - x_{12}^{*2}}$ skaliert, ergibt sich ein Abstand von

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \cdot \sqrt{\frac{k}{k-1}} \cdot \sqrt{1 - x_{12}^{*2}} = \frac{\sqrt{1 - x_{12}^{*2}}}{\sqrt{k-1}}.$$

Diesen Abstand in $\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|}$ -Richtung ausgeglichen und auf x_{12}^* gebracht, ergibt den ersten Summanden.

Bemerkung 4.30

Soll das Design aus Bemerkung 4.29 rotiert werden, so kann dies durch Kippen des Standard-Simplex in eine Ebene, welche orthogonal zur x_1 -Richtung ist, dem Rotieren des Simplex mit festem x_1 und anschließendem Kippen in die richtige Richtung erfolgen. Dazu muss in (4.12) der Term \mathbf{H} durch $\mathbf{H}_2 \mathbf{R} \mathbf{H}_1$ ersetzt werden. Dabei ist \mathbf{H}_1 die

Householder-Matrix mit $\mathbf{v} = \mathbf{e}_{k,1} + \frac{1}{\sqrt{k}}\mathbb{1}_k$ für das erste Kippen und \mathbf{H}_2 die Householder-Matrix mit $\mathbf{v} = \frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} - \mathbf{e}_{k,1}$ für das zweite Kippen und

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbb{O}_{k-1}^\top \\ \mathbb{O}_{k-1} & \mathbf{R}_{k-1} \end{pmatrix}$$

mit einer beliebigen Rotationsmatrix \mathbf{R}_{k-1} des \mathbb{R}^{k-1} (oder orthogonalen Matrix) für die Rotation des Designs. Somit ist $\mathbf{R} \in O(k; 1)$, vergleiche Definition 2.10.

4.3 Beispiele

4.3.1 Poisson-Regression

Wie bereits im Beispiel 4.21 basierend auf Beispiel 2.1 beziehungsweise im Anhang B Lemma B.1 gezeigt wurde, erfüllt die Poisson-Regression die Bedingungen (A1) bis (A4).

Im Falle der Poisson-Regression lässt sich sogar eine explizite Lösung für x_{12}^* zu gegebenem $\beta^0 = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^\top$ finden. Durch Verwendung von Satz 4.26 ist

$$\beta_1 = \frac{2(1 + kx_{12}^*)}{k(1 - x_{12}^{*2})} \quad \text{für} \quad k \geq 2 \quad (4.13)$$

zu lösen. Es ist direkt ersichtlich, dass die Lösung unabhängig von β_0 ist. Es ergibt sich

$$x_{12}^* = \begin{cases} \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} & \text{für } \beta_1 > 0 \\ -\frac{1}{k} & \text{für } \beta_1 = 0. \end{cases}$$

Dabei ist $\frac{-1 - \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1}$ nur eine Scheinlösung, da $\frac{-1 - \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} < -1$ ist und somit der Orbit außerhalb der Kugel liegen würde.

Es ist weiterhin zu bemerken, dass die Lösung rechtsseitig stetig in $\beta_1 = 0$ ist. Dies ergibt sich aus der Regel von de l'Hospital, da sowohl Zähler als auch Nenner gegen 0 gehen,

$$\lim_{\beta_1 \searrow 0} \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} = \lim_{\beta_1 \searrow 0} \frac{-\frac{2}{k} + 2\beta_1}{2\sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}} = -\frac{1}{k}.$$

Die für den Fall $\beta_1 = 0$ bestimmte Lösung von (4.13) stimmt mit den Resultaten aus Bemerkung 4.10 überein.

Für $k = 1$, was die Poisson-Regression auf dem eindimensionalen Intervall $[-1, 1]$ ist, vereinfacht sich die Lösung zu

$$x_{12}^* = \begin{cases} -1 & \text{für } \beta_1 \in [0, 1] \\ 1 - \frac{2}{\beta_1} & \text{für } \beta_1 > 1. \end{cases}$$

Dies fällt mit der Lösung von Rodríguez-Torreblanca und Rodríguez-Díaz (2007) und Russell et al. (2009) beziehungsweise Schmidt und Schwabe (2017) zusammen.

Für festes $k \geq 2$ ist x_{12}^* als Funktion in Abhängigkeit von $\beta_1 \geq 0$ streng monoton wachsend, da

$$\frac{dx_{12}^*}{d\beta_1} = \frac{\frac{-\frac{2}{k} + 2\beta_1}{2\sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}} \beta_1 - \left(-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}\right)}{\beta_1^2} = \frac{1}{\beta_1^2} + \frac{-1 + \frac{1}{k}\beta_1}{\beta_1^2 \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}$$

positiv ist — sowohl für $\beta_1 \geq k$, denn $-1 + \frac{1}{k}\beta_1 \geq 0$, als auch für $\beta_1 < k$, denn $\sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2} = \sqrt{\left(1 - \frac{1}{k}\beta_1\right)^2 + \beta_1^2 - \frac{1}{k^2}\beta_1^2} > 1 - \frac{1}{k}\beta_1$.

Für $\beta_1 \rightarrow \infty$ konvergiert diese Funktion für festes $k \geq 2$ gegen 1, denn

$$\lim_{\beta_1 \rightarrow \infty} \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} = \lim_{\beta_1 \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta_1} + \sqrt{\frac{1}{\beta_1^2} - \frac{2}{k\beta_1} + 1} = 1.$$

Umgekehrt wächst für festes $\beta_1 > 0$ die Lösung x_{12}^* monoton in k , da

$$\frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k+1}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} > \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1}$$

recht schnell äquivalent zu $k+1 > k$ umgeformt werden kann, und konvergiert für $k \rightarrow \infty$ gegen die Grenzfunktion

$${}_{\infty}x_{12}^* = \frac{-1 + \sqrt{1 + \beta_1^2}}{\beta_1}.$$

Auch für $\beta_1 = 0$ konvergiert die Lösung für $k \rightarrow \infty$ von unten gegen ${}_{\infty}x_{12}^* = 0$. Zur Veranschaulichung dieses Sachverhaltes siehe Abbildung 4.1.

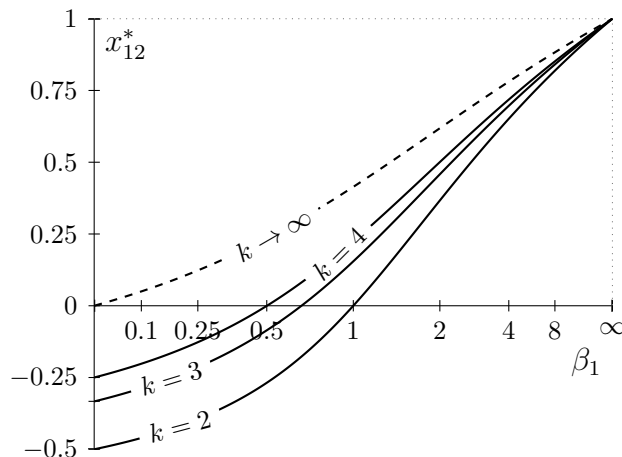


Abbildung 4.1: Position des Orbits x_{12}^* in Abhängigkeit von β_1 für die Poisson-Regression.

In Worten formuliert bewegt sich für festes $k \geq 2$ der x_{12}^* -Orbit mit wachsendem $\beta_1 \in [0, \infty)$ von $x_{12}^* = -\frac{1}{k}$ auf der negativen Hemisphäre ($x_{12}^* < 0$) des Versuchsbereiches über den Äquator ($x_{12}^* = 0$) und die positive Hemisphäre bis hin zum Pol ($x_{12}^* = 1$), erreicht diesen natürlich nicht.

Nun soll für beliebig gegebene Anfangsparameter β^0 ein (lokal) D -optimales Design bestimmt werden. Unter Verwendung von Bemerkung 4.29 lässt sich für die Poisson-Regression auf der dreidimensionalen Einheitskugel ($k = 3$) mit gegebenen Anfangsparametern $\beta^0 = (\cdot, 1, 2, 2)^\top$, also $\tilde{\beta}^0 = (1, 2, 2)^\top$ und $|\tilde{\beta}^0| = 3$, die Position des Orbits bei $x_{12}^* = \frac{-1+2\sqrt{2}}{3} \approx 0.6095$ bestimmen. Mit

$$\mathbf{v} = \frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} + \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)^\top = \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{2}{3} + \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{2}{3} + \frac{\sqrt{3}}{3} \right)^\top$$

ist die Householder-Matrix (alle Einträge auf vier Nachkommastellen gerundet)

$$\mathbf{H} = \mathbb{I}_3 - \frac{2}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} \mathbf{v} \mathbf{v}^\top \approx \begin{pmatrix} 0.5774 & -0.5774 & -0.5774 \\ -0.5774 & 0.2113 & -0.7887 \\ -0.5774 & -0.7887 & 0.2113 \end{pmatrix}.$$

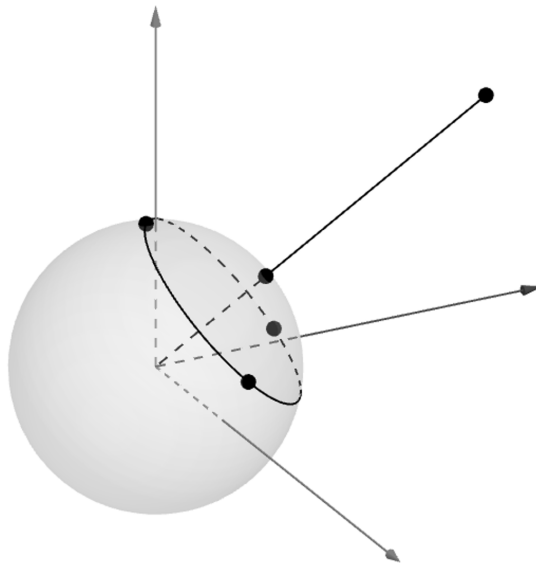


Abbildung 4.2: D -optimales Design zur Poisson-Regression auf der dreidimensionalen Einheitskugel mit gegebenem $\beta^0 = (\cdot, 1, 2, 2)^\top$.

Ein Trägerpunkt des optimalen Designs ist $\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} = (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{3})^\top$ und die restlichen drei Trägerpunkte sind die Spalten von

$$\frac{\tilde{\beta}^0}{|\tilde{\beta}^0|} \mathbf{1}_k^\top \left(x_{12}^* + \frac{\sqrt{1 - x_{12}^{*2}}}{\sqrt{k-1}} \right) + \mathbf{H} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k-1}} \sqrt{1 - x_{12}^{*2}} \approx \begin{pmatrix} 0.9506 & -0.1706 & -0.1706 \\ 0.2195 & 0.9852 & 0.0143 \\ 0.2195 & 0.0143 & 0.9852 \end{pmatrix}.$$

Die vier Designpunkte

$$\begin{aligned} & (0.3333, 0.6667, 0.6667)^\top, & (0.9506, 0.2195, 0.2195)^\top, \\ & (-0.1706, 0.9852, 0.0143)^\top, & (-0.1706, 0.0143, 0.9852)^\top \end{aligned}$$

sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Wie bereits implizit in der Notation des Anfangsparametervektors β^0 angedeutet, ist das optimale Design hier unabhängig von der Wahl der ersten Komponente β_0 .

4.3.2 Negativ-Binomial-Regression

Wie auch im Beispiel 4.21 und Beispiel 2.2 erwähnt, erfüllt die Negativ-Binomial-Regression die Bedingungen (A1) bis (A4), siehe dazu auch Anhang B Lemma B.2. Im Gegensatz zur Poisson-Regression kann die Lösung der Gleichung (4.7), also konkret

$$\frac{\beta_1}{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_{12}^*)} = \frac{2(1 + kx_{12}^*)}{k(1 - x_{12}^{*2})} \quad \text{für } k \geq 2, \quad (4.14)$$

nicht explizit dargestellt werden. Offenbar wird hier die Lösung sowohl von β_0 als auch vom zuvor gewählten $a > 0$ abhängen. Dabei sind diese beiden Abhängigkeiten nicht beliebig, sondern fließen effektiv als $\beta_0 - \log a$ ein. In Abbildung 4.3 ist eine numerische Lösung für $\beta_0 - \log a = 0$ dargestellt.

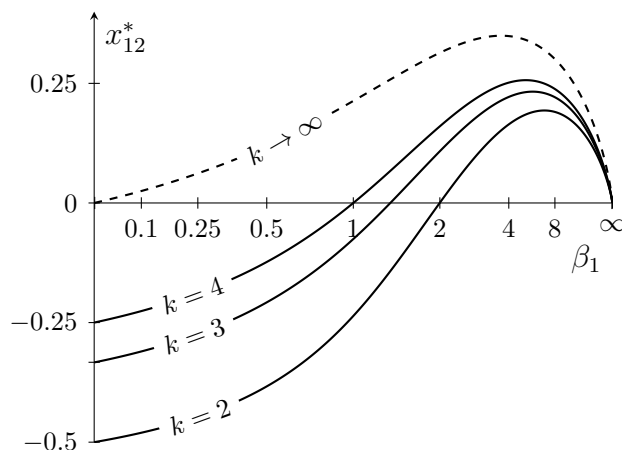


Abbildung 4.3: Position des Orbits x_{12}^* in Abhängigkeit von β_1 für die Negativ-Binomial-Regression mit $\beta_0 - \log a = 0$.

Auch das Verhalten der Position des x_{12}^* -Orbits unterscheidet sich zu dem der Poisson-Regression. Für festes $k \geq 2$ wandert der Orbit mit wachsendem $\beta_1 \in [0, \infty)$ von $x_{12}^* = -\frac{1}{k}$ auf der negativen Hemisphäre des Versuchsbereiches über den Äquator ($x_{12}^* = 0$) in die positive Hemisphäre und dann wieder zurück Richtung Äquator.

Aber durch den Satz über die implizite Funktion ist bekannt, dass der β_1 - x_{12}^* -Graph stetig und differenzierbar auf $(0, \infty)$ ist. Zusätzlich gibt es nur eine Nullstelle in $\beta_1 = \frac{2}{k}(1 + a^{-1} \exp(\beta_0))$ und die Ableitung des Graphen ist in dieser Nullstelle positiv. Für $\beta_1 \rightarrow 0$ konvergiert der Graph zu $-\frac{1}{k}$. Folglich ist x_{12}^* für alle β_1 rechts der Nullstelle positiv.

Umgekehrt kann der x_{12}^* - β_1 -Graph mittels der Standard-Lambert-W-Funktion, der inversen Funktion von $x \mapsto x \exp(x)$, als

$$-\frac{1}{x_{12}^*} \text{W} \left(-\frac{2 a^{-1} x_{12}^* (1 + k x_{12}^*)}{k (1 - x_{12}^{*2})} \exp \left(\beta_0 + \frac{2 x_{12}^* (1 + k x_{12}^{*2})}{k (1 - x_{12}^{*2})} \right) \right) + \frac{2 (1 + k x_{12}^*)}{k (1 - x_{12}^{*2})}$$

dargestellt werden.

Hier lässt sich der Grund für das Verhalten des eigentlichen β_1 - x_{12}^* -Graphen ersehen. Der Hauptast der Lambert-W-Funktion zeigt sich für das Verhalten und die Form des Graphen links des Maximums und der untere Ast für das Verhalten des Graphen rechts des Maximums verantwortlich.

Es wurde bereits erwähnt, dass die Lösung auch von $\beta_0 - \log a$ abhängt. In Abbildung 4.4 ist die numerische Lösung für $k = 2$ und verschiedene Werte von $\beta_0 - \log a$ dargestellt. Es ist bereits in dieser Abbildung ersichtlich, dass der Funktionsgraph für $\beta_0 - \log a \rightarrow -\infty$ gegen den Funktionsgraphen der Poisson-Regression in gleicher Dimension (hier $k = 2$) konvergiert. Dies lässt sich auch aus der Gleichung (4.14) ablesen, wenn $\beta_0 - \log a \rightarrow -\infty$ geht, denn

$$\lim_{\beta_0 - \log a \rightarrow -\infty} \frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \lim_{\beta_0 - \log a \rightarrow -\infty} \frac{\beta_1}{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_{12}^*)} = \frac{\beta_1}{1} = \beta_1 .$$

Es ergibt sich die gleiche implizite Funktionsdarstellung wie in (4.13) für $\beta_1 \in [0, \infty)$ bei der Poisson-Regression. Erwähnt werden sollte hier aber, dass es sich um eine punktweise Konvergenz der Funktionen handelt. Eine gleichmäßige Konvergenz wird durch das Verhalten für große β_1 ($\beta_1 \rightarrow \infty$) verhindert.

Für $\beta_0 - \log a \rightarrow \infty$ folgt aus

$$\lim_{\beta_0 - \log a \rightarrow \infty} \frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \lim_{\beta_0 - \log a \rightarrow \infty} \frac{\beta_1}{1 + a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_{12}^*)} = 0 ,$$

dass $x_{12}^* = -\frac{1}{k}$ für alle $\beta_1 \in [0, \infty)$ sein muss, sodass die Eckpunkte des regulären Simplex das optimale Design bilden.

4.3.3 Modelle mit zensierten Daten

Sowohl Konstantinou et al. (2014) als auch Schmidt und Schwabe (2017) betrachteten spezielle Proportional-Hazard-Modelle. Darunter befinden sich auch drei Fälle der Zensierung und deren Intensitätsfunktionen. Diese erfüllen die vier Bedingungen (A1) bis (A4).

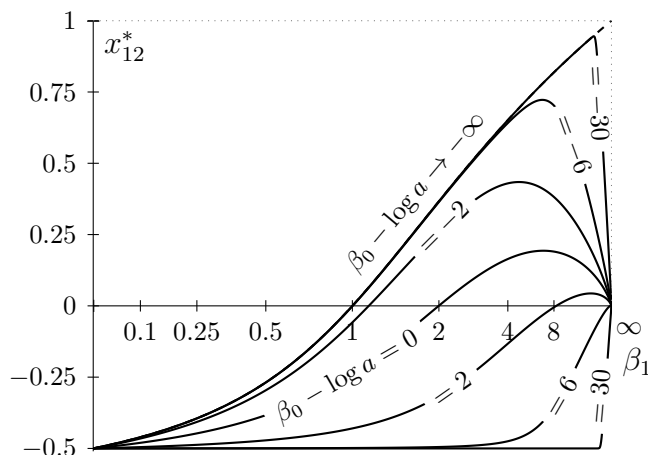


Abbildung 4.4: Position des Orbits x_{12}^* in Abhängigkeit von β_1 für die Negativ-Binomial-Regression mit verschiedenen Werten für $\beta_0 - \log a$ bei $k = 2$.

Als erstes ist die Typ-I-Zensierung mit fester Zensierungszeit c zu erwähnen. Sie hat die Intensitätsfunktion

$$q_{\text{CI}}(x_1) = 1 - \exp(-c \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)) .$$

Als nächstes gilt für das zufällige Zensieren mit auf dem Intervall $[0, c]$ gleichverteilten Zensierungszeiten

$$q_{\text{CU}}(x_1) = 1 + \frac{\exp(-c \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)) - 1}{c \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)} .$$

Ähnlich wie bei der Negativ-Binomial-Regression ist in diesen beiden Fällen die Abhängigkeit vom jeweiligen c und der Wahl des Wertes von β_0 nicht beliebig. Hier fließen beide wieder gekoppelt ein, sodass effektiv eine Abhängigkeit von $\beta_0 + \log c$ besteht. Abbildung 4.5 dient zur Veranschaulichung der beiden Modelle und der Position des Orbits in Abhängigkeit von β_1 für verschiedene Dimensionen k . Es ist ersichtlich, dass das Verhalten des x_{12}^* -Orbits auch ähnlich dem im Modell der Negativ-Binomial-Regression ist. Für $\beta_1 = 0$ befindet sich der Orbit bei $x_{12}^* = -\frac{1}{k}$ und bewegt sich dann für wachsende β_1 auf der negativen Hemisphäre zum Äquator und weiter auf der positiven Hemisphäre und wieder zurück in Richtung Äquator für $\beta_1 \rightarrow \infty$.

In Abbildung 4.6 ist wiederum für die Dimension $k = 2$ beispielhaft für einige Werte von $\beta_0 + \log c$ das Verhalten des x_{12}^* -Orbits dargestellt. Genau wie bei der Negativ-Binomial-Regression bleibt der Orbit für $\beta_0 + \log c \rightarrow \infty$ unverändert bei $x_{12}^* = -\frac{1}{k}$. Für $\beta_0 + \log c \rightarrow -\infty$ verhält er sich wie bei der Poisson-Regression. Ursächlich dafür ist in beiden Modellen wiederum

$$\lim_{\beta_0 + \log c \rightarrow -\infty} \frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \beta_1 \quad \text{und} \quad \lim_{\beta_0 + \log c \rightarrow \infty} \frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = 0 .$$

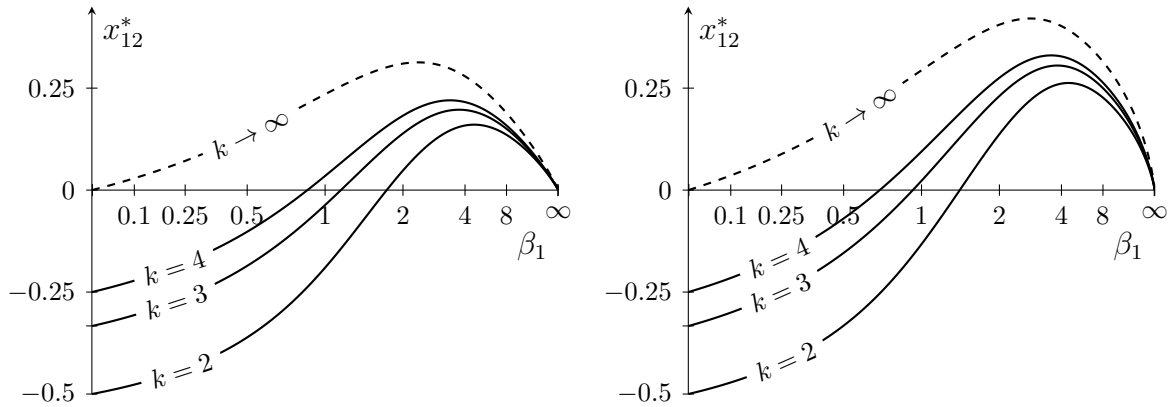


Abbildung 4.5: Position des Orbits x_{12}^* in Abhängigkeit von β_1 für die Typ-I-Zensurierung mit fester Zensurierungszeit c (linke Grafik) und für die zufällige Zensurierung mit $[0, c]$ -gleichverteilten Zensurierungszeiten (rechte Grafik) mit $\beta_0 + \log c = 0$.

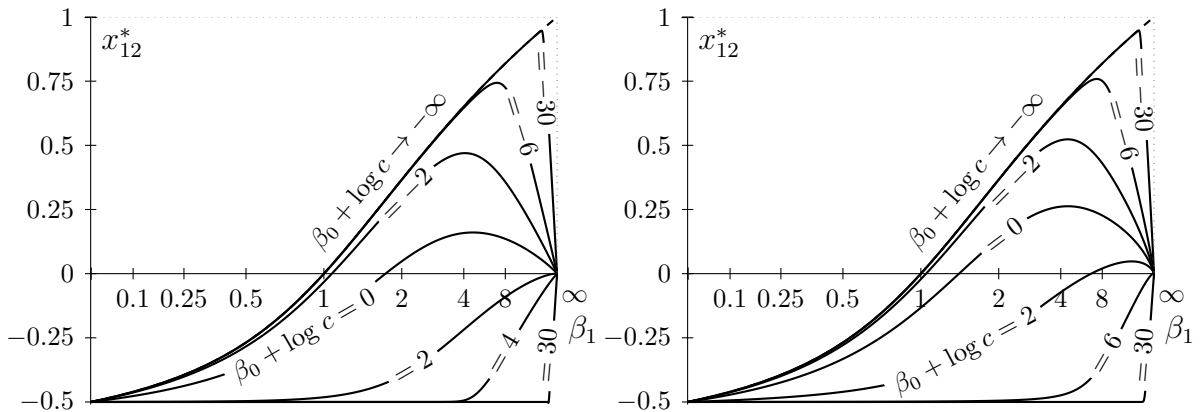


Abbildung 4.6: Position des Orbits x_{12}^* in Abhängigkeit von β_1 für die Typ-I-Zensurierung mit fester Zensurierungszeit c (linke Grafik) und für die zufällige Zensurierung mit $[0, c]$ -gleichverteilten Zensurierungszeiten (rechte Grafik) mit verschiedenen Werten für $\beta_0 + \log c$ bei $k = 2$.

Als letztes der drei betrachteten Proportional-Hazard-Modelle besitzt die zufällige Zensurierung mit zur Rate λ exponentiell verteilten Zensurierungszeiten die Intensitätsfunktion

$$q_{\text{CE}}(x_1) = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) + \lambda},$$

welche der Intensitätsfunktion der Negativ-Binomial-Regression mit $a = \lambda$ ähnelt, denn

$$q_{\text{CE}}(x_1) = \frac{1}{a} \cdot \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{a^{-1} \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) + 1} = \frac{1}{a} q_{\text{NB}}(x_1).$$

Somit unterscheiden sich beide Intensitätsfunktionen nur um einen fixen Vorfaktor, sodass sich identische (lokal) D -optimale Designs ergeben.

4.4 Kurze Zusammenfassung

Die (lokal) D -optimalen Designs, die hier hergeleitet wurden, können auf eine große Klasse von nichtlinearen Problemen zur multiplen Regression, wie zum Beispiel Poisson- oder Negativ-Binomial-Regression oder Modelle mit zensierten Daten, angewendet werden. In all diesen Fällen ist der Versuchsbereich die k -dimensionale Einheitskugel und die Intensitätsfunktion muss monoton sein. Dabei wurde zunächst ein $O(k-1)$ - beziehungsweise $SO(k-1)$ -invariantes verallgemeinertes Design bestehend aus einem Pol und einem Orbit bestimmt und anschließend dieses mittels Satz 4.27 zu einem exakten Design bestehend aus genau $k+1$ gleichgewichteten Designpunkten diskretisiert. Wird jeder dieser Trägerpunkte auch nur einmal genutzt, so handelt es sich um ein Design mit minimaler Anzahl von Punkten, um den Parametervektor schätzen zu können.

Durch Ausnutzung der Äquivarianz mittels linearer Transformationen (Skalierungen und Rotationen) lässt sich der Versuchsbereich — die Einheitskugel — auf beliebige Kugeln und Ellipsoide verallgemeinern.

Die Tatsache, dass bisher nur monotone Intensitätsfunktionen betrachtet wurden, ist schon sehr einschränkend. Im folgenden Kapitel soll deshalb eine weitere Klasse betrachtet werden. Zu dieser werden die logistische Regression und das Probit-Modell zählen, denn sie besitzen eine unimodale Intensitätsfunktion.

5 Unimodale Intensitätsfunktionen

Die ersten Teile dieses Kapitels beruhen auf den Ausführungen in der Publikation von Radloff und Schwabe (2019b), die eine weitere Klasse von Intensitätsfunktionen und damit insbesondere die logistische Regression und das Probit-Modell betrachten. Diese Erkenntnisse werden im Anschluss in dieser Arbeit ergänzt und erweitert und wurden bereits in Radloff und Schwabe (2023) veröffentlicht.

Im letzten Kapitel wurde an das zu untersuchende Modell der multiplen Regression die Forderung gestellt, dass die Ein-Punkt-Informationsmatrix die Form

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$$

wie in (2.2) hat. Die dabei verwendeten Intensitätsfunktionen $\lambda : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die nur vom Wert des linearen Prädiktors abhängen, sollten die Bedingungen (A1) bis (A3) und teilweise zusätzlich (A4) erfüllen. Zur besseren Nachvollziehbarkeit werden diese vier Bedingungen von Seite 54 an dieser Stelle noch einmal aufgeführt:

(A1) λ ist positiv auf \mathbb{R} und zweifach stetig differenzierbar.

(A2) Die erste Ableitung λ' ist positiv auf \mathbb{R} .

(A3) Die zweite Ableitung u'' von $u = \frac{1}{\lambda}$ ist injektiv auf \mathbb{R} .

(A4) Die Funktion $\frac{\lambda'}{\lambda}$ ist nichtwachsend.

Die Intensitätsfunktion der logistischen Regression lautet, vergleiche dazu Beispiel 2.3 und (2.7),

$$\lambda_{\text{logit}}(z) = \frac{\exp(z)}{(1 + \exp(z))^2} \cdot$$

Für das Probit-Modell ist sie, vergleiche Beispiel 2.4 und (2.8),

$$\lambda_{\text{probit}}(z) = \frac{\phi(z)^2}{\Phi(z)(1 - \Phi(z))}.$$

Dabei sind zur Erinnerung $\phi : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ mit $\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}z^2}$ und $\Phi : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ mit $\Phi(z) = \int_{(-\infty, z]} \phi(t) dt$ die Dichtefunktion beziehungsweise Verteilungsfunktion der Standard-Normalverteilung.

Die Intensitätsfunktionen des Logit- und Probit-Modells erfüllen zwar die Bedingungen (A1) und (A4), scheitern aber im Allgemeinen an (A2) und (A3). Dies wird in der grafischen Darstellung der Intensitätsfunktionen in Abbildung 5.1 ersichtlich, könnte aber auch formal gezeigt werden — der Beweis erfolgt hier nicht.

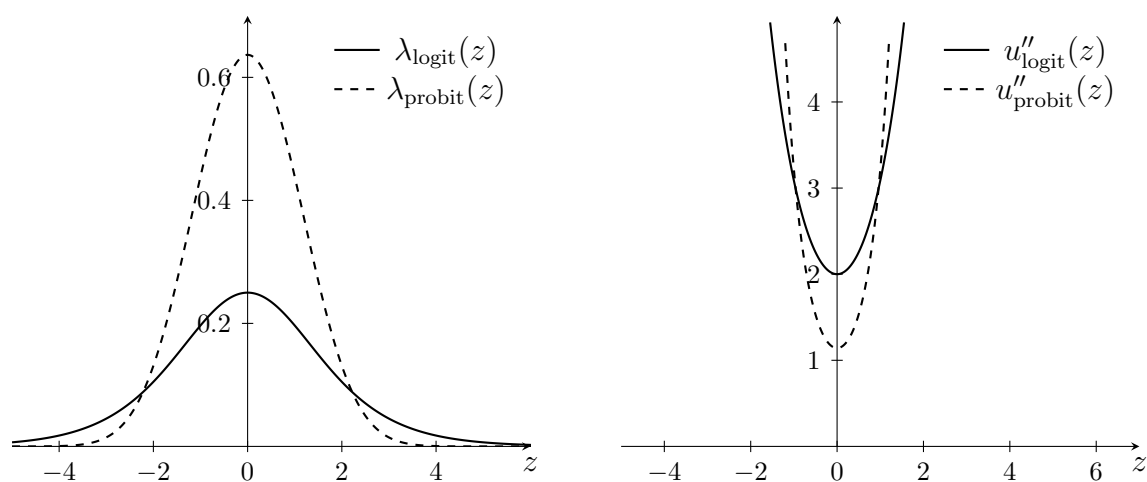


Abbildung 5.1: Darstellung der Intensitätsfunktionen λ_{logit} und λ_{probit} sowie der zweiten Ableitungen derer Reziproke zur grafischen Falsifizierung von (A2) und (A3).

Daher ergibt sich die Fragestellung: Lassen sich diese Differenzen irgendwie ausräumen, sodass auch hier (lokal) D -optimale Designs zumindest unter Ausnutzung eines Teils der bisherigen Erkenntnisse bestimmt werden können? Dieser Frage wird nun nachgegangen.

5.1 Erweiterung auf unimodale Intensitätsfunktionen

Wie bereits erwähnt, erfüllen die Intensitätsfunktionen der logistischen Regression (Logit-Modell) und des Probit-Modells zwar die Bedingungen (A1) und (A4), scheitern aber im

Allgemeinen an (A2) und (A3). Aber sie erfüllen die beiden folgenden Bedingungen (A2') und (A3'):

(A2') λ ist unimodal mit Modus $c_\lambda^{(A2')} \in \mathbb{R}$.

(A3') Es existiert ein Schwellenwert $c_\lambda^{(A3')} \in \mathbb{R}$ derart, dass die zweite Ableitung u'' von $u = \frac{1}{\lambda}$ sowohl injektiv auf $(-\infty, c_\lambda^{(A3')}]$ als auch injektiv auf $[c_\lambda^{(A3')}, \infty)$ ist.

Dabei bedeutet die Bedingung (A2') in Verbindung mit (A1), dass ein lokales Maximum $c_\lambda^{(A2')} \in \mathbb{R}$ der Intensitätsfunktion λ derart existiert, dass λ' positiv auf $(-\infty, c_\lambda^{(A2')})$ und negativ auf $(c_\lambda^{(A2')}, \infty)$ ist sowie in $c_\lambda^{(A2')}$ den Wert null annimmt. Folglich gibt es nur ein lokales Maximum, welches zeitgleich ein globales Maximum ist. Die Eigenschaft (A3') wird später benötigt, um den Äquivalenzsatz von Kiefer und Wolfowitz für D -Optimalität anwenden zu können. Die Unimodalität aus der Eigenschaft (A2') ist der Grund dafür, dass Intensitätsfunktionen, welche (A1), (A2') und (A3') erfüllen, hier als unimodale Intensitätsfunktionen bezeichnet werden.

Für den Beweis des technischen Resultats, dass das Logit- und das Probit-Modell die Bedingungen (A1), (A2'), (A3') und (A4) erfüllen, sei auf den Anhang B Lemma B.3 und Lemma B.4 verwiesen.

In einigen Beispielen, wie im Logit- und Probit-Modell, welche (A2') und (A3') erfüllen, fallen Modus und Schwellenwert zusammen ($c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')}$), welcher dann kurz als c_λ bezeichnet wird. Für das Logit- und Probit-Modell ist $c_\lambda = 0$.

Nicht nur diese beiden Modelle gehören zu dieser Klasse der unimodalen Intensitätsfunktionen. So erfüllt zum Beispiel das komplementäre log-log-Modell, siehe Ford et al. (1992) und vergleiche Beispiel 2.5, mit der Intensitätsfunktion

$$\lambda_{\text{comp log log}}(z) = \frac{\exp(2z)}{\exp(\exp(z)) - 1}$$

auch (A1), (A2') mit $c_\lambda^{(A2')} \approx 0.466011$, (A3') mit $c_\lambda^{(A3')} \approx 0.049084$ und (A4). Die Intensitätsfunktion und die zweite Ableitung derer Reziproke ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Im Vorgriff auf Bedingung (A5) von Seite 80 wird auch diese erfüllt. Zum Nachweis dieser fünf Bedingungen im komplementären log-log-Modell sei auf Anhang B Lemma B.10 verwiesen.

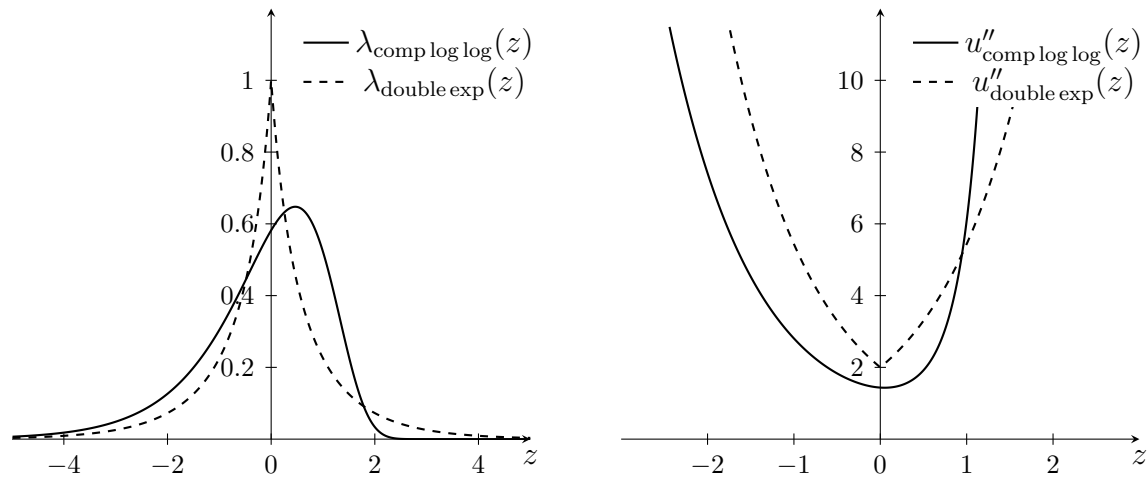


Abbildung 5.2: Darstellung der Intensitätsfunktionen $\lambda_{\text{comp log log}}$ und $\lambda_{\text{double exp}}$ sowie der zweiten Ableitungen derer Reziproke.

Da hier einige Beispiele angegeben wurden, sollte noch erwähnt werden, dass nicht zwingend alle (scheinbar) „unimodalen“ Intensitätsfunktionen die Bedingungen erfüllen. Das Doppel exponentialmodell mit der Intensitätsfunktion

$$\lambda_{\text{double exp}}(z) = \frac{1}{2 \exp(|z|) - 1},$$

vergleiche ebenfalls Ford et al. (1992), besitzt zwar nur ein Maximum in $z = 0$, siehe Abbildung 5.2, und erfüllt damit (A2'). Allerdings ist die Intensitätsfunktion und deren Reziprokes $u = \frac{1}{\lambda}$ nicht differenzierbar in $z = 0$, sodass (A1) entfällt. Somit sind die Erkenntnisse dieses Kapitels im Allgemeinen nicht auf dieses Modell anwendbar.

Zurück von den Beispielen lässt sich genau wie im Fall der monotonen Intensitätsfunktionen, vergleiche Bemerkung 4.9, unter Ausnutzung von Äquivarianz und Invarianz eine Rotation beziehungsweise orthogonale Transformation finden, sodass es ausreichend ist, für den gegebenen Parameter β^0

$$\beta_0 \in \mathbb{R} \text{ beliebig, } \beta_1 \geq 0, \quad \beta_2 = \dots = \beta_k = 0 \quad (4.1)$$

zu betrachten und das eigentlich mehrdimensionale zu einem eindimensionalen Problem zu reduzieren. Damit lässt sich wieder wie im Lemma 4.14 die Intensitätsfunktion λ , angewendet auf den linearen Prädiktor $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \beta^0$ mit gegebenem β^0 , kürzer schreiben als $q(x_1) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \beta^0)$. Hierzu sei noch angemerkt:

Bemerkung 5.1

Unabhängig von den Bedingungen (A1), (A2'), (A3') und (A4) oder dem später eingeführten (A5) ergibt sich bei $\beta_1 = 0$, dass q beziehungsweise $\lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0)$ konstant sind. Analog dem linearen Modell bilden auch hier die gleichgewichteten Eckpunkte eines regulären Simplex, dessen Ecken auf der Einheitssphäre liegen, ein (lokal) D -optimales Design. Dabei ist dessen Orientierung beliebig. Vergleiche dazu Bemerkung 4.10. Somit reduziert sich für dieses Kapitel die Betrachtung von (4.1) auf

$$\beta_0 \in \mathbb{R} \text{ beliebig, } \beta_1 > 0, \quad \beta_2 = \dots = \beta_k = 0 .$$

Unter Ausnutzung der beschriebenen Äquivarianz und mit der Erkenntnis $\lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1)$ lässt sich zu den Bedingungen konstatieren:

Bemerkung 5.2

Die Bedingung (A2) impliziert nicht (A2') und (A3) impliziert nicht (A3'). Aber aufgrund der Einheitssphäre wird nur das Intervall $x_1 \in [-1, 1]$ benötigt. Dies impliziert dann ein z zwischen $\beta_0 - \beta_1$ und $\beta_0 + \beta_1$. In diesem speziellen Fall können (A2) und (A3) auf (A2') beziehungsweise (A3') überführt werden. Dazu wird ein beliebiges $c_\lambda > \beta_0 + \beta_1$ verwendet. Damit liegt c_q außerhalb des Intervalls $[-1, 1]$ und somit außerhalb der Kugel, sodass nur ein Ast der Intensitätsfunktion betrachtet werden muss. Umgekehrt wurden für die Aussagen im letzten Kapitel die Eigenschaften von (A2) und (A3) nicht auf den ganzen reellen Zahlen \mathbb{R} , wie gefordert, benötigt, sondern nur für das Intervall innerhalb der Kugel. Trotzdem ist es im Allgemeinen nicht ausreichend die Bedingungen nur für ein bestimmtes Intervall zu fordern, da das Modell zwar von dem konkret gegebenen Parameter $\boldsymbol{\beta}^0$ abhängt, dieser Parameter aber beliebig ist. Somit liegen die Forderungen doch auf ganz \mathbb{R} .

So wie sich die Eigenschaften (A1) bis (A4) der Intensitätsfunktion λ auf die abgekürzte Form q für $\beta_1 > 0$ übertragen lassen und umgekehrt, vergleiche Lemma 4.20, passiert hier das Gleiche bei (A2') und (A3') — analog dazu mit $c_q^{(\cdot)} = \frac{c_\lambda^{(\cdot)} - \beta_0}{\beta_1}$, wobei (\cdot) durch (A2') oder (A3') zu ersetzen oder leer ist.

Es sind

$$q_{\text{logit}}(x_1) = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{(1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1))^2}$$

$$\begin{aligned}
q'_{\text{logit}}(x_1) &= \beta_1 \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) (1 - \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1))}{(1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1))^3} \\
u_{\text{logit}}(x_1) &= 2 + \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) + \exp(-(\beta_0 + \beta_1 x_1)) \\
u''_{\text{logit}}(x_1) &= \beta_1^2 (\exp(\beta_0 + \beta_1 x_1) + \exp(-(\beta_0 + \beta_1 x_1)))
\end{aligned}$$

im Logit-Modell und

$$q_{\text{probit}}(x_1) = \frac{\phi^2(\beta_0 + \beta_1 x_1)}{\Phi(\beta_0 + \beta_1 x_1) \cdot (1 - \Phi(\beta_0 + \beta_1 x_1))}$$

im Probit-Modell. Die weiteren Terme des Probit-Modells werden hier aufgrund ihrer Komplexität ausgespart. Die entsprechenden Intensitätsfunktionen λ_{logit} und λ_{probit} sowie $u''_{\text{logit}}(z)$ und $u''_{\text{probit}}(z)$ sind in Abbildung 5.1 skizziert. Erwähnt sei noch, dass $\Phi'(z) = \phi(z)$ und $\phi'(z) = -z\phi(z)$ ist.

Außerdem gilt in beiden Modellen $c_\lambda = 0$ für λ und analog $c_q = -\frac{\beta_0}{\beta_1}$ für q .

Nun wird eine fünfte Bedingung eingeführt:

(A5) $u = \frac{1}{\lambda}$ dominiert asymptotisch z^2 für $z \rightarrow \infty$.

Grundsätzlich bedeutet diese Bedingung, es muss

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \left| \frac{u(z)}{z^2} \right| = \infty$$

gelten. Anders formuliert geht $u(z) = \frac{1}{\lambda(z)}$ schneller gegen (\pm) unendlich als z^2 für $z \rightarrow \infty$. Eigentlich waren, wie oben erwähnt, alle Bedingungen nur auf den Gebieten innerhalb der Kugel, also für $z \in [\beta_0 - \beta_1, \beta_0 + \beta_1]$, zu erfüllen. Für (A5) ist gegebenenfalls die Fortsetzung der Intensitätsfunktion λ auf ganz \mathbb{R} nötig. Dies sollte, wie in Bemerkung 5.2 beschrieben, in der Regel aber kein Problem darstellen.

Bezüglich der Definition $u = \frac{1}{\lambda}$ muss ohnehin $\lambda(z) \neq 0$ für alle $z \in \mathbb{R}$ gelten. Da die Intensitätsfunktion λ der Koeffizient vor $\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top$ ist und beide die Ein-Punkt-Informationsmatrix in (2.2) bilden und diese eine positiv semidefinite Matrix ist, muss per se $\lambda(z) \geq 0$ für alle $z \in \mathbb{R}$ sein. Die Forderung $\lambda(z) \neq 0$ führt also automatisch zum ersten Teil der Bedingung (A1), welche aber hier immer vorausgesetzt wird. Das Logit-, das Probit- und das komplementäre log-log-Modell erfüllen sowohl (A5) als auch (A1), vergleiche Anhang B.

Die Bedingung (A1) führt zu $\lambda(z) > 0$ und $u(z) = \frac{1}{\lambda(z)} > 0$ für alle $z \in \mathbb{R}$. Damit kön-

nen die Betragsstriche in (A5) entfallen. Folglich ist die Bedingung (A5) in Kombination mit (A1) äquivalent zu

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{u(z)}{z^2} = \infty .$$

In Worten formuliert bedeutet dies, dass $u(z)$ schneller gegen unendlich geht als z^2 für $z \rightarrow \infty$. Mit der Definition $u(z) = \frac{1}{\lambda(z)}$ ist dies wiederum äquivalent zu

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z^2 \lambda(z)} = \infty$$

beziehungsweise

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z^2 \lambda(z) = 0 . \quad (5.1)$$

Ein weiterer Fakt bezüglich (A5), der an das Lemma 2.3 in Schmidt (2017) angelehnt ist, lautet:

Lemma 5.3

Erfüllt λ die Bedingungen (A1), (A2') und (A4) auf ganz \mathbb{R} , so gilt

$$\lim_{z \rightarrow \infty} p(z) \lambda(z) = 0$$

für beliebige Polynome p vom Grad $n \geq 0$. Insbesondere erfüllt λ dann auch (A5).

Beweis. Der Beweis folgt den Ideen aus Schmidt (2017, Lemma 2.3) und passt diese an. Zunächst werden nur die Monome z^n , $n \geq 1$, betrachtet und entsprechend die Funktionen $h_n : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$,

$$h_n(z) = z^n \lambda(z)$$

definiert. Wegen (A1) existiert die Ableitung

$$h'_n(z) = n z^{n-1} \lambda(z) + z^n \lambda'(z) = z^{n-1} \lambda(z) \left(n + z \cdot \frac{\lambda'(z)}{\lambda(z)} \right) .$$

Es ist $z^{n-1} > 0$ und wegen (A1) auch $\lambda(z) > 0$ für alle $z \in (0, \infty)$. Zur Bestimmung der potentiellen (lokalen) Extremstellen müssen die Nullstellen von $n + z \cdot \frac{\lambda'(z)}{\lambda(z)}$ ermittelt werden. $z = 0$ kann keine Nullstelle sein, sodass

$$n + z \cdot \frac{\lambda'(z)}{\lambda(z)} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{n}{z} = \frac{\lambda'(z)}{\lambda(z)} .$$

Da $-\frac{n}{z}$ für $z \in (0, \infty)$ streng monoton wachsend $(-\infty, 0)$ abdeckt und $\frac{\lambda'(z)}{\lambda(z)}$ nach (A4) monoton nichtwachsend ist und eine Nullstelle nach (A2') in $c_\lambda^{(A2')}$ besitzt, existiert genau eine Schnittstelle z_{extr} zwischen beiden Seiten der Gleichung. Dabei ist $0 < z_{\text{extr}}$ und $c_\lambda^{(A2')} < z_{\text{extr}}$.

Andererseits lässt sich $h'_n(z)$ für $z > 0$ und $z > c_\lambda^{(A2')}$ mittels (A2') auch in der Form

$$h'_n(z) = z^{n-1} \lambda'(z) \left(n \frac{\lambda(z)}{\lambda'(z)} + z \right)$$

darstellen. Es ist $z^{n-1} > 0$ und $\lambda'(z) < 0$. Mit (A1), (A2') und (A4) ist ebenfalls für alle $z > 0$ und $z > c_\lambda^{(A2')}$ der Quotient $\frac{\lambda(z)}{\lambda'(z)}$ nichtfallend in z . z ist streng monoton wachsend, sodass $n \frac{\lambda(z)}{\lambda'(z)} + z$ auch streng monoton wachsend ist. Daher vollzieht $h'_n(z)$ um dessen Nullstelle z_{extr} einen Vorzeichenwechsel von $+$ nach $-$, also z_{extr} eine Maximalstelle ist. Für alle $z > z_{\text{extr}}$ ist $h_n(z)$ folglich streng monoton fallend, aber gleichzeitig wegen (A1) auch nach unten durch null beschränkt. Somit ist $h_n(z)$ für $z \rightarrow \infty$ konvergent mit Grenzwert g_n , $n \geq 1$.

Jetzt muss noch kurz $h_0 : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ mit $h_0(z) = \lambda(z)$ und $h'_0(z) = \lambda'(z)$ betrachtet werden. Wegen (A2') gibt es nur ein Maximum in $c_\lambda^{(A2')}$ und für $z > c_\lambda^{(A2')}$ ist $h_0(z)$ streng monoton fallend. Wegen (A1) ist die Funktion nach unten durch null beschränkt, sodass $h_0(z)$ für $z \rightarrow \infty$ konvergent mit Grenzwert g_0 ist.

Nun ist

$$g_{n+1} = \lim_{z \rightarrow \infty} h_{n+1}(z) = \lim_{z \rightarrow \infty} z h_n(z) \quad \text{und} \\ g_n = \lim_{z \rightarrow \infty} h_n(z)$$

für $n \geq 0$. Angenommen $g_n > 0$, dann wäre $\lim_{z \rightarrow \infty} z h_n(z) = \infty$, also ein Widerspruch. Deshalb muss $g_n = 0$ für alle $n \geq 0$ sein. Abschließend lassen sich aus den Monomen beliebige Polynome p durch Addition erzeugen, sodass $\lim_{z \rightarrow \infty} p(z) \lambda(z) = 0$ folgt. \square

Neben Bemerkung 5.1 lassen sich auch andere Resultate aus dem Kapitel zu den Modellen mit monotoner Intensitätsfunktion problemlos auf die Situation mit unimodaler Intensitätsfunktion übertragen, da diese zuvor nicht die spezielle Struktur ausnutzten.

Hier gilt wie im Lemma 4.7, dass die Trägerpunkte eines jeden (lokal) D -optimalen Designs für die durch (2.1) und (2.2) beschriebene Klasse von nichtlinearen multiplen Regressionsmodellen mit nichtnegativer Intensitätsfunktion λ sich auf dem Rand der Kugel $\mathcal{X} = \mathbb{B}_k$, also auf der Sphäre \mathbb{S}_{k-1} , befinden. Und analog zu Lemma 4.11 ist für alle β^0 , welche (4.1) erfüllen, das D -Kriterium invariant bezüglich der Gruppen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$, also der

orthogonalen und speziellen orthogonalen Gruppe, die x_1 festhalten und nur auf x_2, \dots, x_k operieren. Somit lässt sich ein optimales Design innerhalb der Klasse der $O(k; 1)$ - oder $SO(k; 1)$ -invarianten Designs auf der Kugeloberfläche finden.

Wie im Lemma 4.12 sind für alle $\boldsymbol{\beta}^0$, welche (4.1) erfüllen, die bezüglich der Gruppen $O(k; 1)$ und $SO(k; 1)$ invarianten Designs (auf der Sphäre) durch $\xi_1 \otimes \bar{\eta}$ gegeben. Dabei ist ξ_1 ein marginales Design auf der Komponente x_1 und $\bar{\eta}$ ein spezieller Markov-Kern auf den Komponenten x_2, \dots, x_k . Für festes $x_1 \in [-1, 1]$ ist der Kern $\bar{\eta}(x_1, \cdot)$ die (stetige) Gleichverteilung auf der Oberfläche einer $(k - 1)$ -dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{1 - x_1^2}$. Dieser Orbit kann mit $x_1 \in \{-1, 1\}$ wiederum zu einem einzelnen Punkt degenerieren und somit ein Ein-Punkt-Maß nach sich ziehen.

Daraus lässt sich dann auch die Fisher-Informationsmatrix, vergleiche Lemma 4.14,

$$\mathbf{M}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0) = \left(\begin{array}{cc|c} \int q \, d\xi_1 & \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \mathbb{O}_{2 \times (k-1)} \\ \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 & \\ \hline \mathbb{O}_{(k-1) \times 2} & & \frac{1}{k-1} \int q (1 - \text{id}^2) \, d\xi_1 \, \mathbb{I}_{k-1} \end{array} \right) \quad (4.2)$$

herleiten.

Bei der näheren Analyse der Struktur der Sensitivitätsfunktion, siehe (2.14),

$$\psi(\mathbf{x}, \xi_1 \otimes \bar{\eta}) = \lambda(\mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{M}^{-1}(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

zur Anwendung des Äquivalenzsatzes von Kiefer und Wolfowitz für D -Optimalität, vergleiche Satz 2.8, wird wiederum festgestellt, dass die Sensitivitätsfunktion dann die Form

$$\psi(\mathbf{x}, \xi_1 \otimes \bar{\eta}) = q(x_1) \cdot p_1(x_1) \quad \text{für} \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)^\top \in \mathbb{S}_{k-1}$$

hat, siehe Lemma 4.16. Hierbei ist p_1 ein Polynom vom Grad (höchstens) 2 in x_1 .

Ebenso lässt sich ableiten, dass es nicht nur genau zwei Trägerstellen der Orbits des (lokal) D -optimalen Designs geben kann. Zumindest steht auch hier wieder fest, dass eine Trägerstelle des marginalen Designs nicht ausreicht, da so die Informationsmatrix nicht regulär und der Parametervektor $\boldsymbol{\beta}$ nicht vollständig schätzbar wäre.

Diese Analyse erfolgt nun im nächsten Lemma. Dabei wird im Gegensatz zur Beweisführung aus Lemma 4.22 mittels verallgemeinerten Mittelwertsatzes der Differentialrechnung eine andere Idee aufgegriffen.

Lemma 5.4

Erfüllt die (abgekürzte) Intensitätsfunktion q die Bedingungen (A1), (A2') und (A3'), dann besteht das (lokal) D -optimale marginale Design ξ_1^* entweder aus genau zwei Trägerstellen $x_{11}^*, x_{12}^* \in [-1, 1]$ oder aus genau drei Trägerstellen $x_{11}^* = 1$, $x_{12}^* \in (-1, 1)$ und $x_{13}^* = -1$.

Wenn q zusätzlich (A5) erfüllt, dann ist nur der Fall mit zwei Trägerstellen möglich.

Beweis. Dieser Beweis beruht wieder (vergleiche Lemma 4.22) auf dem Äquivalenzsatz von Kiefer und Wolfowitz für D -Optimalität. Es muss

$$k + 1 \geq \psi(\mathbf{x}, \xi_1^* \otimes \bar{\eta}) = q(x_1) \cdot p_1(x_1) \quad \text{für alle } \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)^\top$$

überprüft werden. Dies ist wieder äquivalent zu

$$\frac{p_1(x_1)}{k + 1} - \frac{1}{q(x_1)} \leq 0. \quad (5.2)$$

Gleichheit herrscht in den Trägerstellen des optimalen Designs.

Angenommen, ξ_1^* hätte nur genau eine Trägerstelle. So wäre die Determinante des ersten Blocks der Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi_1^* \otimes \bar{\eta})$ im Lemma 4.14 gleich null und die Inverse der Informationsmatrix und folglich das Polynom p_1 würden nicht existieren, was zu einem Widerspruch führt. Damit hat ξ_1^* mindestens zwei Trägerstellen.

Bezeichne $v(x_1)$ die linke Seite der Ungleichung (5.2). Die zweite Ableitung von v ist $v''(x_1) = \tilde{c} - \left(\frac{1}{q(x_1)}\right)''$, wobei \tilde{c} die Konstante ist, die beim Ableiten des Polynoms $\frac{p_1(x_1)}{k+1}$ vom Grad 2 (siehe Lemma 4.14) entsteht. Die Bedingung (A3') besagt, dass v'' höchstens zwei Nullstellen haben kann. Aufgrund der Differenzierbarkeit und der Stetigkeit der ersten Ableitung v' von v hat v höchstens drei Nullstellen. Das heißt, v hat höchstens drei potentielle innere (lokale) Extremstellen mit abwechselnden Minima und Maxima. Handelt es sich um Minimum-Maximum-Minimum, dann können $x_{11}^* = 1$, $x_{12}^* \in (-1, 1)$ und $x_{13}^* = -1$ die drei Stellen für die Maxima von v sein, wobei 1 und -1 Randstellen sind. Gilt zusätzlich (A5), so ist $\lim_{x_1 \rightarrow \infty} v(x_1) = -\infty$, sodass bei 1 kein Randmaximum vorliegen kann, sofern die anderen drei (lokalen) Extremstellen kleiner als 1 sind. Im Falle von (A5) ist die einzige Situation mit genau drei inneren Extremstellen Maximum-Minimum-Maximum. In allen anderen Fällen gibt es höchstens zwei Maxima (innere oder auf dem Rand) und folglich höchstens zwei Trägerstellen für ξ_1^* . \square

Der folgende Satz charakterisiert die Trägerstellen des optimalen marginalen Designs ξ_1^* , sofern dieses genau zwei Trägerstellen besitzt. Während die Fälle (a) und (b) mit Satz 4.27

und den Resultaten aus Radloff und Schwabe (2019a) einhergehen, liegt das eigentliche Hauptaugenmerk auf dem Fall (c), wenn nämlich $c_q^{(A2')} = \frac{c_\lambda^{(A2')} - \beta_0}{\beta_1}$ oder $c_q^{(A3')} = \frac{c_\lambda^{(A3')} - \beta_0}{\beta_1}$ in $[-1, 1]$ — also innerhalb der Kugel — liegen. Dort ist das Verhalten nicht so einfach. Es handelt sich dabei um die Wechselzone zwischen (a) und (b). Dazu werden häufig numerische Berechnungen benutzt, wobei diese in einigen Spezialfällen weiter in ihrer Komplexität reduziert werden können. Dazu aber später mehr.

Es wird mit $k \geq 2$ begonnen. Dieser Satz entstammt bis auf minimale Änderungen Radloff und Schwabe (2019b).

Satz 5.5

Für $k \geq 2$ und in der Situation von Lemma 5.4 und mit q , welches (A5) erfüllt, besitzt das (lokal) D -optimale marginale Design ξ_1^* genau 2 Trägerstellen x_{11}^* und x_{12}^* mit $x_{11}^* > x_{12}^*$ und Gewichten $w_1 = \xi_1^*(x_{11}^*)$ und $w_2 = \xi_1^*(x_{12}^*)$.

Es gibt drei Fälle:

- (a) Ist $c_q^{(A2')} > 1$ und $c_q^{(A3')} \notin [-1, 1]$, dann sind $x_{11}^* = 1$, $w_1 = \frac{1}{k+1}$, $w_2 = \frac{k}{k+1}$ und $x_{12}^* \in (-1, 1)$ ist Lösung der Gleichung

$$\frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \frac{2(1 + kx_{12}^*)}{k(1 - x_{12}^{*2})}. \quad (5.3)$$

Gilt zusätzlich (A4), so ist x_{12}^* eindeutig.

- (b) Ist $c_q^{(A2')} < -1$ und $c_q^{(A3')} \notin [-1, 1]$, dann sind $x_{12}^* = -1$, $w_1 = \frac{k}{k+1}$, $w_2 = \frac{1}{k+1}$ und $x_{11}^* \in (-1, 1)$ ist Lösung der Gleichung

$$\frac{q'(x_{11}^*)}{q(x_{11}^*)} = \frac{2(-1 + kx_{11}^*)}{k(1 - x_{11}^{*2})}. \quad (5.4)$$

Gilt zusätzlich (A4), so ist x_{11}^* eindeutig.

(c) Anderenfalls ist $c_q^{(A2')} \in [-1, 1]$ oder $c_q^{(A3')} \in [-1, 1]$.

Seien $x, y \in \mathbb{R}$ mit $x > y$ und $\alpha \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Lösung des Gleichungssystems

$$\frac{q'(x)}{q(x)} + \frac{2}{x-y} + (k-1) \frac{q'(x)(1-x^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(x)(-2x)(\frac{1}{2}-\alpha)}{q(x)(1-x^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(y)(1-y^2)(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \quad (5.5)$$

$$\frac{q'(y)}{q(y)} - \frac{2}{x-y} + (k-1) \frac{q'(y)(1-y^2)(\frac{1}{2}+\alpha) + q(y)(-2y)(\frac{1}{2}+\alpha)}{q(x)(1-x^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(y)(1-y^2)(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \quad (5.6)$$

$$\frac{1}{\frac{1}{2}-\alpha} - \frac{1}{\frac{1}{2}+\alpha} + (k-1) \frac{q(x)(1-x^2) - q(y)(1-y^2)}{q(x)(1-x^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(y)(1-y^2)(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \quad (5.7)$$

(c0) Sind $x, y \in (-1, 1)$ mit $x > y$ und $\alpha \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ eine Lösung des Gleichungssystems, dann sind die beiden Trägerstellen $x_{11}^* = x$, $x_{12}^* = y$ mit Gewichten $w_1 = \frac{1}{2} - \alpha$ und $w_2 = \frac{1}{2} + \alpha$.

(c1) Ist $x \geq 1$ und $y \in (-1, 1)$, dann sind $x_{11}^* = 1$, $w_1 = \frac{1}{k+1}$, $w_2 = \frac{k}{k+1}$ und $x_{12}^* \in (-1, 1)$ ist Lösung der Gleichung (5.3).

(c2) Ist $y \leq -1$ und $x \in (-1, 1)$, dann sind $x_{12}^* = -1$, $w_1 = \frac{k}{k+1}$, $w_2 = \frac{1}{k+1}$ und $x_{11}^* \in (-1, 1)$ ist Lösung der Gleichung (5.4).

Beweis. Im Fall (a) sind für alle $x_1 \in [-1, 1]$ die Bedingungen (A1), (A2) und (A3) erfüllt. Und dies ist genau die Situation von Satz 4.26.

Im Fall (b) sind für alle $x_1 \in [-1, 1]$ die Bedingungen (A1) und (A3) erfüllt, aber λ beziehungsweise q sind streng monoton fallend. Durch die Anwendung der Spiegelung $x_1 \mapsto -x_1$ liegt auch (A2) vor. Mittels Äquivarianz muss das optimale Design aus Satz 4.26 ebenfalls nur gespiegelt werden. Somit liegt der Punkt der maximalen Intensität bei -1 .

Im Fall (c) lautet analog zu (4.9) die logarithmierte Determinante der Informationsmatrix $\mathbf{M}(\xi_1 \otimes \bar{\eta})$ mit einem marginalen Design mit 2 Trägerstellen

$$\begin{aligned} & \log q(x_{11}^*) + \log q(x_{12}^*) + \log(x_{11}^* - x_{12}^*)^2 + \log(\frac{1}{2} - \alpha) + \log(\frac{1}{2} + \alpha) \\ & + (k-1) \left[-\log(k-1) + \log \left(q(x_{11}^*)(1-x_{11}^{*2})(\frac{1}{2}-\alpha) + q(x_{12}^*)(1-x_{12}^{*2})(\frac{1}{2}+\alpha) \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Dies muss nun unter (c) maximiert werden. Sind $x_{11}^* \notin (-1, 1)$ oder $x_{12}^* \notin (-1, 1)$ und $\alpha \notin (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, dann muss es ein Randmaximum geben und es muss $x_{11}^* = 1$ beziehungsweise $x_{12}^* = -1$ gelten. Dies führt zu den Situationen (c1) beziehungsweise (c2), welche analog zu (a) beziehungsweise (b) sind. \square

Bemerkung 5.6

Die Fallunterscheidung im Satz 5.5 bedarf noch einer kurzen Erläuterung. In den ersten beiden Fällen (a) und (b) liegen Modus $c_q^{(A2')}$ und Schwellenwert $c_q^{(A3')}$ außerhalb des Intervalls $[-1, 1]$ beziehungsweise außerhalb der Einheitskugel. Dadurch lassen sich beide direkt durch Anwendung von Satz 4.26 bearbeiten.

Im Fall (c) liegen Modus und Schwellenwert hingegen nicht mehr beide außerhalb des Intervalls $[-1, 1]$. Somit lässt sich hier Satz 4.26 nicht anwenden, sondern es muss das Gleichungssystem bestehend aus den Gleichungen (5.5), (5.6) und (5.7) gelöst werden. Liegen die Lösungen x und y für die beiden Trägerstellen x_{11}^* und x_{12}^* der Orbits in $(-1, 1)$, also innerhalb der Kugel, und die Lösung α in $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ und bildet daher reale Gewichte $\frac{1}{2} - \alpha$ und $\frac{1}{2} + \alpha$, so ist ein optimales Design gefunden — Fall (c0). Anderenfalls muss es sich um ein Randmaximum handeln, wobei einer der Orbits zu einem Pol degeneriert ist, also entweder $x_{11} = 1$ bei (c1) oder $x_{12} = -1$ bei (c2). Dies bestimmt dann auch die Gewichte des Designs, sodass nur noch die Position des anderen Orbits wie in (a) und (b) ermittelt werden muss.

Somit gehen die eigentlichen drei Fälle (a), (b) und (c) zu den drei Fällen (c0) mit genau zwei nicht ausgearteten Orbits, (a) mit (c1) sowie (b) mit (c2), die jeweils ein Pol und ein Orbit mit festen Gewichten umfassen, über.

Eine Illustration dieses Sachverhaltes befindet sich in Abbildung 5.3 für die logistische Regression und in Abbildung 5.4 für das Probit-Modell auf den folgenden Seiten.

Für $k = 1$ vereinfachen sich die Berechnungen erheblich. Es gilt der folgende Satz, welcher sich in ähnlicher Form auch in Ford et al. (1992, Abschnitt 6) oder Biedermann et al. (2006) wiederfindet.

Satz 5.7

In der gleichen Situation wie Satz 5.5 aber mit $k = 1$ sind die Gewichte $w_1 = w_2 = \frac{1}{2}$ und es können folgende drei Fälle auftreten:

(a) Ist $c_q^{(A2')} > 1$ und $c_q^{(A3')} \notin [-1, 1]$, dann ist $x_{11}^* = 1$. Wenn x eine Lösung von

$$\frac{q'(x)}{q(x)} = \frac{2}{1-x} \quad (5.9)$$

ist und $x \in [-1, 1)$ liegt, dann ist $x_{12}^* = x$. Sonst $x_{12}^* = -1$.

Gilt zusätzlich (A4), so ist die Lösung x_{12}^* eindeutig.

(b) Ist $c_q^{(A2')} < -1$ und $c_q^{(A3')} \notin [-1, 1]$, dann ist $x_{12}^* = -1$. Wenn x eine Lösung von

$$\frac{q'(x)}{q(x)} = \frac{-2}{1+x} \quad (5.10)$$

ist und $x \in (-1, 1]$ liegt, dann ist $x_{11}^* = x$. Sonst $x_{11}^* = 1$.
Gilt zusätzlich (A4), so ist die Lösung x_{11}^* eindeutig.

(c) Anderenfalls ist $c_q^{(A2')} \in [-1, 1]$ oder $c_q^{(A3')} \in [-1, 1]$.

Seien $x, y \in \mathbb{R}$ mit $x > y$ Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \frac{q'(x)}{q(x)} + \frac{2}{x-y} &= 0 \\ \frac{q'(y)}{q(y)} - \frac{2}{x-y} &= 0. \end{aligned}$$

(c0) Sind $x, y \in (-1, 1)$ mit $x > y$ eine Lösung des Gleichungssystems, dann sind die beiden Trägerstellen $x_{11}^* = x$ und $x_{12}^* = y$.

(c1) Ist $x \geq 1$ und $y \in (-1, 1)$, dann sind $x_{11}^* = 1$ und $x_{12}^* \in (-1, 1)$ ist Lösung der Gleichung (5.9).

(c2) Ist $y \leq -1$ und $x \in (-1, 1)$, dann sind $x_{12}^* = -1$ und $x_{11}^* \in (-1, 1)$ ist Lösung der Gleichung (5.10).

Beweis. Die Fälle (a) und (b) ergeben sich wieder direkt aus Satz 4.26 für $k = 1$.

Im Fall (c) lautet die logarithmierte Determinante der Informationsmatrix (5.8) für $k = 1$

$$\log q(x_{11}^*) + \log q(x_{12}^*) + \log(x_{11}^* - x_{12}^*)^2 + \log\left(\frac{1}{2} - \alpha\right) + \log\left(\frac{1}{2} + \alpha\right).$$

Dies nach α abgeleitet und null gesetzt liefert direkt $\alpha = 0$. Nach x und y ergibt sich das Gleichungssystem. Der Rest ist analog zu Satz 5.5. \square

Aber nun soll der Satz 5.5 in Anwendung aufgezeigt werden.

5.2 Beispiele

5.2.1 Die logistische Regression und das Probit-Modell

Wie bereits erwähnt und in Anhang B Lemma B.3 und Lemma B.4 gezeigt, erfüllen sowohl das Logit- als auch das Probit-Modell die Bedingungen (A1), (A2'), (A3'), (A4) und (A5). Dabei ist $c_\lambda = c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = 0$. Dies ist die Stelle des Maximums der Intensitätsfunktion λ und analog für q ist $c_q = c_q^{(A2')} = c_q^{(A3')} = -\frac{\beta_0}{\beta_1}$. Da $\beta_1 > 0$ ist, hängt c_q von $-\beta_0$ ab. (Für $\beta_1 = 0$ vergleiche Bemerkung 5.1.) Oft wird $\beta_1 = 1$ gesetzt, sodass $c_q = -\beta_0$ ist. Daher wird im Folgenden sich nur auf $-\beta_0$ anstatt auf β_0 bezogen.

Unter Verwendung von Satz 5.5 können die beiden Trägerstellen des marginalen Designs ξ_1^* im Logit-Modell bestimmt werden. In Abbildung 5.3 erfolgte dies numerisch für $-\beta_0 \in [-1.2, 1.2]$ und festes $\beta_1 = 1$ und den Dimensionen $k = 3$ und $k = 6$. Der Fall (c0), bei dem tatsächlich zwei innere Trägerstellen vorliegen, tritt nur für $-\beta_0 \in (-0.403, 0.403)$ (gerundet) bei $k = 3$ und für $-\beta_0 \in (-0.480, 0.480)$ bei $k = 6$ ein. Das Probit-Modell zeigt, wie in Abbildung 5.4 zu sehen, ein fast identisches Verhalten. Hier ist das interes-

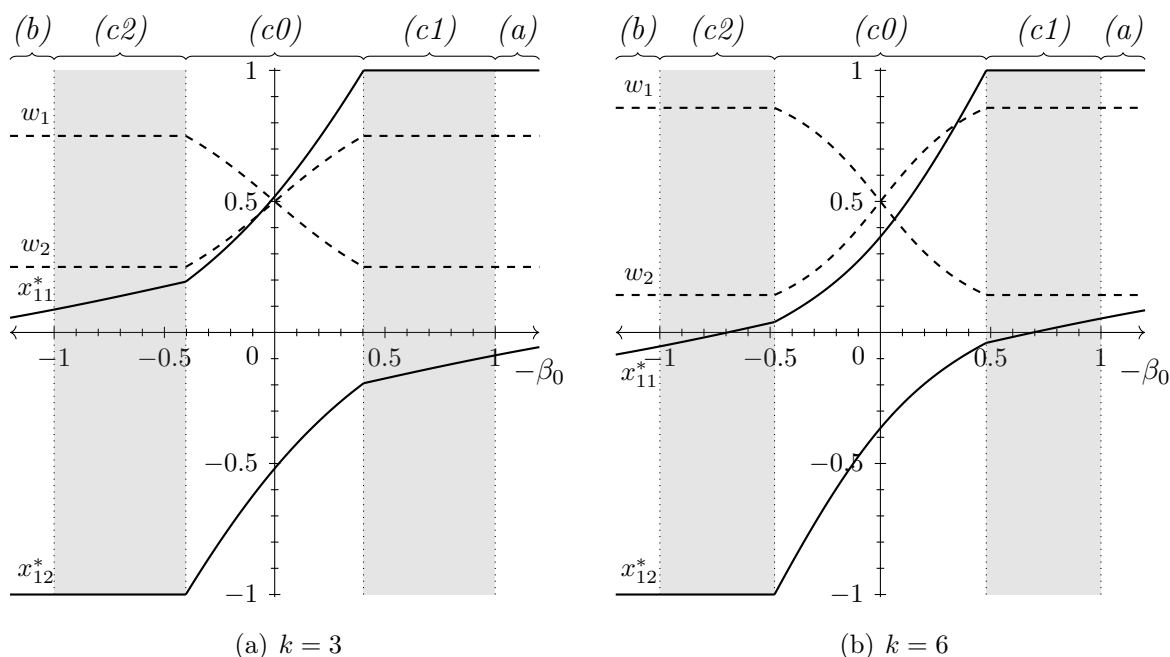


Abbildung 5.3: Logit-Modell für feste Dimension $k = 3$ (linke Abbildung) beziehungsweise $k = 6$ (rechte Abbildung) mit $\beta_1 = 1$: Abhängigkeit von x_{11}^* und x_{12}^* (durchgezogene Linien) und deren zugehörige Gewichte w_1 und $w_2 = 1 - w_1$ (gestrichelte Linien) von $c_q = -\beta_0 \in [-1.2, 1.2]$.

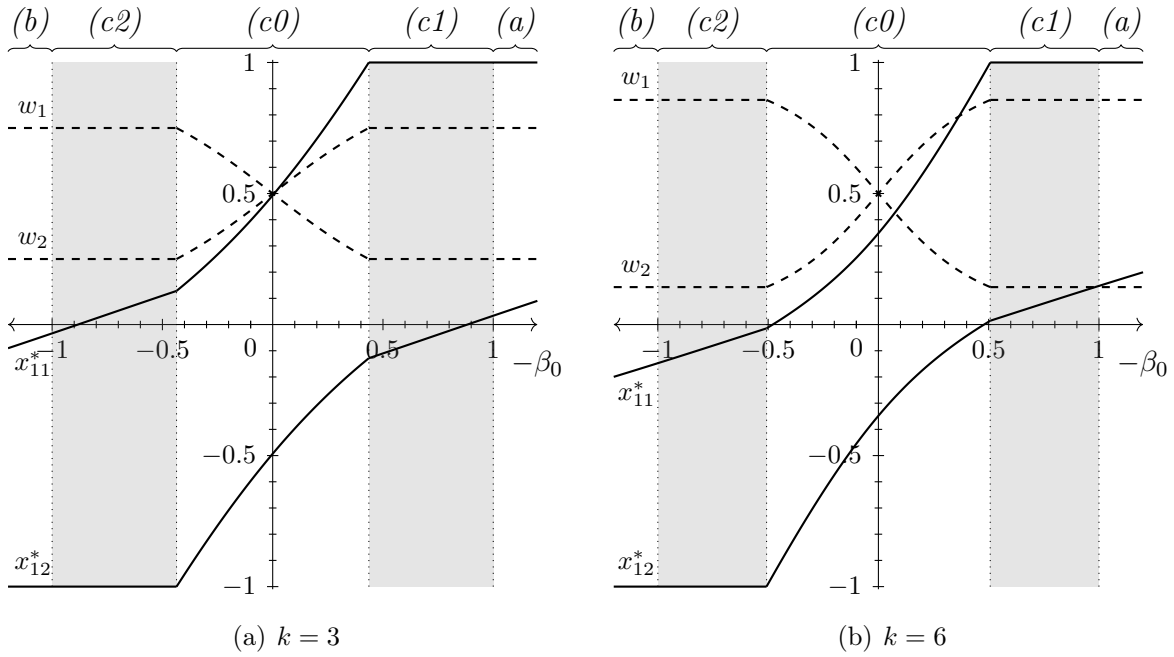


Abbildung 5.4: Probit-Modell für feste Dimension $k = 3$ (linke Abbildung) beziehungsweise $k = 6$ (rechte Abbildung) mit $\beta_1 = 1$: Abhängigkeit von x_{11}^* und x_{12}^* (durchgezogene Linien) und deren zugehörige Gewichte w_1 und $w_2 = 1 - w_1$ (gestrichelte Linien) von $c_q = -\beta_0 \in [-1.2, 1.2]$.

sierende Intervall für $-\beta_0$, wo es zwei innere Trägerstellen gibt, $(-0.436, 0.436)$ für $k = 3$ und $(-0.507, 0.507)$ für $k = 6$. Hierzu sei auf Beispiel 5.16 verwiesen.

Aber es gibt trotzdem einen großen Unterschied, der in den Abbildungen 5.3 und 5.4 nicht ersichtlich ist, nämlich das Verhalten im Unendlichen im Fall (a) beziehungsweise (b). Für $-\beta_0 \rightarrow \infty$ oder $-\beta_0 \rightarrow -\infty$ konvergiert im Probit-Modell die einzelne innere Trägerstelle von unten gegen 1 beziehungsweise von oben gegen -1 , also der Orbit des Designs wandert zu dem Pol, welcher auch Designpunkt ist. Im Logit-Modell hingegen konvergiert die innere Trägerstelle gegen

$$\begin{cases} \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} & \text{für } \beta_1 > 0 \\ -\frac{1}{k} & \text{für } \beta_1 = 0. \end{cases}$$

Für $\beta_1 = 1$ ergibt sich folglich $-1 + \sqrt{\frac{4}{3}} \approx 0.1547$ ($k = 3$) und $-1 + \sqrt{\frac{5}{3}} \approx 0.2910$ ($k = 6$).

Wie im Satz 4.27 kann nun wiederum der Orbit, der zu den inneren Trägerstellen x_{12}^* beziehungsweise x_{11}^* im Fall (a) oder (b) gehört, durch die Eckpunkte eines $(k - 1)$ -dimensionalen regulären Simplex diskretisiert werden. So liegen folglich exakte (lokal) D -

optimale Designs mit identischen Gewichten $\frac{1}{k+1}$ vor.

Die Diskretisierung im Fall (c) ist hingegen schwieriger. Sind die Gewichte w_1 und w_2 geeignet, so kann die Diskretisierung mittels $(k-1)$ -dimensionaler regulärer Simplexe, Kreuzpolytope und Würfel oder anderer Diskretisierungen der Gleichverteilung auf der Kugeloberfläche, wie oben in Bemerkung 4.6 erwähnt, erfolgen.

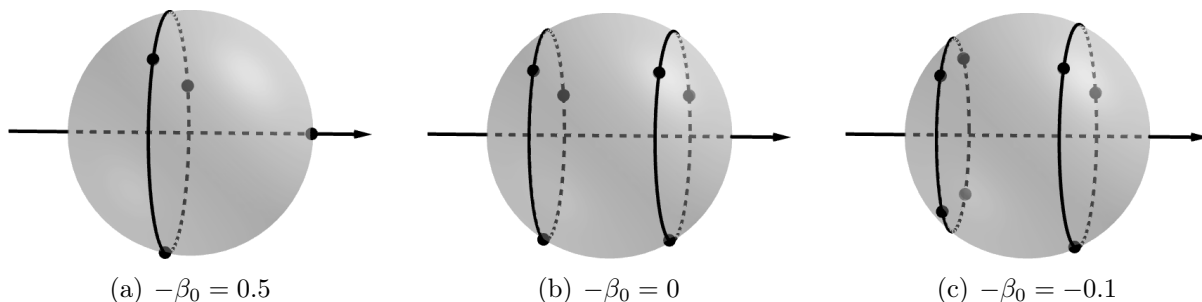


Abbildung 5.5: Logit-Modell: Diskretisierte (lokal) D -optimale Designs für $\beta_1 = 1$ und $k = 3$.

In der Abbildung 5.5 werden drei Beispiele zur logistischen Regression mit $\beta_1 = 1$ zur Dimension $k = 3$ betrachtet. Die Werte für $-\beta_0$ sind derart gewählt, um verschiedene Möglichkeiten von exakten und beinahe exakten (gerundeten) Designs zu illustrieren.

Für $-\beta_0 = 0.5$ ergeben sich aus Satz 5.5 die Positionen $x_{11}^* = 1$ für den Pol und $x_{12}^* \approx -0.18$ für die Position des Orbits. Dabei ist der Pol mit $w_1 = \xi_1^*(x_{11}^*) = \frac{1}{4}$ gewichtet. Der Orbit mit Gewicht $w_2 = 1 - w_1 = \xi_1^*(x_{12}^*) = \frac{3}{4}$ kann durch die drei Eckpunkte eines gleichseitigen Dreiecks (zweidimensionaler Simplex) diskretisiert werden. Es entsteht ein exaktes Design mit minimaler Anzahl von Trägerpunkten.

Für $-\beta_0 = 0$ gibt es neben der Rotationsinvarianz ($O(k; 1)$ - beziehungsweise $SO(k; 1)$ -Invarianz) eine zusätzliche Invarianz — die Spiegelung in x_1 -Richtung. Insbesondere ist die Intensitätsfunktion des Logit-Modells symmetrisch. Deshalb müssen auch die beiden Trägerstellen des marginalen Designs ξ_1 symmetrisch um 0, also $x_{11}^* = -x_{12}^*$, und die Gewichte gleich $\xi_1^*(x_{11}^*) = \xi_1^*(x_{12}^*) = 0.5$ sein. Durch Berechnungen ergibt sich $x_{11}^* = -x_{12}^* \approx 0.52$. Auch diese beiden Orbits können beispielsweise durch die Eckpunkte von gleichseitigen Dreiecken oder Quadraten diskretisiert werden, es entsteht ein exaktes Design mit sechs oder acht gleichgewichteten Trägerpunkten. Aber im Gegensatz zum Fall mit $-\beta_0 = 0.5$ ist dies kein Design mit minimaler Anzahl von Designpunkten. Somit besteht durchaus die Möglichkeit, dass ein ebenfalls (lokal) D -optimales Design existiert, welches weniger Punkte benötigt. Deshalb wird im Abschnitt 5.4 eine Möglichkeit aufgezeigt, wie sich die Anzahl der Trägerpunkte in solch einem Fall auf die minimale Anzahl reduzieren lässt, ohne die Informationsmatrix zu verändern.

Für $-\beta_0 = -0.1$ entsteht ein optimales aber verallgemeinertes Design ξ^* mit $x_{11}^* \approx 0.42$, $x_{12}^* \approx -0.62$ und $\xi_1^*(x_{11}^*) \approx 0.4297$. Es ist $0.4297 \approx \frac{3}{7}$. Deshalb bietet es sich an, ein gerun-

detes Design ξ^{\approx} mit den gleichen Orbit-Trägerstellen x_{11}^* und x_{12}^* zu wählen. Die Gewichte des marginalen Designs werden dann zu $\xi_1^{\approx}(x_{11}^*) = \frac{3}{7}$ und $\xi_1^{\approx}(x_{12}^*) = \frac{4}{7}$ angepasst. Folglich lässt sich der Orbit zu x_{11}^* durch die drei Eckpunkte eines zweidimensionalen Simplex — eines gleichseitigen Dreiecks — und der Orbit zu x_{12}^* durch die vier Eckpunkte eines zweidimensionalen Würfels oder Kreuzpolytops — eines Quadrates — ersetzen. Trotz der kleinen Rundungen ist dieses exakte Design, das aus sieben gleichgewichteten Trägerpunkten besteht, nahe einem optimalen Design. Um dies zu verifizieren, lässt sich die D -Effizienz, siehe (2.11), berechnen, welche das gerundete Design ξ^{\approx} mit dem (nicht gerundeten) D -optimalen Design ξ^* vergleicht — hier $k = 3$, $p = 4$ und $\beta^0 = (0.1, 1, 0, 0)^\top$:

$$\text{Eff}_D(\xi^{\approx}, \beta^0) = \frac{\det(\mathbf{M}(\xi^{\approx}, \beta^0))^{\frac{1}{p}}}{\det(\mathbf{M}(\xi_{\beta^0}^*, \beta^0))^{\frac{1}{p}}} \approx 0.999757 .$$

Im Abschnitt 5.4 werden derartige Effizienzbetrachtungen fortgesetzt, wobei dabei sogar wieder nur Designs betrachtet werden, die eine minimale Anzahl von Trägerpunkten aufweisen, dies war bei der hier gezeigten Diskretisierung bei $-\beta_0 = -0.1$ mit sieben Punkten noch nicht erfüllt.

Die beiden zunächst betrachteten Beispiele, logistische Regression und Probit-Modell, erfüllen bereits eine Eigenschaft, die im nächsten Abschnitt näher beleuchtet werden soll und eine einfachere Berechnung der Orbitpositionen und Orbitgewichte erlauben. Sie besitzen sogenannte symmetrische Intensitätsfunktionen, siehe Abschnitt 5.3. Deshalb soll hier noch kurz ein Beispiel mit einer Intensitätsfunktion betrachtet werden, die nicht symmetrisch ist.

5.2.2 Das komplementäre log-log-Modell

Das komplementäre log-log-Modell, vergleiche Seite 77 und Beispiel 2.5, besitzt eine derartige Intensitätsfunktion, die schon aufgrund der unterschiedlichen Lage von Modus $c_\lambda^{(A2')} \approx 0.466011$ und Schwellenwert $c_\lambda^{(A3')} \approx 0.049084$ nicht symmetrisch sein kann, siehe dazu Anhang B Lemma B.10 und Bemerkung B.11. Da der Fokus in dieser Arbeit nicht auf diesem Modell liegt, werden hier die optimalen Orbitpositionen und Gewichte in Abhängigkeit von β_0 nur für die Dimension $k = 3$ bei festem $\beta_1 = 1$ numerisch geplottet.

In Abbildung 5.6 lässt sich leicht erkennen, dass der interessierende Bereich (Fall $(c0)$), nämlich $-\beta_0 \in (-0.356, 0.495)$ (gerundet), mit zwei inneren Trägerstellen weder sym-

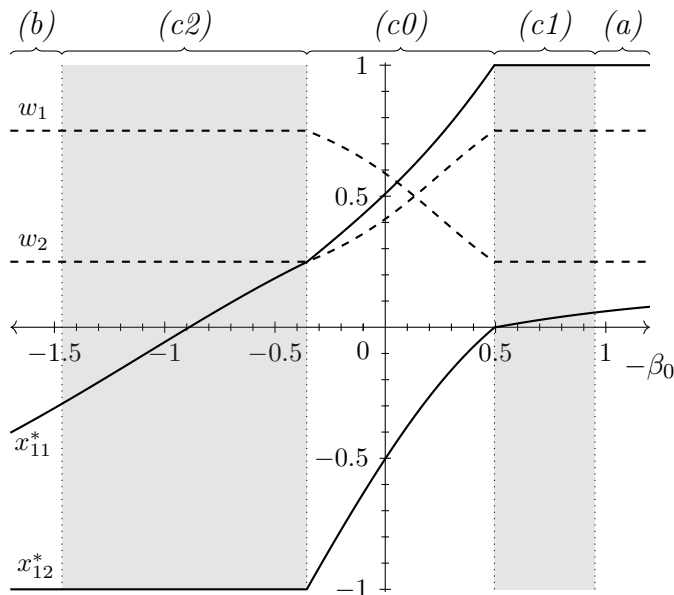


Abbildung 5.6: Komplementäres log-log-Modell für feste Dimension $k = 3$ mit $\beta_1 = 1$: Abhängigkeit von x_{11}^* und x_{12}^* (durchgezogene Linien) und deren zugehörige Gewichte w_1 und $w_2 = 1 - w_1$ (gestrichelte Linien) von $-\beta_0 \in [-1.7, 1.2]$.

metrisch um null noch symmetrisch um Modus oder Schwellenwert ist. Auch die Verläufe der Gewichte oder Orbitpositionen zueinander sowie die Bereiche $[-1.466, -0.356]$ und $[0.495, 0.951]$ (gerundet) für die Fälle (c2) beziehungsweise (c1) scheinen keiner offensichtlichen Symmetrie zu folgen.

Interessant beim komplementären log-log-Modell ist aber auch das sich unterscheidende Verhalten im Unendlichen. Für $-\beta_0 \rightarrow \infty$ konvergiert die innere Trägerstelle ähnlich der logistischen Regression gegen

$$\begin{cases} \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2}{k}\beta_1 + \beta_1^2}}{\beta_1} & \text{für } \beta_1 > 0 \\ -\frac{1}{k} & \text{für } \beta_1 = 0. \end{cases}$$

Mit $\beta_1 = 1$ und $k = 3$ ergibt sich gleichfalls $-1 + \sqrt{\frac{4}{3}} \approx 0.1547$. Für $-\beta_0 \rightarrow -\infty$ bewegt sich die innere Trägerstelle allerdings gegen den Pol -1 , der in diesen Designs ein Versuchspunkt ist.

Nach diesem kurzen Abstecher zu einem Modell mit nichtsymmetrischer Intensitätsfunktion soll nun den symmetrischen Intensitätsfunktionen wieder die volle Aufmerksamkeit geschenkt werden.

5.3 Symmetrische Intensitätsfunktion

In Radloff und Schwabe (2019b) wurde bereits im Abschnitt Zusammenfassung und Diskussion eine interessante Beobachtung für Modelle mit Intensitätsfunktionen festgehalten, bei denen Modus und Schwellenwert zusammenfallen ($c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = c_\lambda$). Dies tritt beispielsweise im Logit- und Probit-Modell mit $c_\lambda = 0$ auf.

„There is one property observed in the numerical calculations for both the logit and probit model [...] which deserves further investigations: If the intensity function λ is symmetrical, which means $\lambda(c_\lambda + x) = \lambda(c_\lambda - x)$, then the two support points are also symmetric around c_λ as long as these support points are in the interior of the marginal design region. [...] For the one-dimensional case this has been proved in Ford et al. (1992, Section 6.5 and 6.6), but this proof cannot be extended to higher dimensions directly because of the additional asymmetric term $(1 - x_1^2)$.“

Radloff und Schwabe (2019b, Abschnitt „Summary and discussion“)

Diese Aussage ist so jedoch nur im standardisierten Fall $\beta_0 = 0$ und $\beta_1 = 1$ richtig. Im allgemeinen Fall sind die beiden Trägerstellen zwar auch symmetrisch, aber nicht zu c_λ , sondern zu $c_q = \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1}$. Die nun folgenden Erkenntnisse wurden bereits in Radloff und Schwabe (2023, Abschnitt 4) veröffentlicht. Sie werden aber trotzdem hier ausführlich erörtert. Den Start macht deshalb die Definition einer symmetrischen Intensitätsfunktion.

Definition 5.8

Eine Intensitätsfunktion λ , bei der Modus und Schwellenwert ($c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = c_\lambda$) übereinstimmen, heißt symmetrisch um c_λ , falls für alle $z \in \mathbb{R}$

$$\lambda(c_\lambda + z) = \lambda(c_\lambda - z)$$

gilt.

In dieser Arbeit werden nur die logistische Regression und das Probit-Modell als in der Praxis wichtigste Vertreter dieser Modellklasse betrachtet. Diese beiden Modelle haben eine symmetrische Intensitätsfunktion und erfüllen die fünf Bedingungen (A1), (A2'), (A3'), (A4) und (A5) mit $c_\lambda = c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = 0$. Dazu sei auf Anhang B Lemma B.3

und Lemma B.4 verwiesen. Weitere Modelle in dieser Klasse sind vorstellbar, wurden aber hier weder bestimmt noch untersucht.

Der folgende Satz, welcher aber nur in Verbindung mit Satz 5.5 angewendet werden kann, stellt das Hauptresultat dieses Abschnittes für symmetrische Intensitätsfunktionen dar. Ein analoges Resultat für Dimension $k = 1$ schließt sich im Satz 5.13 an. In Kombination mit Satz 5.14 folgt sogar die Eindeutigkeit der jeweiligen Lösungen für die Orbitpositionen und Gewichte.

Satz 5.9

Sei in der Situation von Satz 5.5 (c_0) die Intensitätsfunktion λ zusätzlich symmetrisch um c_λ .

- Für $\beta_0 \neq c_\lambda$ seien r die Lösung der Gleichung

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} = - \frac{A(k, r, c, \beta_1)}{(k+1) r (r+c-\beta_1)(r+c+\beta_1)(r-c+\beta_1)(r-c-\beta_1)} \quad (5.11)$$

mit Zählerfunktion

$$\begin{aligned} A(k, r, c, \beta_1) = & -2kr^2(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 - 4c^2r^2 \\ & + (\beta_1^2 - c^2 + r^2) \sqrt{(\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)c^2r^2} \end{aligned}$$

und $c = c_\lambda - \beta_0$. Dann ist

$$x = \frac{c}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}, \quad (5.12)$$

$$y = \frac{c}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}, \quad (5.13)$$

$$\alpha = \frac{-(\beta_1^2 - c^2 - r^2) + \sqrt{(\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)c^2r^2}}{4(k+1)cr} \quad (5.14)$$

eine Lösung des Gleichungssystems (5.5)–(5.7).

- Für $\beta_0 = c_\lambda$ ist $x = \frac{r}{\beta_1}$, $y = -\frac{r}{\beta_1}$ und $\alpha = 0$ eine Lösung von (5.5)–(5.7). Dabei ist r Lösung der Gleichung

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} = - \frac{2(\beta_1^2 - kr^2)}{(k+1)r(\beta_1^2 - r^2)}. \quad (5.15)$$

Bemerkung 5.10

Da das Gleichungssystem (5.5)–(5.7) im Satz 5.5 (c0) eine Lösung mit zwei inneren Trägerstellen für das marginale Design liefern soll, ist $x, y \in (-1, 1)$ gefordert. Also muss

$$-1 < \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} \pm \frac{r}{\beta_1} < 1$$

gelten. Dies führt mit $\beta_1 > 0$ zu $r \in (-(c_\lambda - \beta_0) - \beta_1, -(c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)$ und gleichzeitig $r \in ((c_\lambda - \beta_0) - \beta_1, (c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)$. Folglich müssen sich beide Intervalle überschneiden. Das ist für $c_\lambda - \beta_0 > 0$ der Fall bei $0 < c_\lambda - \beta_0 < \beta_1$ und für $c_\lambda - \beta_0 < 0$ der Fall bei $-\beta_1 < c_\lambda - \beta_0 < 0$.

Somit muss $c_\lambda - \beta_0 \in (-\beta_1, \beta_1)$ und insbesondere $\beta_1^2 > (c_\lambda - \beta_0)^2$ gelten. Dann liegt r im Intervall $(|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1, -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$.

Dies gilt insbesondere für $\beta_0 = c_\lambda$, also $c_\lambda - \beta_0 = 0$. Hier liegt speziell r in $(-\beta_1, \beta_1)$.

Bemerkung 5.11

Im folgenden Beweis wird eine etwas ungewöhnliche Notation für Brüche verwendet. Dabei werden aufgrund von Platzmangel Zähler und Nenner teilweise mehrzeilig, insbesondere zweizeilig, über- beziehungsweise unterhalb des Bruchstriches dargestellt. Eine Verwendung der Standardnotation von Brüchen und damit der Zerlegung des „großen“ Bruchs in mehrere Funktionen und Teile würde der Lesbarkeit wahrscheinlich noch weniger helfen.

Beweis von Satz 5.9. Zunächst wird (5.12) und (5.13) in (5.7) eingesetzt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\frac{1}{2} - \alpha} - \frac{1}{\frac{1}{2} + \alpha} + (k-1) & \frac{q\left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}\right) \left(1 - \left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}\right)^2\right) - q\left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}\right) \left(1 - \left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}\right)^2\right)}{q\left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}\right) \left(1 - \left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}\right)^2\right) \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) + q\left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}\right) \left(1 - \left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}\right)^2\right) \left(\frac{1}{2} + \alpha\right)} = 0 \end{aligned}$$

Dies vereinfacht sich zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{\frac{1}{2} - \alpha} - \frac{1}{\frac{1}{2} + \alpha} + (k-1) & \frac{\lambda(c_\lambda + r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) - \lambda(c_\lambda - r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2)}{\lambda(c_\lambda + r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) + \lambda(c_\lambda - r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2) \left(\frac{1}{2} + \alpha\right)} = 0 \end{aligned}$$

und mit Ausnutzung der Symmetrie $\lambda(c_\lambda + r) = \lambda(c_\lambda - r)$ zu

$$\frac{1}{\frac{1}{2}-\alpha} - \frac{1}{\frac{1}{2}+\alpha} + (k-1) \frac{(\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) - (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2)}{(\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) (\frac{1}{2}-\alpha) + (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2) (\frac{1}{2}+\alpha)} = 0$$

und weiter zu

$$\frac{-2\alpha}{(\frac{1}{2}-\alpha)(\frac{1}{2}+\alpha)} + (k-1) \frac{4(c_\lambda - \beta_0)r}{4(c_\lambda - \beta_0)r\alpha + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)} = 0.$$

Als ein Bruch ergibt sich

$$\frac{-2\alpha(4(c_\lambda - \beta_0)r\alpha + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)) + 4(k-1)(c_\lambda - \beta_0)r(\frac{1}{2}-\alpha)(\frac{1}{2}+\alpha)}{(\frac{1}{2}-\alpha)(\frac{1}{2}+\alpha)(4(c_\lambda - \beta_0)r\alpha + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2))} = 0.$$

Im Zähler steht ein Polynom zweiten Grades in α

$$\alpha^2(-4(k+1)(c_\lambda - \beta_0)r) + \alpha(-2(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)) + (k-1)(c_\lambda - \beta_0)r. \quad (5.16)$$

Dabei ist $r \neq 0$, sonst wäre es nur ein Orbit und die Informationsmatrix wäre nicht regulär, und wie gefordert $c_\lambda - \beta_0 \neq 0$. Also ist $4(k+1)(c_\lambda - \beta_0)r \neq 0$, sodass sich die beiden Nullstellen des Polynoms ergeben zu

$$\frac{-(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) \mp \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 + 4(k+1)(k-1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2}}{4(k+1)(c_\lambda - \beta_0)r}.$$

Die erste Nullstelle mit Minus vor der Wurzel sei $\alpha_-(r)$ und die zweite Nullstelle mit Plus vor der Wurzel sei $\alpha_+(r)$. Nur $-|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1$, $|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1$, $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ beziehungsweise $|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ können Lösung des Ausdrucks $\alpha_\mp(r) = \pm \frac{1}{2}$ sein. Dabei liegen aber $-|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1$ und $|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ außerhalb des interessierenden Bereiches für r . Es ist

$$\begin{aligned} \alpha_-(\pm(|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1)) &= \pm \frac{1}{2} \text{sign}(c_\lambda - \beta_0) \quad \text{und} \\ \alpha_+(\pm(|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1)) &= \mp \frac{1}{2} \text{sign}(c_\lambda - \beta_0) \frac{k-1}{k+1}. \end{aligned}$$

Da (mit $\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 > 0$)

$$\begin{aligned} \lim_{r \nearrow 0} \alpha_-(r) &= \text{sign}(c_\lambda - \beta_0) \infty \quad \text{und} \\ \lim_{r \searrow 0} \alpha_-(r) &= -\text{sign}(c_\lambda - \beta_0) \infty \end{aligned}$$

ist, nimmt α_- im Intervall $r \in [|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1, -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1]$ nur Werte außerhalb von $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ an. Somit kann α_- keine relevante Nullstelle des Polynoms (5.16) sein.

α_+ hingegen ließe sich wegen $\lim_{r \rightarrow 0} \alpha_+(r) = 0$ sogar in $r = 0$ stetig fortsetzen. Also nimmt α_+ auf dem Intervall $r \in [|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1, -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1]$ nur Werte in $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ an. Folglich ist α_+ die relevante Nullstelle des Polynoms (5.16).

Nun wird (5.12) und (5.13) in (5.5) eingesetzt und vereinfacht:

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r) \beta_1}{\lambda(c_\lambda + r)} + \frac{2}{2 \frac{r}{\beta_1}} + (k-1) \frac{\lambda'(c_\lambda + r) \beta_1 (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) (\frac{1}{2} - \alpha) + \lambda(c_\lambda + r) (-2) \left(\frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1} \right) \beta_1^2 (\frac{1}{2} - \alpha)}{\lambda(c_\lambda + r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) (\frac{1}{2} - \alpha) + \lambda(c_\lambda - r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2) (\frac{1}{2} + \alpha)} = 0$$

Ausnutzung der Symmetrie von λ und weitere Vereinfachungen liefern

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} + \frac{1}{r} + (k-1) \frac{\lambda'(c_\lambda + r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) (\frac{1}{2} - \alpha) + \lambda(c_\lambda + r) (-2) ((c_\lambda - \beta_0) + r) (\frac{1}{2} - \alpha)}{\lambda(c_\lambda + r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) (\frac{1}{2} - \alpha) + \lambda(c_\lambda + r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2) (\frac{1}{2} + \alpha)} = 0. \quad (5.17)$$

Wird (5.12) und (5.13) in (5.6) eingesetzt, so entsteht analog fast die selbe Gleichung

$$\frac{\lambda'(c_\lambda - r)}{\lambda(c_\lambda - r)} - \frac{1}{r} + (k-1) \frac{\lambda'(c_\lambda - r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2) (\frac{1}{2} + \alpha) + \lambda(c_\lambda - r) (-2) ((c_\lambda - \beta_0) - r) (\frac{1}{2} + \alpha)}{\lambda(c_\lambda - r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) - r)^2) (\frac{1}{2} + \alpha) + \lambda(c_\lambda - r) (\beta_1^2 - ((c_\lambda - \beta_0) + r)^2) (\frac{1}{2} - \alpha)} = 0. \quad (5.18)$$

Hierbei ist nur r mit $-r$ sowie α mit $-\alpha$ vertauscht.

Werden beide Gleichungen subtrahiert, also ((5.17)–(5.18)), und wiederum die Symmetrie von λ ausgenutzt und zusammengefasst, so ergibt sich

$$\frac{2 \lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} + \frac{2}{r} + (k-1) \frac{\lambda'(c_\lambda + r) [(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + \alpha \cdot 4 (c_\lambda - \beta_0) r] + \lambda(c_\lambda + r) [-2r + \alpha \cdot 4 (c_\lambda - \beta_0)]}{\lambda(c_\lambda + r) [(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + \alpha \cdot 4 (c_\lambda - \beta_0) r]} = 0$$

und weiter zu

$$\frac{(k+1) \lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} = -(k-1) \frac{-2r + \alpha \cdot 4 (c_\lambda - \beta_0)}{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + \alpha \cdot 4 (c_\lambda - \beta_0) r} - \frac{2}{r}.$$

Zunächst soll nun nur die rechte Seite dieser Gleichung weiter betrachtet werden. Durch das Ersetzen von α mit α_+ ist diese

$$-\frac{(k-1)}{r} \cdot \frac{-2r^2(k+1) - (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2}}{(k+1)(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) - (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2}} - \frac{2}{r}.$$

Nun den Bruch rationalisieren

$$-\frac{1}{r} \cdot \frac{-2kr^2(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) - (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 - 4(k-1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2 + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 + r^2) \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2}}{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 - 4(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2} - \frac{2}{r}$$

und auf einen Nenner bringen

$$-\frac{1}{r} \cdot \frac{-2kr^2(\beta_1^2 + (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 - 4(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2 + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 + r^2) \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2}}{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 - 4(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2}.$$

Der Nenner lässt sich in die Linearfaktoren $(r + (c_\lambda - \beta_0) - \beta_1)$, $(r + (c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)$, $(r - (c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)$ und $(r - (c_\lambda - \beta_0) - \beta_1)$ zerlegen, sodass (5.11) folgt.

Für den Fall $\beta_0 = c_\lambda$, also $c_\lambda - \beta_0 = 0$, folgt durch Einsetzen von $x = \frac{r}{\beta_1}$, $y = -\frac{r}{\beta_1}$ in (5.7) und Ausnutzen der Symmetrie direkt $\alpha = 0$. Dies wiederum in (5.5) beziehungsweise in (5.6) eingesetzt und die Differenz beider Gleichungen gebildet, ergibt umgestellt (5.15). \square

Bemerkung 5.12

Die Gleichung (5.11) ließe sich auch direkt aus (5.17) oder (5.18) ermitteln. Dann entstünde aber zunächst eine rechte Seite, die bedeutend umfangreicher ist. Erst durch Kürzen des Bruches mit einem nichttrivialen Term ergäbe sich die rechte Seite von (5.11).

Satz 5.13

Ist in der Situation von Satz 5.7 (c0), also für $k = 1$, die Intensitätsfunktion λ zusätzlich symmetrisch um c_λ , dann ist

$$x = \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}, \quad y = \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}$$

eine Lösung des Gleichungssystems aus Satz 5.7 (c). Dabei ist r Lösung der Gleichung

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} = -\frac{1}{r}. \quad (5.19)$$

Beweis. Beide Gleichungen des Gleichungssystems aus Satz 5.7 (c) ergeben beim Einsetzen von x und y und unter Ausnutzung der Symmetrie der Intensitätsfunktion λ , insbesondere $\lambda'(c_\lambda - r) = -\lambda'(c_\lambda + r)$, die Gleichung (5.19). \square

Satz 5.14

In der Situation von Satz 5.9 und der Annahme, dass die Intensitätsfunktion λ zusätzlich (A4) erfüllt, besitzt die Gleichung (5.11), deren rechte Seite in $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ stetig fortgesetzt wird, genau eine Lösung für $r \in (0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$.

Dies gilt auch für den Fall $\beta_0 = c_\lambda$ und die Gleichung (5.15), die genau eine Lösung für $r \in (0, \beta_1)$ besitzt.

Auch in der Situation von Satz 5.13 bei $k = 1$ und der zusätzlichen Forderung von (A4), gibt es genau eine Lösung der Gleichung (5.19).

Beweis. Zunächst wird $\beta_0 \neq c_\lambda$ betrachtet. Seien

$$h_1(r) = - \left(-2k r^2 (\beta_1^2 + (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2) + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 - 4(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2 \right. \\ \left. + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 + r^2) \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)(c_\lambda - \beta_0)^2 r^2} \right)$$

der Zähler der rechten Seite von (5.11) und

$$h_2(r) = (k+1) r (r + (c_\lambda - \beta_0) - \beta_1)(r + (c_\lambda - \beta_0) + \beta_1) \\ \cdot (r - (c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)(r - (c_\lambda - \beta_0) - \beta_1)$$

der zugehörige Nenner. Aufgrund der Linearfaktorzerlegung des Nenners, nimmt dieser in $r = 0$, in $r = -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ und in $r = |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ den Wert null an. Die beiden

anderen Nullstellen des Nenners sind $-|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1 < 0$ und $|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1 < 0$ und liegen außerhalb des betrachteten Intervalls.

Es ist mit Bemerkung 5.10

$$\begin{aligned} h_1(0) &= - \left((\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2)^2 + (\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2) \sqrt{(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2)^2} \right) \\ &= -2(\beta_1^2 - (c_\lambda - \beta_0)^2)^2 \end{aligned}$$

negativ und

$$\begin{aligned} h_1(|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) &= - \left(-2k (|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2 (-2|c_\lambda - \beta_0| \beta_1) \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{(-2(c_\lambda - \beta_0)^2 - 2|c_\lambda - \beta_0| \beta_1)^2 - 4(c_\lambda - \beta_0)^2 (|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2}_{=0} \right. \\ &\quad \left. + (2\beta_1^2 + 2|c_\lambda - \beta_0| \beta_1) \sqrt{4k^2 (c_\lambda - \beta_0)^2 (|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2} \right) \\ &= -8k (|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2 |c_\lambda - \beta_0| \beta_1 \end{aligned}$$

ebenfalls negativ.

Weiterhin sind in $r = 0$ und in $r = |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ die dritte beziehungsweise fünfte Nullstelle (von klein nach groß) des Nennerpolynoms h_2 , welches ein Polynom fünften Grades ist und einen positiven führenden Koeffizienten besitzt. Deshalb wechselt insbesondere an diesen beiden Stellen der Nenner von negativ über Null zu positiv. Da der Zähler h_1 an diesen Stellen negativ ist, liegen für die rechte Seite von (5.11) dort zwei Polstellen vor, die von $+\infty$ auf $-\infty$ springen.

Die Nullstelle $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ des Nenners ist auch eine Nullstelle des Zählers, da

$$\begin{aligned} h_1(-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) &= - \left(-2k (-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2 (2|c_\lambda - \beta_0| \beta_1) \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{(-2(c_\lambda - \beta_0)^2 + 2|c_\lambda - \beta_0| \beta_1)^2 - 4(c_\lambda - \beta_0)^2 (-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2}_{=0} \right. \\ &\quad \left. + (2\beta_1^2 - 2|c_\lambda - \beta_0| \beta_1) \sqrt{4k^2 (c_\lambda - \beta_0)^2 (-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2} \right) \\ &= - \left(-4k (-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2 |c_\lambda - \beta_0| \beta_1 \right. \\ &\quad \left. + 4\beta_1 (-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) k |c_\lambda - \beta_0| (-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Somit muss das Verhalten von $\frac{h_1}{h_2}$ an dieser Stelle mittels der Regel von de l'Hospital untersucht werden. Es ist

$$h_1'(-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) = -4(k+1)(-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)\beta_1 \left(-2|c_\lambda - \beta_0| + \frac{k-1}{k}\beta_1 \right)$$

und

$$h_2'(-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) = -8(k+1)(-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)^2 \beta_1 |c_\lambda - \beta_0|.$$

Also ergibt sich

$$\lim_{r \rightarrow -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1} \frac{h_1(r)}{h_2(r)} = \lim_{r \rightarrow -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1} \frac{h_1'(r)}{h_2'(r)} = \frac{-2k|c_\lambda - \beta_0| + (k-1)\beta_1}{2k(-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)|c_\lambda - \beta_0|}, \quad (5.20)$$

sodass sich die rechte Seite von (5.11) stetig in $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ fortsetzen lässt.

Im Anhang A Lemma A.1 wird gezeigt, dass die rechte Seite von (5.11) auf dem Intervall $(0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$ streng monoton wachsend ist. Zusätzlich deckt sie, wie oben gezeigt, die Werte von $-\infty$ bis ∞ ab. Da die Intensitätsfunktion λ zusätzlich (A4) erfüllt, ist die linke Seite von (5.11) auf $(0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$ monoton fallend, sodass genau ein Schnittpunkt und damit genau eine Lösung der Gleichung (5.11) auf $(0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$ existiert.

Analog verhält es sich im Fall $\beta_0 = c_\lambda$. Für die strenge Monotonie der rechten Seite von (5.15) siehe Lemma A.3 im Anhang A. Die Gleichung (5.15) besitzt folglich genau eine Lösung für $r \in (0, \beta_1)$.

Auch im Satz 5.13 bei $k = 1$ ist die rechte Seite der Gleichung (5.19) streng monoton steigend, sodass es auch nur eine Lösung geben kann. \square

Bemerkung 5.15

Der Satz 5.14 garantiert eine eindeutige Lösung für $r \in (0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$. Die Bemerkung 5.10 besagt aber, dass die Zwei-Orbit-Lösung (Fall (c0)) ein $r \in (0, -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$ benötigt. Dies bedeutet, dass diese eindeutige Lösung sowohl im Fall mit zwei Orbits als auch im Fall mit einem Pol und einem Orbit aus Fall (c) resultieren kann.

In diesem Abschnitt wurden symmetrische Intensitätsfunktionen untersucht. Dabei konnte festgestellt werden, dass zur Bestimmung der beiden Orbitpositionen und der Gewichtung kein Gleichungssystem aus drei Gleichungen (5.5)–(5.7) gelöst werden muss, sondern nur

eine Gleichung (5.11) ausreicht. Aus dem daraus ermittelten Wert lassen sich dann die beiden Orbitpositionen und die Gewichtung bestimmen.

Die beiden Beispiele logistische Regression und Probit-Modell erfüllen wie oben angegeben die Voraussetzungen für diesen Abschnitt. Die Sätze aus diesem Abschnitt führen zwar zu einer einfacheren Berechnung der Orbitpositionen und Gewichte, aber trotzdem bleiben die Ergebnisse identisch. Somit kann für diese beiden Beispiele auf Abschnitt 5.2.1 verwiesen werden. Trotzdem soll im folgenden Beispiel die Möglichkeit der einfacheren Berechnung ausgenutzt werden, um die Breite des hier symmetrischen Intervalls für zwei echte Orbits wie im Satz 5.5 ($c\theta$) zu bestimmen.

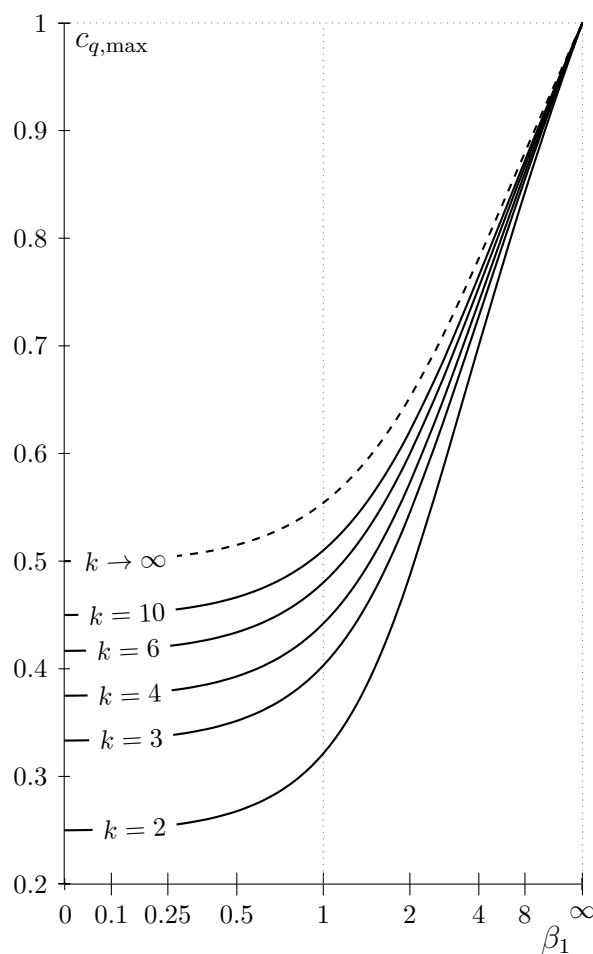


Abbildung 5.7: Logit-Modell: Halbe Ausdehnung $c_{q,\max}$ des Intervalls $(-c_{q,\max}, c_{q,\max})$ für den Fall ($c\theta$) in Abhängigkeit von β_1 für $k \in \{2, 3, 4, 6, 10\}$ und $k \rightarrow \infty$.

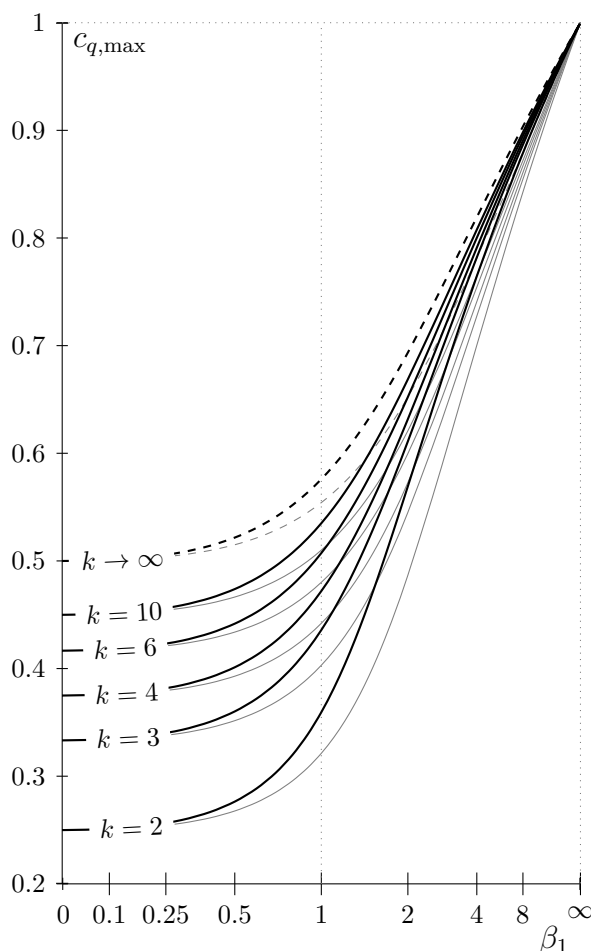


Abbildung 5.8: Probit-Modell: Halbe Ausdehnung $c_{q,\max}$ des Intervalls $(-c_{q,\max}, c_{q,\max})$ für den Fall (c_0) in Abhängigkeit von β_1 für $k \in \{2, 3, 4, 6, 10\}$ und $k \rightarrow \infty$. Zum Vergleich in Grau für das Logit-Modell.

Beispiel 5.16 (Intervallbreite bezüglich Satz 5.5 (c_0))

In diesem Beispiel soll für das Logit- und das Probit-Modell (jeweils mit $c_\lambda = 0$) die maximale Ausdehnung des Intervalls für $c_q = \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1}$ bestimmt werden, in denen laut Satz 5.5 (c_0) zwei echte Orbits auftreten. Während in Abschnitt 5.2.1 der Wert $\beta_1 = 1$ festgehalten wurde, wird nun eine Schranke $c_{q,\max}$ in Abhängigkeit von β_1 bestimmt, sodass für c_q innerhalb des Intervalls $(-c_{q,\max}, c_{q,\max})$ zwei echte Orbits und außerhalb nur ein echter Orbit und ein Pol auftreten. Dazu wird die Gleichung (5.11) für gegebenes $\beta_1 \in (0, \infty)$ und feste Dimension $k \geq 2$ in r in Abhängigkeit von β_0 numerisch gelöst. Dabei wird die Nebenbedingung $1 = \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}$ mit $c_\lambda = 0$ berücksichtigt, die aus der Überlegung resultiert, dass der dem Pol $(1, 0, \dots, 0)^\top$ nahe Orbit, vergleiche (5.12), mit diesem zusammenfällt. Also lautet die Nebenbedingung $\beta_1 + \beta_0 = r$. Die beiden ermittelten Plots für die logistische Regression und das Probit-Modell sind in den Abbildungen 5.7

und 5.8 für verschiedene Werte der Dimension k dargestellt.

Die Werte für die Intervalle bezüglich des Falls (c0) mit zwei inneren Trägerstellen, welche in Abschnitt 5.2.1 bei $\beta_1 = 1$ genannt werden, finden sich natürlich auch in diesen beiden Abbildungen wieder. So weist die logistische Regression $c_{q,\max} \approx 0.403$ für $k = 3$ und $c_{q,\max} \approx 0.480$ für $k = 6$ aus. Das Probit-Modell hat $c_{q,\max} \approx 0.436$ bei $k = 3$ und $c_{q,\max} \approx 0.507$ bei $k = 6$.

Festzuhalten ist, dass sich beide Modelle ähnlich verhalten. Für sehr große β_1 ist der Bereich für c_q beinahe von -1 bis 1 , sodass beinahe für alle β_0 zwischen $-\beta_1$ und β_1 zwei echte Orbits auftreten.

Für $k = 1$ müsste statt der Gleichung (5.11) die Gleichung (5.19) genutzt werden. Diese ist unabhängig von β_0 und β_1 . Für die logistische Regression und das Probit-Modell liefert sie $r \approx 1.5434$ beziehungsweise $r \approx 1.1381$. Damit bleibt eigentlich nur die Nebenbedingung $\beta_1 + \beta_0 = r$, aus der direkt $c_{q,\max} \approx \frac{\beta_1 - 1.5434}{\beta_1}$ und $c_{q,\max} \approx \frac{\beta_1 - 1.1381}{\beta_1}$ folgt. Damit gibt es nur für $\beta_1 > 1.5434$ beziehungsweise für $\beta_1 > 1.1381$ einen Bereich mit zwei inneren Punkten (echten Orbits). In allen anderen Fällen sind es immer ein innerer Punkt und ein Endpunkt (Pol).

5.4 Reduzierung der Trägerpunkte

Die Versuchspläne, die sich aus Satz 5.5 in den Fällen (a), (b), (c1) and (c2) ergeben, besitzen immer $k + 1$ Designpunkte. Dies ist die minimale Anzahl von Punkten, die benötigt werden, um den Parametervektor β mit seinen $k + 1$ Komponenten zu schätzen. Dies erlauben die optimalen Gewichte von Pol und Orbit. Sind (lokal) D -optimale Designs mit minimalem Träger auch für den Fall (c0) mit gegebenenfalls ungeeigneten Gewichten möglich? Oder gibt es zumindest effiziente Designs mit minimalem Träger?

Zu diesen Fragen sollen in diesem Abschnitt möglichst Antworten gefunden werden. Der Großteil der Erkenntnisse wurden in Radloff und Schwabe (2023, Abschnitt 5) publiziert.

In Abbildung 5.5(b) — nochmals dargestellt in Abbildung 5.10 (links) — wurde bereits ein (lokal) D -optimales Design für das Logit-Modell auf der dreidimensionalen Kugel mit $-\beta_0 = 0$ und $\beta_1 = 1$ mit insgesamt sechs Trägerpunkten angegeben. Hierbei wurden beide Orbits jeweils durch die Eckpunkte eines zweidimensionalen Simplex — eines gleichseitigen Dreiecks — diskretisiert. Gibt es ein äquivalentes, das heißt ebenfalls lo-

kal D -optimales, Design aber mit einer geringeren Anzahl von Trägerpunkten? Vielleicht sogar mit der minimalen Anzahl, also mit $k + 1 = 4$ Punkten?

Es entwickelte sich die Idee, ob eine Reduktion der Anzahl der Trägerpunkte ähnlich einem teilfaktoriellen Versuchsplan — einem *Fractional-Factorial-Design* — möglich sei. Dabei werden anstatt aller Ecken eines k -dimensionalen Hyperwürfels $[-1, 1]^k$ des vollfaktoriellen Designs nur ein spezieller Prozentsatz der Punkte ausgewählt, vergleiche Pukelsheim (1993, Abschnitt 15.11). Beispielhaft repräsentiert in Dimension $k = 3$

$$(-1, -1, 1)^\top, (-1, 1, -1)^\top, (1, -1, -1)^\top, (1, 1, 1)^\top$$

ein 2^{3-1} -teilfaktorielles Design.

Im Fall des hier betrachteten Designs auf der Kugel sollen nun nicht einfach vier der sechs Punkte genommen werden, sondern es soll die Orthogonalität der Räume ausgenutzt werden, die beim Aufspannen mittels der ausgewählten Punkte (ohne x_1 -Komponente) im (hier) 2^{3-1} -teilfaktoriellen Design in den zwei Orbits (zu $x_1 = -1$ und $x_1 = 1$) entstehen. Es ist nämlich

$$\text{span}\{(-1, 1)^\top, (1, -1)^\top\} \perp \text{span}\{(-1, -1)^\top, (1, 1)^\top\} .$$

Die konvexe Hülle über diese vier Punkte spannen einen regulären dreidimensionalen Simplex auf.

Der Übergang vom vollfaktoriellen Versuchsplan mit acht Punkten zum teilfaktoriellen Design mit vier Trägerpunkten in Dimension $k = 3$ ist in Abbildung 5.9 illustriert. Dabei wurden im teilfaktoriellen Design die von den innerhalb der Orbits durch die Designpunkte aufgespannten Räume, die orthogonal zueinander sind, eingezeichnet. Abschließend wurde dieses Design in eine dreidimensionale Kugel mit Radius $\sqrt{3}$ einbeschrieben. Eine Skalierung auf die Einheitskugel ist problemlos möglich.

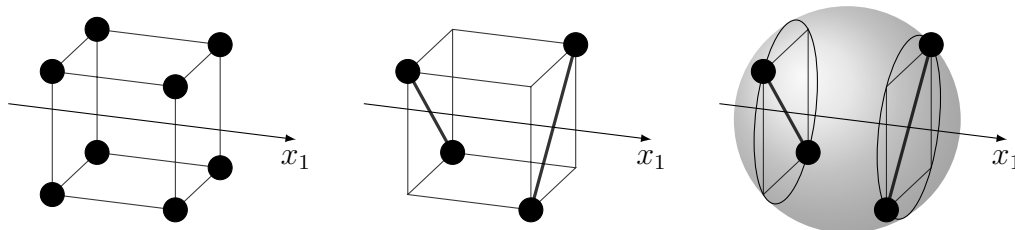


Abbildung 5.9: Übergang vom vollfaktoriellen Versuchsplan (links) zum teilfaktoriellen Design (Mitte) und Einbettung in die Kugel (rechts).

Eine Überführung dieser Idee auf das oben angesprochene (lokal) D -optimale Design für die logistische Regression auf der dreidimensionalen Kugel mit $-\beta_0 = 0$ und $\beta_1 = 1$ mit sechs Punkten auf ein Design mit vier Punkten ist in Abbildung 5.10 dargestellt. Dabei sind die Positionen und Gewichte der Orbits unverändert. Nur die Anzahl der zur Diskretisierung genutzten Trägerpunkte wurde reduziert. Bei der Diskretisierung eines Orbits (hier zweidimensionaler Kreis) durch die drei Eckpunkte eines regulären zweidimensionalen Simplex bleibt die Informationsmatrix unverändert. Innerhalb der Hyperebene mit fixem x_1 und unter Vernachlässigung dieser x_1 -Komponente sind diese Informationsmatrizen sogar regulär. Die Diskretisierung eines Orbits durch zwei Designpunkte, also die Eckpunkte eines eindimensionalen regulären Simplex, entspricht der Diskretisierung eines (hier eindimensionalen) Suborbits. Damit sind die Informationsmatrizen sowohl des Suborbits als auch der zugehörigen Diskretisierung singular. Erst im Zusammenspiel beider Zwei-Punkt-Orbit-Diskretisierungen und der orthogonale Lage der Suborbits zueinander entsteht wieder eine reguläre Informationsmatrix. Der durch alle vier Punkte aufgespannte Simplex ist wie hier im Allgemeinen nicht regulär, da die Orbits einen anderen Abstand haben.

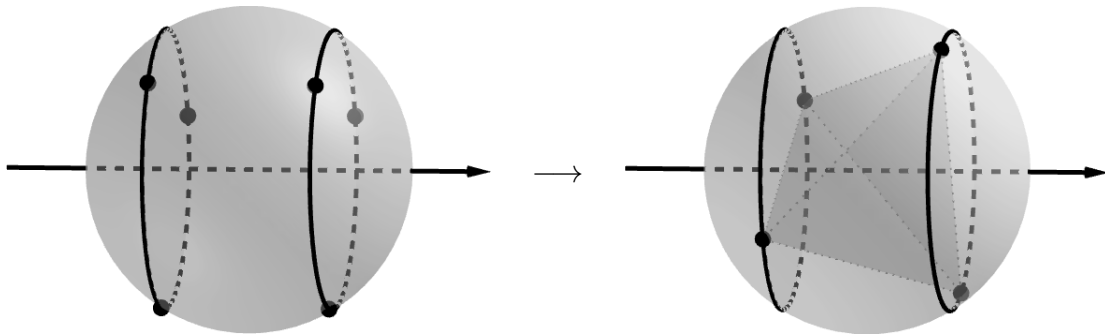


Abbildung 5.10: Logit-Modell: Diskretisierte (lokal) D -optimale Designs für $-\beta_0 = 0$ und $\beta_1 = 1$ und $k = 3$ mit 6 beziehungsweise 4 Trägerpunkten.

Nun soll für den k -dimensionalen Fall genau für zwei solcher orthogonal aufeinander stehender Suborbits, die sich in x_1 -Richtung an den bisherigen Orbitpositionen befinden und auf denen jeweils eine Gleichverteilung herrscht, die Informationsmatrix ermittelt werden. Dies geschieht analog zu Lemma 4.14. Die Suborbits sind wiederum Kugeloberflächen, aber zu einer geringeren Dimension. Für die Gleichverteilung auf diesen Kugeloberflächen sei auf (3.4) verwiesen.

Lemma 5.17

Sei ξ_1 das Zwei-Punkte-Maß auf x_{11} und x_{12} mit $\xi_1(x_{11}) = \frac{1}{2} - \alpha$ und $\xi_1(x_{12}) = \frac{1}{2} + \alpha$

mit $\alpha \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Weiter seien $\bar{\eta}(x_{11}, \cdot) = \mu_{\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2})}$ eine Gleichverteilung auf dem Suborbit $\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2}) \times \{0\}^{k-m}$ und ebenfalls $\bar{\eta}(x_{12}, \cdot) = \mu_{\mathbb{S}_{k-m-1}(\sqrt{1-x_{12}^2})}$ eine Gleichverteilung auf dem Suborbit $\{0\}^{m-1} \times \mathbb{S}_{k-m-1}(\sqrt{1-x_{12}^2})$. Dann lautet die Informationsmatrix für $\xi_1 \otimes \bar{\eta}$

$$M(\xi_1 \otimes \bar{\eta}, \beta^0) = \left(\begin{array}{cc|cc} \int q \, d\xi_1 & \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & & \\ \int q \, \text{id} \, d\xi_1 & \int q \, \text{id}^2 \, d\xi_1 & & \\ \hline & & \mathbb{O}_{2 \times (k-1)} & \\ \mathbb{O}_{(k-1) \times 2} & & c_1 \mathbb{I}_{m-1} & \mathbb{O}_{(m-1) \times (k-m)} \\ & & \mathbb{O}_{(k-m) \times (m-1)} & c_2 \mathbb{I}_{k-m} \end{array} \right) \quad (5.21)$$

mit $c_1 = \frac{1}{m-1} q(x_{11}) (1-x_{11}^2) (\frac{1}{2} - \alpha)$ und $c_2 = \frac{1}{k-m} q(x_{12}) (1-x_{12}^2) (\frac{1}{2} + \alpha)$. Dabei seien wieder $q(x_1) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1)$ und der Parametervektor $\beta^0 = (\beta_0, \beta_1, 0, \dots, 0)^\top$.

Beweis. Dieser Beweis erfolgt größtenteils analog zum Beweis von Lemma 4.14. Es muss aber unbedingt angemerkt werden, dass die beiden Suborbits $\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2}) \times \{0\}^{k-m}$ und $\{0\}^{m-1} \times \mathbb{S}_{k-m-1}(\sqrt{1-x_{12}^2})$ orthogonal zueinander sind.

Bei der Bestimmung der Diagonalelemente $\int x_j^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}})$ für $j \in \{2, 3, \dots, k\}$ mit $\tilde{\mathbf{x}} = (x_2, \dots, x_k)^\top$ muss deshalb eine Fallunterscheidung gemacht werden. Hier sollen deshalb nur die zum ersten Teil gehörigen Diagonalelemente für $j \in \{2, 3, \dots, m\}$ betrachtet werden. Bei diesen Elementen spielt nur der x_{11} -Orbit $\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2}) \times \{0\}^{k-m}$ eine Rolle, welcher mit $\xi_1(x_{11}) = \frac{1}{2} - \alpha$ gewichtet ist. Die zugehörigen Komponenten im x_{12} -Orbit $\{0\}^{m-1} \times \mathbb{S}_{k-m-1}(\sqrt{1-x_{12}^2})$ sind alle null. Aufgrund der (stetigen) Gleichverteilung auf \mathbb{S}_{m-2} ist das Integral unabhängig von der Wahl der konkreten Komponente x_2, \dots, x_m , also

$$\begin{aligned} (m-1) \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_j^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) &= \int_{\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2}) \times \{0\}^{k-m}} x_2^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) + \dots + \int_{\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2}) \times \{0\}^{k-m}} x_m^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) \\ &= \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} x_2^2 + \dots + x_m^2 + 0 + \dots + 0 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = \int_{\mathbb{S}_{k-2}(\sqrt{1-x_1^2})} 1 - x_1^2 \bar{\eta}(x_1, d\tilde{\mathbf{x}}) = 1 - x_1^2. \end{aligned}$$

Auch hier gilt $x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_m^2 + 0 + \dots + 0 = 1$ aufgrund der Lage auf der Kugeloberfläche. \square

Nun soll der Optimalitätsfall aus Satz 5.5 (c0) auf zwei echten Orbits ausgenutzt werden, um zu untersuchen, wann die beiden Informationsmatrizen (4.2) und (5.21) identisch sind. Damit wären dann auch beide zugehörigen Designs (lokal) D -optimal.

Satz 5.18

Die beiden Informationsmatrizen (4.2) und (5.21) sind identisch im Fall von Satz 5.5 (c0) genau dann, wenn $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{m}{k+1}$ ist.

Beweis. Hierzu wird zunächst die Gleichung (5.7) äquivalent umgestellt:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\frac{1}{2}-\alpha} - \frac{1}{\frac{1}{2}+\alpha} + (k-1) \frac{q(x_{11})(1-x_{11}^2) - q(x_{12})(1-x_{12}^2)}{q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \\
\iff & (k-1) \frac{-q(x_{11})(1-x_{11}^2) + q(x_{12})(1-x_{12}^2)}{q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha)} = \frac{2\alpha}{(\frac{1}{2}+\alpha)(\frac{1}{2}-\alpha)} \\
\iff & -(k-1)q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}+\alpha)(\frac{1}{2}-\alpha) + (k-1)q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha)(\frac{1}{2}-\alpha) \\
& = 2\alpha q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + 2\alpha q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha) \\
\iff & q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) [-2\alpha - (k-1)(\frac{1}{2}+\alpha)] \\
& = q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha) [2\alpha - (k-1)(\frac{1}{2}-\alpha)] \\
\iff & q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) [-k(\frac{1}{2}+\alpha) + (\frac{1}{2}-\alpha)] \\
& = q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha) [-k(\frac{1}{2}-\alpha) + (\frac{1}{2}+\alpha)] \\
\iff & q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha) = q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) \frac{k(\frac{1}{2}+\alpha) - (\frac{1}{2}-\alpha)}{k(\frac{1}{2}-\alpha) - (\frac{1}{2}+\alpha)} \\
\text{analog } & q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) = q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha) \frac{k(\frac{1}{2}-\alpha) - (\frac{1}{2}+\alpha)}{k(\frac{1}{2}+\alpha) - (\frac{1}{2}-\alpha)}
\end{aligned}$$

Dabei wären die beiden Nenner $k(\frac{1}{2}-\alpha) - (\frac{1}{2}+\alpha)$ und $k(\frac{1}{2}+\alpha) - (\frac{1}{2}-\alpha)$ genau dann null, wenn $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{1}{k+1}$ beziehungsweise $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{k}{k+1}$ ist. Dies tritt aber nicht bei zwei echten Orbits auf, denn $\frac{1}{2} - \frac{k}{k+1} < \alpha < \frac{1}{2} - \frac{1}{k+1}$.

Dies jeweils in den Diagonaleintrag der (allgemeinen) Informationsmatrix für $\xi_1 \otimes \bar{\eta}$ (siehe Gleichung (4.2)) aus Lemma 4.12 eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k-1} \int q(1 - \text{id}^2) d\xi_1 &= \frac{1}{k-1} [q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) + q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\frac{1}{2}+\alpha)] \\
&= \frac{1}{k-1} q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) \left[1 + \frac{k(\frac{1}{2}+\alpha) - (\frac{1}{2}-\alpha)}{k(\frac{1}{2}-\alpha) - (\frac{1}{2}+\alpha)} \right] \\
&= q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\frac{1}{2}-\alpha) \left[\frac{1}{k-1} + \frac{1}{k-1} \cdot \frac{k(\frac{1}{2}+\alpha) - (\frac{1}{2}-\alpha)}{k(\frac{1}{2}-\alpha) - (\frac{1}{2}+\alpha)} \right]
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k-1} \int q(1 - \text{id}^2) d\xi_1 &= \frac{1}{k-1} [q(x_{11})(1-x_{11}^2)(\tfrac{1}{2}-\alpha) + q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\tfrac{1}{2}+\alpha)] \\
&= \frac{1}{k-1} q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\tfrac{1}{2}-\alpha) \left[\frac{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha)}{k(\tfrac{1}{2}+\alpha) - (\tfrac{1}{2}-\alpha)} + 1 \right] \\
&= q(x_{12})(1-x_{12}^2)(\tfrac{1}{2}-\alpha) \left[\frac{1}{k-1} \cdot \frac{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha)}{k(\tfrac{1}{2}+\alpha) - (\tfrac{1}{2}-\alpha)} + \frac{1}{k-1} \right]
\end{aligned}$$

Verglichen mit den Diagonalelementen der Informationsmatrix (5.21) aus Lemma 5.17 sind diese genau dann identisch, wenn

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{k-1} + \frac{1}{k-1} \cdot \frac{k(\tfrac{1}{2}+\alpha) - (\tfrac{1}{2}-\alpha)}{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha)} = \frac{1}{m-1} \\
\iff &\frac{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha) + k(\tfrac{1}{2}+\alpha) - (\tfrac{1}{2}-\alpha)}{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha)} = \frac{k-1}{m-1} \\
\iff &\frac{k-1}{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha)} = \frac{k-1}{m-1} \\
\iff &k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha) = m-1 \\
\iff &\alpha = \frac{1}{2} - \frac{m}{k+1}
\end{aligned}$$

und gleichzeitig

$$\frac{1}{k-1} \cdot \frac{k(\tfrac{1}{2}-\alpha) - (\tfrac{1}{2}+\alpha)}{k(\tfrac{1}{2}+\alpha) - (\tfrac{1}{2}-\alpha)} + \frac{1}{k-1} = \frac{1}{k-m} \iff \alpha = \frac{1}{2} - \frac{m}{k+1} \quad \square$$

Bemerkung 5.19

Folglich müssen die beiden Orbits die Gewichte $\xi_1(x_{11}) = \frac{m}{k+1}$ und $\xi_1(x_{12}) = \frac{k-m+1}{k+1}$ besitzen, sodass die Informationsmatrizen identisch sind und in Konsequenz zum gleichen Wert für das D -Optimalitätskriterium führen. Damit ist ein Versuchsplan aus zwei Orbits mit m und mit $k-m+1$ Designpunkten möglich, sofern die Gewichte entsprechend sind.

Aber wie lässt sich ein solches Design konkret erzeugen? Es müssen die beiden Gleichverteilungen auf den Suborbits $\mathbb{S}_{m-2}(\sqrt{1-x_{11}^2}) \times \{0\}^{k-m}$ und $\{0\}^{m-1} \times \mathbb{S}_{k-m-1}(\sqrt{1-x_{12}^2})$ aus Lemma 5.17 durch zwei reguläre Simplexe — ein Simplex in Dimension $m-1$ und einer in Dimension $k-m$ — diskretisiert werden.

Sei $\mathbf{S}_\ell \in \mathbb{R}^{m \times (m+1)}$ eine Matrix, deren Spalten für die $\ell + 1$ Ecken eines ℓ -dimensionalen regulären Simplex eingebettet im \mathbb{R}^ℓ stehen.

$$\left(\sqrt{\frac{\ell+1}{\ell}} \mathbb{I}_\ell + \frac{1 - \sqrt{\ell+1}}{\ell\sqrt{\ell}} \mathbf{1}_\ell \mathbf{1}_\ell^\top \mid -\frac{1}{\sqrt{\ell}} \mathbf{1}_\ell \right) \in \mathbb{R}^{\ell \times (\ell+1)}$$

ist ein Beispiel für eine derartige Matrix \mathbf{S}_ℓ . In dieser Notation steht \mathbb{I}_ℓ für den Standard-Simplex. Dieser wird geeignet skaliert und verschoben, sodass er im Zusammenspiel mit der letzten Ecke $-\frac{1}{\sqrt{\ell}} \mathbf{1}_\ell$ in der hinteren Matrixspalte einen regulären Simplex auf der Einheitssphäre $\mathbb{S}_{\ell-1}$ bildet. Eine ausführliche Erläuterung dieses Sachverhaltes befindet sich in Bemerkung 4.28. Dabei ist zu beachten, dass dort die volle Dimension k betrachtet wird, aber hier nur Unterräume mit kleinerer Dimension benötigt werden.

Die Spalten der Matrix

$$\left(\begin{array}{c|c} x_{11} \mathbf{1}_m^\top & x_{12} \mathbf{1}_{k-m+1}^\top \\ \hline \sqrt{1-x_{11}^2} \mathbf{R}_1 \mathbf{S}_{m-1} & \mathbb{O}_{(m-1) \times (k-m+1)} \\ \hline \mathbb{O}_{(k-m) \times m} & \sqrt{1-x_{12}^2} \mathbf{R}_2 \mathbf{S}_{k-m} \end{array} \right)$$

mit zwei beliebigen orthogonalen Transformationen $\mathbf{R}_1 \in O(m-1)$ und $\mathbf{R}_2 \in O(k-m)$ repräsentieren die $k+1$ Designpunkte eines minimal aufgespannten Versuchsplans. Dabei gehören die ersten m Spalten zum x_{11} -Orbit und die folgenden $k-m+1$ Spalten zum x_{12} -Orbit. Da die Positionen x_{11} und x_{12} vorgegeben sind, müssen die beiden beliebig rotierten Simplexe \mathbf{S}_{m-1} und \mathbf{S}_{k-m} auf der Einheitssphäre im Unterraum noch auf die nötige Größe auf der Einheitssphäre \mathbb{S}_{k-1} skaliert werden. Dies geschieht mittels der Vorfaktoren $\sqrt{1-x_{11}^2}$ und $\sqrt{1-x_{12}^2}$.

Dies soll an einem kleinen und einfachen Beispiel verdeutlicht werden.

Beispiel 5.20

Dieses Konstrukt soll an dem bisher schon mehrmals genutzten Beispiel der logistischen Regression auf der Einheitskugel mit $k = 3$ und gegebenem Parametervektor $\boldsymbol{\beta}^0 = (0, 1, 0, 0)$ angewendet werden. Wie bereits erwähnt ergeben sich die Gewichte der Orbits zu $\xi_1^*(x_{11}^*) = \xi_1^*(x_{12}^*) = \frac{1}{2}$ und die Positionen zu $x_{11}^* = -x_{12}^* \approx 0.52$. Aufgrund der

Dimension und der Gewichte muss $m = 2$ sein. Deshalb wird für beide Suborbits die Matrix zum Simplex \mathbf{S}_1 benötigt. Es ist

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_1 &= \left(\sqrt{\frac{1+1}{1}} \mathbb{1}_1 + \frac{1-\sqrt{1+1}}{1 \cdot \sqrt{1}} \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_1^\top \middle| - \frac{1}{\sqrt{1}} \mathbb{1}_1 \right) \\ &= \left(\sqrt{2} (1) + (1 - \sqrt{2}) (1)(1)^\top \middle| - (1) \right) = (1 | -1) = (1, -1) \in \mathbb{R}^{1 \times 2} .\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich mit $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2 = \mathbb{1}_1 \in O(1)$, der Identität, und $\sqrt{1 - x_{11}^2} = \sqrt{1 - x_{12}^2} \approx 0.85$ das Design als Spalten von

$$\approx \begin{pmatrix} 0.52 & 0.52 & -0.52 & -0.52 \\ 0.85 & -0.85 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.85 & -0.85 \end{pmatrix} .$$

Eine Darstellung dieses Designs kann in Abbildung 5.10 (rechts) gefunden werden.

5.5 Beispiel: Effizienzvergleich – logistische Regression

Abschließend soll die D -Effizienz, siehe (2.11) mit $\boldsymbol{\beta}^0 = (\beta_0, \beta_1, 0, \dots, 0)^\top$,

$$\text{Eff}_D(\xi, \boldsymbol{\beta}^0) = \frac{\det(\mathbf{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}^0))^{\frac{1}{p}}}{\det(\mathbf{M}(\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*, \boldsymbol{\beta}^0))^{\frac{1}{p}}} \in [0, 1]$$

für Designs ξ mit exakt $p = k + 1$ gleichgewichteten Trägerpunkten im Bereich, in dem zwei echte, also nichtdegenerierte, Orbits auftreten, betrachtet werden. Dies trifft für die optimalen Designs im Fall (c0) in Satz 5.5 zu.

Beispielhaft wird hier die logistische Regression mit $\beta_1 = 1$ zur Bestimmung der D -Effizienz für die Dimensionen $k = 3$ und $k = 6$ dienen. Zur logistischen Regression sei auf die Ausführungen in Beispiel 2.3, Abschnitt 5.2.1 und Beispiel 5.16 hingewiesen.

Die D -Effizienz in den Dimensionen $k = 3$ und $k = 6$ ist in den Abbildungen 5.11 und 5.12 dargestellt, wobei nur die interessanten Bereiche für $c_q = -\beta_0$ mit zwei echten Orbits im optimalen Design, also $c_q = -\beta_0 \in (-0.403, 0.403)$ (gerundet) für $k = 3$ beziehungsweise $c_q = -\beta_0 \in (-0.480, 0.480)$ (gerundet) für $k = 6$, vergleiche Beispiel 5.16, relevant sind. Dazu werden zwei verschiedene Typen von exakten Designs mit dem (lokal) D -optimalen Design $\xi_{\boldsymbol{\beta}^0}^*$ in Abhängigkeit von $c_q = -\beta_0$ verglichen. Dieser optimale Versuchsplan ist

ein verallgemeinertes Design mit reellwertigen Gewichten und kann daher im Allgemeinen nicht zu einem exakten Design diskretisiert werden.

Als erstes Vergleichsmodell dienen die Designs mit gleichen Orbitpositionen, wie das zugehörige für $c_q = -\beta_0$ (lokal) optimale Design. Nur die Gewichte der beiden Orbits wurden auf ganze Vielfache von $\frac{1}{k+1}$ gerundet beziehungsweise gesetzt. Dies funktioniert nicht für das Gewicht $\frac{1}{k+1}$, denn dazu müsste ein echter Orbit durch einen einzelnen Punkt auf dem Orbit diskretisiert werden. Dieser kann aber keinen orthogonalen Vektorraum zum durch die anderen k Trägerpunkte aufgespannten Vektorraum des zweiten Orbits bilden. Deshalb existieren diese *Typ-1-Designs* nur für Orbitgewichte $\frac{2}{k+1}, \dots, \frac{k-1}{k+1}$, also für $k = 3$ nur für das Paar an Gewichten $(\frac{2}{4}, \frac{2}{4})$ und für $k = 6$ für die Paare $(\frac{2}{7}, \frac{5}{7}), (\frac{3}{7}, \frac{4}{7}), (\frac{4}{7}, \frac{3}{7}), (\frac{5}{7}, \frac{2}{7})$. Die gestrichelten Linien in den Abbildungen stehen für die D -Effizienz dieser Typ-1-Designs.

Als zweite Vergleichsoption werden die tatsächlich bezüglich irgendeines bestimmten Wertes $c_q = -\beta_0$ (lokal) D -optimalen Designs, deren Orbitgewichte tatsächlich Vielfache von $\frac{1}{k+1}$ sind, betrachtet. Die Orbitpositionen sowie die Gewichte dieser Designs bleiben unverändert. Folglich können sie ein exaktes Design mit insgesamt $k + 1$ Designpunkten repräsentieren. Während es Typ-1-Designs für jedes $c_q = -\beta_0$ gibt, gehören zu diesen sogenannten *Typ-2-Designs* die $k - 2$ tatsächlich (lokal) D -optimalen Typ-1-Designs, also die $k - 2$ Designs, welche sich in den beiden Abbildungen zur D -Effizienz jeweils im Maximum der gestrichelten Kurven befinden. Diese haben genau wie die Typ-1-Designs nur die Orbitgewichte $\frac{2}{k+1}, \dots, \frac{k-1}{k+1}$.

Zu den Typ-2-Designs zählen aber noch zwei weitere Designs, nämlich die beiden Designs am Übergang von zwei echten Orbits zu einem echten Orbit und einem Pol, also bei $c_q = -\beta_0 = \pm c_{q,\max}$, vergleiche Beispiel 5.16. Für $k = 3$ und für $k = 6$ sind dies jeweils die beiden bezüglich $c_q = -\beta_0 \approx \pm 0.403$ beziehungsweise bezüglich $c_q = -\beta_0 \approx \pm 0.480$ (lokal) D -optimalen Designs. Wie gehabt, wird der eine echte Orbit durch die k Eckpunkte eines regulären $(k - 1)$ -dimensionalen Simplex diskretisiert. Der Pol bleibt unverändert, sodass das Design aus genau $k + 1$ Designpunkten besteht. Diese beiden Typ-2-Designs seien als *marginale Typ-2-Designs* bezeichnet.

Somit liegen für $k = 3$ insgesamt genau drei Typ-2-Designs vor, die für $c_q = -\beta_0 \approx -0.403$, $c_q = -\beta_0 = 0$ und $c_q = -\beta_0 \approx 0.403$ (lokal) D -optimal sind. Diese besitzen die Paare an Gewichten $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}), (\frac{2}{4}, \frac{2}{4})$ und $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4})$. Für $k = 6$ sind es insgesamt genau sechs Typ-2-Designs mit den Paaren an Gewichten $(\frac{1}{7}, \frac{6}{7}), (\frac{2}{7}, \frac{5}{7}), (\frac{3}{7}, \frac{4}{7}), (\frac{4}{7}, \frac{3}{7}), (\frac{5}{7}, \frac{2}{7})$ und $(\frac{6}{7}, \frac{1}{7})$. Die zugehörige D -Effizienz zu diesen drei beziehungsweise sechs Typ-2-Designs ist als durchgezogene Linie in den Abbildungen 5.11 und 5.12 abgetragen.

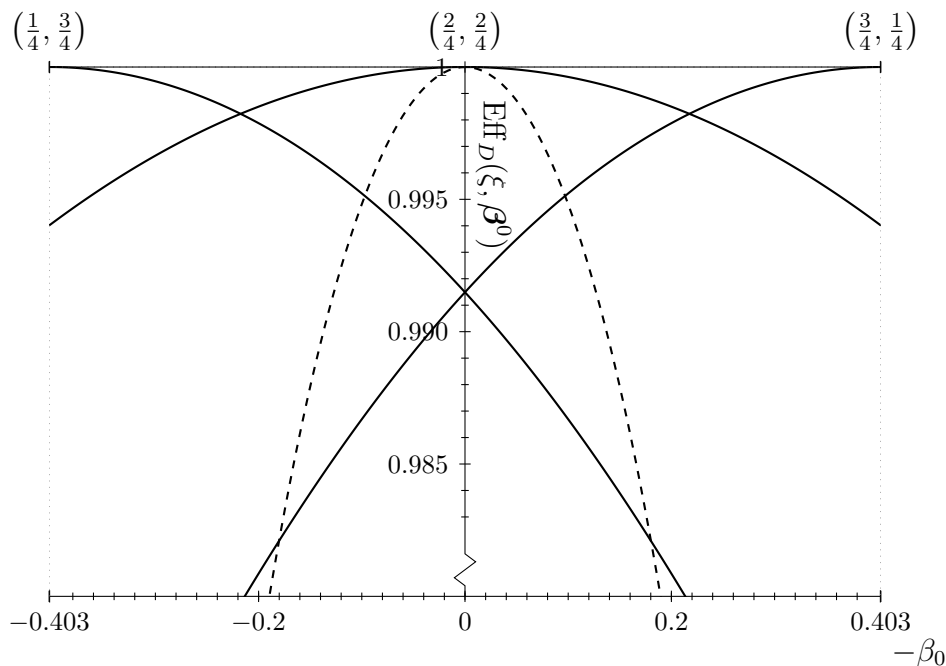


Abbildung 5.11: D -Effizienz im Logit-Modell für $k = 3$ und $\beta_1 = 1$: Vergleich von Designs mit exakt $k+1 = 4$ gleichgewichteten Trägerpunkten im Bereich $-\beta_0 \in [-0.403, 0.403]$ (gerundet).

In der Abbildung 5.11 ist ersichtlich, dass es für den Bereich $c_q = -\beta_0 \in [-0.403, 0.403]$ (gerundet) in Dimension $k = 3$ nur an genau drei Stellen exakte (lokal) D -optimale Designs existieren, die auf einer minimalen Anzahl von Trägerpunkten, also vier Punkten, beruhen. Dies ist für $c_q = -\beta_0 \approx -0.403$ ein Design (marginales Typ-2-Design) bestehend aus dem Pol $x_{12}^* = -1$ und einem Orbit x_{11}^* mit drei Punkten als Eckpunkte eines gleichseitigen Dreiecks. Geht dann über für $c_q = -\beta_0 = 0$ zu zwei echten Orbits mit jeweils zwei Punkten (Typ-1-Design oder Typ-2-Design) und dann bei $c_q = -\beta_0 \approx 0.403$ zu einem Design (marginales Typ-2-Design) bestehend aus einem Orbit x_{12}^* mit drei gleichgewichteten Trägerpunkten und einem Pol $x_{11}^* = 1$. Dazwischen liefern die betrachteten Diskretisierungsvarianten doch eine recht hohe Effizienz. Wird direkt von Pol-Orbit zu Orbit-Pol, also von einem marginalen Typ-2-Design zum anderen, übergegangen, so ist die Effizienz bereits größer als 0.991 (Schnitt der beiden äußeren durchgezogenen Linien). Werden die beiden Orbits zwischendurch auch diskretisiert, so ist die Effizienz größer als 0.995 (Schnitte der gestrichelten Linie und der äußeren durchgezogenen Linien, Typ-1-Design und marginale Typ-2-Designs) oder gar größer als 0.998 (Schnitte der durchgezogenen Linien, ausschließlich Typ-2-Designs).

Für Dimension $k = 6$, vergleiche Abbildung 5.12, ist beim Übergang von Pol und Orbit mit sechs Trägerpunkten zu Orbit mit sechs Designpunkten und Pol (beide marginalen

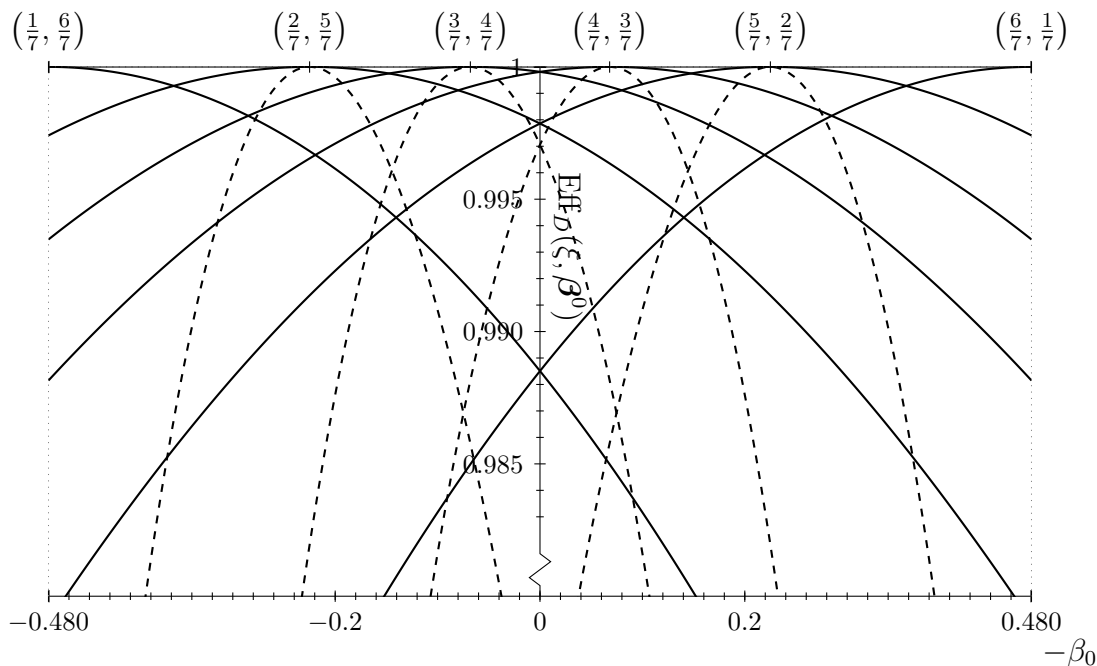


Abbildung 5.12: D -Effizienz im Logit-Modell für $k = 6$ und $\beta_1 = 1$: Vergleich von Designs mit exakt $k+1 = 7$ gleichgewichteten Trägerpunkten im Bereich $-\beta_0 \in [-0.480, 0.480]$ (gerundet).

Typ-2-Designs) eine Effizienz von mehr als 0.988 erreichbar. Werden auch die Zwischenstufen mit zwei echten Orbits mit 2 und 5 Punkten, 3 und 4 Punkten, 4 und 3 Punkten sowie 5 und 2 Punkten mit einbezogen, so ist bei Nutzung der Typ-1-Designs eine Effizienz von etwa 0.996 (Schnitte der gestrichelten Linien und der äußeren durchgezogenen Linien, Typ-1- und marginale Typ-2-Designs) und unter Nutzung der $k = 6$ Typ-2-Designs sogar von über 0.999 (Schnitte der durchgezogenen Linien, ausschließlich Typ-2-Designs) möglich.

Folglich können sehr effiziente Versuchspläne generiert werden, die nur auf einer minimalen Anzahl von Designpunkten, nämlich $k + 1$ Punkte, beruhen.

Warum die Typ-1-Designs hier deutlich schlechter sind als die Typ-2-Designs, bedarf weiterer zukünftiger Untersuchungen. Fakt ist, dass die Typ-2-Designs zumindest für irgendwelche Werte $c_q = -\beta_0$ (lokal) D -optimal sind, während die Typ-1-Designs im Allgemeinen für kein $c_q = -\beta_0$ (lokal) D -optimal sind — außer es sind gerade die $k - 2$ Typ-2-Designs.

6 Diskussion

In der vorliegenden Arbeit in Verbindung mit den vier dazugehörigen Veröffentlichungen ist es erstmals gelungen, nichtlineare Modelle, also insbesondere verallgemeinerte lineare Modelle, mit einem k -dimensionalen kugelförmigen oder allgemeiner mit einem ellipsenförmigen Versuchsbereich zu kombinieren und dafür (lokal) D -optimale Designs zu erstellen. Trotz der Möglichkeit mittels linearer Transformationen und Äquivarianz Ellipsoide zu nutzen, soll in dieser Diskussion der Fokus auf die Kugel, dem laut Albrecht Dürer „vollkommensten“ Körper, siehe Dürer (1525, Seite 9), gerichtet sein.

Bei der Bestimmung der optimalen Designs konnten Symmetrieeigenschaften der Kugel aber auch des D -Optimalitätskriteriums durch Invarianz- und Äquivarianzbetrachtungen vollumfänglich ausgenutzt werden. Dadurch war es möglich das k -dimensionale Problem auf ein eindimensionales Problem — die Bestimmung eines optimalen Designs auf dem Intervall $[-1, 1]$ — zu reduzieren. Natürlich ist die Idee ein komplexes Problem auf ein oder mehrere einfachere Probleme zu reduzieren nicht neu. So zerlegten beispielsweise Schmidt und Schwabe (2017) nichtlineare multiple Regressionsmodelle auf einem k -dimensionalen Quader oder einem k -dimensionalen Orthanten in k eindimensionale Teilprobleme und konnten so das Prinzip „Teile und herrsche“ erfolgreich umsetzen. Im Falle der Kugel handelt es sich nicht einfach um eine Aufteilung in gleichartige Aufgaben, hier ist es vielmehr eine Projektion des Problems auf das Intervall $[-1, 1]$, wobei aber trotzdem noch die Kugelform Einfluss auf die Lösung des marginalen Problems hat.

Für die beiden untersuchten Klassen von Modellen mit monotonen oder unimodalen Intensitätsfunktionen konnte gezeigt werden, dass das optimale marginale Design genau zwei Trägerstellen besitzt. Daraus resultiert ein optimales verallgemeinertes Design auf der Kugel bestehend aus genau zwei Orbits. Im Falle der monotonen Intensitätsfunktionen ist einer der beiden Orbits zu einem einzelnen Punkt degeneriert. In ihm weist die Intensitätsfunktion den höchsten Wert innerhalb des Versuchsbereiches auf, sodass dieser Punkt einen Pol hinsichtlich der Achse in Richtung der höchsten Intensität darstellt. Die Gewichte der beiden Orbits erlauben die Diskretisierung des echten Orbits durch die k Eckpunkte

eines regulären Simplex. Das so erhaltene (lokal) D -optimale Design weist nun die hervorragende Eigenschaft auf, dass es mit $k + 1$ Designpunkten einen minimalen Träger zur Schätzung des vollständigen Parametervektors besitzt und die Punkte gleiche Gewichte haben. Durch den minimalen Träger mit $k + 1$ Punkten des D -optimalen Designs folgt bekannterweise ohnehin ein gleichgewichtetes exaktes Design.

Im Falle der unimodalen Intensitätsfunktionen treten teilweise auch Konstellationen auf, in denen einer der beiden zu den Trägerstellen des optimalen marginalen Designs korrespondierenden Orbits zu einem Pol degeneriert ist. Diese Situation gestattet wieder die gleiche Diskretisierung mittels der Eckpunkte eines Simplex zu einem minimalen Träger und damit zu einem gleichgewichteten exakten Versuchsplan. Aber anderenfalls treten zwei echte Orbits mit Gewichten auf, die nur selten eine Diskretisierung zu einem exakten Design und dann meist auch nicht mit minimalem Träger erlauben. Genau für diese Situation gelingt es in dieser Arbeit nun zwar nicht optimale, dafür aber (hoch) effiziente Versuchspläne mit minimalem Träger anzugeben. Ob es vielleicht sogar ein (lokal) D -optimales Design mit minimalem Träger von genau $k + 1$ Punkten gibt, kann hier nicht beantwortet werden. Dieses optimale Design wird aber vermutlich eine deutlich komplexere Struktur aufweisen und gewiss nicht invariant bezüglich gewisser diskreter Rotationen oder Spiegelungen sein. Es zu finden und gegebenenfalls mit handhabbaren Strukturen zu beschreiben, kann Gegenstand weiterer Forschungen sein.

Kritisch sollte auch der Umgang mit den erlangten Resultaten sein. So bietet Satz 4.26 und insbesondere die Gleichung (4.7) eine recht prägnante Formulierung. Das zu lösende Gleichungssystem (5.5)–(5.7) aus Satz 5.5 im Fall (c) ist hingegen alles andere als das, was als mathematisch elegant zu bezeichnen wäre. Zwar gelingt es für unimodale Intensitätsfunktionen, die zusätzlich symmetrisch sind, das Gleichungssystem zu einer einzelnen Gleichung zu vereinfachen. Trotzdem ist Satz 5.9 mit (5.11) noch recht sperrig. Ob hier einfachere Darstellungen möglich sind, kann aktuell nicht beantwortet werden.

Auch die hier untersuchte Fragestellung bedarf einer kurzen Diskussion. So unterliegt sie zugegebenermaßen drei großen Einschränkungen. Zum Ersten wurde nur die multiple Regression betrachtet. Dies ist der vorteilhaften Struktur der Regressionsfunktion bei der multiplen Regression geschuldet. Sie erlaubt es orthogonale Transformationen des Versuchsbereiches direkt in den Parameterbereich zu überführen und umgekehrt. Wenn zusätzlich Interaktionsterme oder höhergradige Monome in der Regressionsfunktion enthalten sind, ist dies nicht mehr so einfach möglich. Ohne genauere Untersuchungen lässt sich hier aber nur vermuten, dass dann die optimalen Designs nicht mehr nur in zwei

Orbits Versuchseinstellungen aufweisen würden, sondern mehr Orbits und sogar Trägerpunkte innerhalb der Kugel auftreten.

Zum Zweiten lag der Fokus rein auf dem D -Optimalitätskriterium. Dies hat die hervorragende Eigenschaft, dass orthogonale Transformationen, also insbesondere Rotationen, dieses unverändert lassen. Somit können Invarianz- und Äquivarianzbetrachtungen problemlos durchgeführt werden. Andere Optimalitätskriterien weisen unter Umständen auch eine vergleichbare Eigenschaft auf. Eine zusätzliche Betrachtung dieser hätten den Rahmen dieser Arbeit gesprengt.

Zum Dritten konnten nicht beliebige nichtlineare Modelle betrachtet werden. Es wurden zwar zwei Klassen von Modellen mit monotoner beziehungsweise unimodaler Intensitätsfunktion untersucht, diese enthalten selbstverständlich aber nicht alle Intensitätsfunktionen. So erfüllt beispielsweise das Doppelexponentialmodell nicht die Bedingung (A1), da die Intensitätsfunktion zwar in null ein Maximum hat, an dieser Stelle jedoch nicht differenzierbar ist. Liegt diese nichtdifferenzierbare Stelle außerhalb der Kugel, so handelt es sich um den Fall mit einer monotonen Intensitätsfunktion und es lassen sich wieder optimale Designs in Form von einem echten Orbit und einem Pol erzeugen, die wiederum durch die Ecken eines Simplex diskretisiert werden können. Aber über den Übergangsbereich, bei dem die nichtdifferenzierbare Stelle innerhalb der Kugel liegt, lässt sich mit den vorliegenden Resultaten keine Aussage treffen. Hieraus resultiert die Frage, ob es hier vielleicht mehr als zwei Orbits im optimalen Design gibt.

Genau diese drei Einschränkungen, wie bereits angedeutet, liefern Potential für weitere intensive Untersuchungen. Wie sehen die (lokal) optimalen Designs aus, wenn Interaktionsterme oder höhergradige Monome in der Regressionsfunktion enthalten sind, wenn ein anderes Optimalitätskriterium als das D -Kriterium oder ein Modell außerhalb der beiden betrachteten Klassen von Intensitätsfunktionen verwendet wird? Diese drei Fragestellungen lassen sich natürlich beliebig kombinieren und um eine weitere ergänzen. Wie sehen die optimalen Designs aus, wenn der Versuchsbereich keine Kugel oder kein Ellipsoid ist, sondern es sich um eine Verschmelzung dessen mit einem Quader oder Orthanten handelt, also eine Art (höherdimensionaler) Zylinder?

Anhänge

A Anhang — Nachweis der Monotonie für Satz 5.14

Lemma A.1

In der Situation von Satz 5.9, also insbesondere für $k \geq 2$ und $\beta_0 \neq c_\lambda$, ist die rechte Seite der Gleichung (5.11) in r , die in $r = -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ stetig fortgesetzt wird, auf $\mathcal{I} = (0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$ streng monoton wachsend.

Bemerkung A.2

Dass die rechte Seite der Gleichung (5.11) an der Stelle $r = -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ stetig fortsetzbar ist, wurde bereits im Beweis von Satz 5.14 gezeigt. Die Beweisidee ist, nun zu untersuchen, ob deren Ableitung strikt positiv auf \mathcal{I} ist. Da dies sehr technisch, lang und daher schwer überschaubar ist, sollen hier zuvor kurz die einzelnen Beweisschritte skizziert werden.

Teil 1: Die rechte Seite der Gleichung (5.11) wird in Zähler h_1 und Nenner h_2 zerlegt und $h_{\sqrt{\cdot}}$ definiert. Von diesen drei Funktionen werden jeweils die ersten beiden Ableitungen gebildet und in $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ ausgewertet.

Teil 2: Es soll untersucht werden, in welchen Stellen $\frac{h_1(r)}{h_2(r)}$ die (strenge) Monotonie auf \mathcal{I} wechseln könnte. Dazu wird zunächst gezeigt, dass $\left(\frac{h_1}{h_2}\right)'$ auch stetig in $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$ fortsetzbar und dort auch positiv ist.

Teil 3: Es wird gezeigt, dass $h_{\sqrt{\cdot}}$ immer positiv ist.

Teil 4: Die Untersuchung von $\left(\frac{h_1}{h_2}\right)'(r) = 0$ vereinfacht sich auf die Untersuchung von $0 = h_1'(r)h_2(r) - h_1(r)h_2'(r)$ und mit $h_{\sqrt{\cdot}}$ immer positiv zur Untersuchung von $0 = (h_1'(r)h_2(r) - h_1(r)h_2'(r)) h_{\sqrt{\cdot}}(r)$.

Darin wird nacheinander h_1 , h_1' und $h_{\sqrt{\cdot}}'$ ersetzt und nach $h_{\sqrt{\cdot}}$ -Potenzen sortiert. Mit dem Trick „Ist $0 = x + y$ oder $0 = x - y$, so ist $0 = x^2 - y^2$.“ lässt sich die Wur-

zel des $h_{\sqrt{\cdot}}$ -Anteils beseitigen. Sortieren nach Potenzen von h_2 und mehrfaches Ersetzen von $h_{\sqrt{\cdot}}^2$ und h_2' liefert (A.5).

Teil 5: Es wird $c_\lambda - \beta_0 \in (0, \beta_1)$ als $c_\lambda - \beta_0 = u\beta_1$ mit $u \in (0, 1)$ und r als $\sqrt{v}(1+u)\beta_1$ mit $v \in (0, 1)$ geschrieben. Nach Vereinfachungen wird $u = \frac{\tilde{u}}{1+\tilde{u}}$ und $v = \frac{\tilde{v}}{1+\tilde{v}}$ gesetzt, sodass die beschränkte, offene Menge der Paare $(u, v) \in (0, 1)^2$ auf die unbeschränkte, offene Menge der Paare $(\tilde{u}, \tilde{v}) \in (0, \infty)^2$ überführt wird. Es wird anschließend $\tilde{h}_k : (0, \infty)^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $k \in \mathbb{N}$, definiert.

Teil 6: Nun wird per vollständiger Induktion gezeigt, dass $\tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) > 0$ für alle $k \in \mathbb{N}$, $k \geq 2$, ist. Dazu ist $\tilde{h}_1(\tilde{u}, \tilde{v}) \geq 0$ und $\tilde{h}_{k+1}(\tilde{u}, \tilde{v}) - \tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) > 0$ für $k \geq 1$.

Teil 7: Abschließende Zusammenfassung, dass $(\frac{h_1}{h_2})'(r) \neq 0$ und stetig auf \mathcal{I} und positiv in $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1$. Also ist $(\frac{h_1}{h_2})'(r)$ positiv auf \mathcal{I} , sodass $\frac{h_1}{h_2}$ streng monoton wachsend ist.

Beweis von Lemma A.1. (Zur Ideenfindung wurde das Programm Maple™ genutzt.)

Teil 1:

Seien wiederum $h_1(r)$ und $h_2(r)$ der Zähler und der Nenner der rechten Seite von (5.11). Dabei soll nun vereinfachend $c = c_\lambda - \beta_0$ gesetzt werden, also insbesondere $c \neq 0$, und

$$h_{\sqrt{\cdot}}(r) = \sqrt{(\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)c^2 r^2}$$

mit den ersten beiden Ableitungen

$$\begin{aligned} h'_{\sqrt{\cdot}}(r) &= \frac{-2r(\beta_1^2 - c^2 - r^2) + 4(k^2 - 1)c^2 r}{h_{\sqrt{\cdot}}(r)} = \frac{-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r}{h_{\sqrt{\cdot}}(r)} \\ h''_{\sqrt{\cdot}}(r) &= \frac{(-2(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 + 4r^2)h_{\sqrt{\cdot}}(r) - (-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r)h'_{\sqrt{\cdot}}(r)}{h_{\sqrt{\cdot}}^2(r)}. \end{aligned}$$

Da auch die Auswertung an der Stelle $r = -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1 = -|c| + \beta_1$ benötigt wird, soll deren Berechnung parallel hierzu erfolgen.

$$\begin{aligned} h_{\sqrt{\cdot}}(-|c| + \beta_1) &= 2k|c|(-|c| + \beta_1) \\ h'_{\sqrt{\cdot}}(-|c| + \beta_1) &= 2k|c| - \frac{2}{k}\beta_1 \\ h''_{\sqrt{\cdot}}(-|c| + \beta_1) &= \frac{2((c^2 - |c|\beta_1 + \beta_1^2)k^2 - \beta_1^2)}{k^3|c|(-|c| + \beta_1)} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$h_1(r) = - \left(-2 k r^2 (\beta_1^2 + c^2 - r^2) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 - 4 c^2 r^2 + (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h_{\sqrt{\cdot}}(r) \right)$$

und

$$\begin{aligned} h_2(r) &= (k+1) r (r+c-\beta_1)(r+c+\beta_1)(r-c+\beta_1)(r-c-\beta_1) \\ &= (k+1) r (r^2 - (c-\beta_1)^2)(r^2 - (c+\beta_1)^2) \end{aligned}$$

und deren Ableitungen

$$\begin{aligned} h_1'(r) &= 4 k r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4 k r^3 + 4 r (\beta_1^2 - c^2 - r^2) + 8 c^2 r - 2 r h_{\sqrt{\cdot}}(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h'_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &= 4 k r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4 k r^3 + 4 r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 2 r h_{\sqrt{\cdot}}(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h'_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &= 4 (k+1) r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4 k r^3 - 2 r h_{\sqrt{\cdot}}(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h'_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ h_1''(r) &= 4 (k+1) (\beta_1^2 + c^2 - 3 r^2) - 12 k r^2 - 2 h_{\sqrt{\cdot}}(r) - 4 r h'_{\sqrt{\cdot}}(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h''_{\sqrt{\cdot}}(r) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} h_2'(r) &= (k+1) (r^2 - (c-\beta_1)^2)(r^2 - (c+\beta_1)^2) + (k+1) r (2r)(r^2 - (c+\beta_1)^2) \\ &\quad + (k+1) r (r^2 - (c-\beta_1)^2)(2r) \\ &= (k+1) ((r^2 - (c-\beta_1)^2) (r^2 - (c+\beta_1)^2) + 2 r^2 (r^2 - (c+\beta_1)^2) + 2 r^2 (r^2 - (c-\beta_1)^2)) \\ &= (k+1) (5 r^4 - 3 r^2 (c-\beta_1)^2 - 3 r^2 (c+\beta_1)^2 + (c-\beta_1)^2 (c+\beta_1)^2) \\ &= (k+1) (5 r^4 - 6 r^2 (c^2 + \beta_1^2) + (c^2 - \beta_1^2)^2) \\ h_2''(r) &= (k+1) (20 r^3 - 12 r (c^2 + \beta_1^2)) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} h_1'(-|c|+\beta_1) &= 4 (k+1) (-|c|+\beta_1) \beta_1 \left(2 |c| - \beta_1 \frac{k-1}{k} \right) \\ h_1''(-|c|+\beta_1) &= \frac{4 (k+1)}{k^3 |c|} (-2 k^3 |c|^3 + k^2 (-5k+3) |c| \beta_1^2 + k^2 (9k-3) c^2 \beta_1 - (k-1) \beta_1^3) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} h_2'(-|c|+\beta_1) &= -8 (k+1) (-|c|+\beta_1)^2 |c| \beta_1 \neq 0 \\ h_2''(-|c|+\beta_1) &= 8 (k+1) (-|c|+\beta_1) (c^2 - 5 |c| \beta_1 + \beta_1^2) . \end{aligned}$$

Teil 2:

Nun wird untersucht, an welchen Stellen die rechte Seite der Gleichung (5.11) in r auf $(0, |c_\lambda - \beta_0| + \beta_1) = (0, |c| + \beta_1)$ potentiell ihre strenge Monotonie wechseln könnte, also wo

$$0 \stackrel{!}{=} \left(\frac{h_1(r)}{h_2(r)} \right)' = \frac{h_1'(r)h_2(r) - h_1(r)h_2'(r)}{h_2^2(r)} \quad (\text{A.1})$$

gilt. Wie auch $\frac{h_1(r)}{h_2(r)}$ existiert diese Ableitung in $r = -|c| + \beta_1$ aufgrund der Division durch $h_2(-|c| + \beta_1) = 0$ nicht, lässt sich aber an dieser Stelle stetig fortsetzen. Auch hier

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \left(\frac{h_1(r)}{h_2(r)} \right)' &= \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_1'(r)h_2(r) - h_1(r)h_2'(r)}{h_2^2(r)} \\ &\stackrel{(*)}{=} \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_1''(r)h_2(r) + h_1'(r)h_2'(r) - h_1'(r)h_2'(r) - h_1(r)h_2''(r)}{2h_2(r)h_2'(r)} \\ &= \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_1''(r)h_2(r) - h_1(r)h_2''(r)}{2h_2(r)h_2'(r)} \\ &= \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_1''(r)}{2h_2'(r)} - \frac{1}{2} \frac{h_1(r)}{h_2(r)} \frac{h_2''(r)}{h_2'(r)} \\ &= \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_1''(r)}{2h_2'(r)} - \frac{1}{2} \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_1(r)}{h_2(r)} \cdot \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \frac{h_2''(r)}{h_2'(r)} \end{aligned}$$

wird an der mit (*) gekennzeichneten Umformung die Regel von de l'Hospital angewendet, sodass nun (5.20) ausgenutzt werden kann:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow -|c| + \beta_1} \left(\frac{h_1(r)}{h_2(r)} \right)' &= \frac{4(k+1)(-2k^3|c|^3 + k^2(-5k+3)|c|\beta_1^2 + k^2(9k-3)c^2\beta_1 - (k-1)\beta_1^3)}{-16k^3|c|(k+1)(-|c| + \beta_1)^2|c|\beta_1} \\ &\quad - \frac{1}{2} \cdot \frac{-2k|c| + (k-1)\beta_1}{2k(-|c| + \beta_1)|c|} \cdot \frac{8(k+1)(-|c| + \beta_1)(c^2 - 5|c|\beta_1 + \beta_1^2)}{-8(k+1)(-|c| + \beta_1)^2|c|\beta_1} \\ &= \frac{(-2k^3|c|^3 + k^2(-5k+3)|c|\beta_1^2 + k^2(9k-3)c^2\beta_1 - (k-1)\beta_1^3)}{-4k^3|c|(-|c| + \beta_1)^2|c|\beta_1} \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \frac{-2k|c| + (k-1)\beta_1}{2k|c|} \cdot \frac{(c^2 - 5|c|\beta_1 + \beta_1^2)}{(-|c| + \beta_1)^2|c|\beta_1} \\ &= \frac{2k^2(k+1)c^2 - 2k^2(k-1)|c|\beta_1 + (k-1)(k^2+1)\beta_1^2}{4k^3(-|c| + \beta_1)^2c^2} \end{aligned}$$

Der Zähler des Bruches ist positiv für den zu untersuchenden Bereich, denn betrachtet man den Zähler als Funktion in $(c, \beta_1) \in \mathbb{R}^2$ und vernachlässigt die enthaltenen Betragsbildung, welche den Zähler für $\beta_1 \geq 0$ höchstens vergrößert, so hätte der Zähler sein einziges lokales beziehungsweise globales Minimum in $(c, \beta_1) = (0, 0)$ mit dem Wert 0 für $k \geq 2$, für $k = 1$

wäre das Minimum ebenfalls 0 bei $c = 0$ für alle $\beta_1 \in \mathbb{R}$. Dies ergibt sich direkt aus dem Gradienten

$$\nabla = (4k^2(k+1)c - 2k^2(k-1)\beta_1, -2k^2(k-1)c + 2(k-1)(k^2+1)\beta_1) \stackrel{!}{=} (0, 0)$$

und der zugehörigen Hesse-Matrix

$$\begin{pmatrix} 4k^2(k+1) & -2k^2(k-1) \\ -2k^2(k-1) & 2(k-1)(k^2+1) \end{pmatrix},$$

welche für alle $k \geq 2$ positiv definit ist. Damit ist $\lim_{r \rightarrow -|c|+\beta_1} \left(\frac{h_1(r)}{h_2(r)} \right)'$ positiv für $c \neq 0$ und $\beta_1 > 0$.

Teil 3:

Nun wird gezeigt, dass $h_{\sqrt{\cdot}}(r)$ immer positiv ist. Der Radikant $(\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 + 4(k^2 - 1)c^2 r^2$ ist offensichtlich nichtnegativ. Dass der Radikant nicht null werden kann, muss nun kurz untersucht werden. Angenommen, der Radikant wäre null, dann muss r^2 die quadratische Gleichung

$$0 = (r^2)^2 + r^2 [4(k^2 - 1)c^2 - 2(\beta_1^2 - c^2)] + (\beta_1^2 - c^2)^2$$

lösen. Dies geschieht durch

$$(r^2)_{1,2} = -2(k^2 - 1)c^2 + (\beta_1^2 - c^2) \pm \sqrt{4k^2(k^2 - 1)c^4 - 4(k^2 - 1)c^2\beta_1^2}.$$

Damit r reellwertige Lösungen liefert, muss r^2 reell und nichtnegativ sein. Dazu muss insbesondere die Diskriminante nichtnegativ sein, was für $|c| \geq \frac{1}{k}\beta_1$ gilt. Zusätzlich muss aber weiterhin $\beta_1 > |c|$ gelten. Es gilt für die beiden reellwertigen Lösungen $(r^2)_{1,2}$

$$\begin{aligned} & -2(k^2 - 1)c^2 + (\beta_1^2 - c^2) + \sqrt{4k^2(k^2 - 1)c^4 - 4(k^2 - 1)c^2\beta_1^2} \\ & > -2(k^2 - 1)c^2 + (\beta_1^2 - c^2) - \sqrt{4k^2(k^2 - 1)c^4 - 4(k^2 - 1)c^2\beta_1^2}. \end{aligned}$$

Dabei ist aber bereits die linke Seite, also die größere der beiden Lösungen $(r^2)_{1,2}$, nicht-positiv. Dies folgt direkt aus der Stetigkeit dieser und der Lösungsmenge beim Nullsetzen:

$$\begin{aligned} 0 &= -2(k^2 - 1)c^2 + (\beta_1^2 - c^2) + \sqrt{4k^2(k^2 - 1)c^4 - 4(k^2 - 1)c^2\beta_1^2} \\ \implies 0 &= (\beta_1^2 - c^2)^2 \implies \beta_1 = |c| \end{aligned}$$

Diese Lösungsmenge liegt aber außerhalb des Bereiches. Einsetzen des Wertes $|c| = \frac{1}{k}\beta_1$, welcher im Bereich liegt, in $-2(k^2 - 1)c^2 + (\beta_1^2 - c^2) + \sqrt{4k^2(k^2 - 1)c^4 - 4(k^2 - 1)c^2\beta_1^2}$ liefert

$$-2(k^2 - 1)c^2 + (\beta_1^2 - c^2) + \sqrt{4k^2(k^2 - 1)c^4 - 4(k^2 - 1)c^2\beta_1^2} \Big|_{|c|=\frac{1}{k}\beta_1} = -\frac{k^2 - 1}{k^2}\beta_1^2 < 0 ,$$

sodass beide Lösungen $(r^2)_{1,2}$ negativ sind, also $h_{\sqrt{\cdot}}(r)$ für $k \geq 2$ immer positiv ist.

Teil 4:

Für $r \in (0, |c| + \beta_1)$ und $r \neq -|c| + \beta_1$ ist $h_2(r) \neq 0$, sodass sich die Gleichung (A.1) vereinfacht zu

$$0 = h_1'(r)h_2(r) - h_1(r)h_2'(r) .$$

Mit dem Wissen, dass $h_{\sqrt{\cdot}}(r)$ immer positiv ist, ist dies äquivalent zu

$$\begin{aligned} 0 &= (h_1'(r)h_2(r) - h_1(r)h_2'(r)) h_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &= h_1'(r)h_2(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) - h_1(r)h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) . \end{aligned}$$

Ersetzen von $h_1(r)$ und $h_1'(r)$ und anschließend $h_{\sqrt{\cdot}}(r)$ sowie Sortieren nach Potenzen von $h_{\sqrt{\cdot}}(r)$ liefert:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(4(k+1)r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4kr^3 - 2rh_{\sqrt{\cdot}}(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2)h_{\sqrt{\cdot}}'(r)\right) h_2(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &\quad + \left(-2kr^2(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 - 4c^2r^2 + (\beta_1^2 - c^2 + r^2)h_{\sqrt{\cdot}}(r)\right) h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &= \left(4(k+1)r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4kr^3 - 2rh_{\sqrt{\cdot}}(r) \right. \\ &\quad \left. - (\beta_1^2 - c^2 + r^2)(-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2c^2r)(h_{\sqrt{\cdot}}(r))^{-1}\right) h_2(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &\quad + \left(-2kr^2(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 - 4c^2r^2 + (\beta_1^2 - c^2 + r^2)h_{\sqrt{\cdot}}(r)\right) h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &= 4(k+1)r(\beta_1^2 + c^2 - r^2)h_2(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) - 4kr^3h_2(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) - 2rh_2(r)h_{\sqrt{\cdot}}^2(r) \\ &\quad - (\beta_1^2 - c^2 + r^2)(-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2c^2r)h_2(r) \\ &\quad - 2kr^2(\beta_1^2 + c^2 - r^2)h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) - 4c^2r^2h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}(r) \\ &\quad + (\beta_1^2 - c^2 + r^2)h_2'(r)h_{\sqrt{\cdot}}^2(r) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -2r h_2(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) + (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h_2'(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) \\
&\quad - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) (-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r) h_2(r) \\
&\quad - 2kr^2 (\beta_1^2 + c^2 - r^2) h_2'(r) h_{\sqrt{-}}(r) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 h_2'(r) h_{\sqrt{-}}(r) - 4c^2 r^2 h_2'(r) h_{\sqrt{-}}(r) \\
&\quad + 4(k+1)r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) h_2(r) h_{\sqrt{-}}(r) - 4kr^3 h_2(r) h_{\sqrt{-}}(r) \\
&= (-2r h_2(r) + (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h_2'(r)) h_{\sqrt{-}}^2(r) \\
&\quad - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) (-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r) h_2(r) \\
&\quad + \left(-2kr^2 (\beta_1^2 + c^2 - r^2) h_2'(r) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 h_2'(r) - 4c^2 r^2 h_2'(r) \right. \\
&\quad \left. + 4(k+1)r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) h_2(r) - 4kr^3 h_2(r) \right) h_{\sqrt{-}}(r)
\end{aligned}$$

Zum Beseitigen des Wurzelterms $h_{\sqrt{-}}$ wird folgender „Trick“ genutzt. Gilt für zwei reelle Werte x und y die Beziehung $0 = x + y$ oder $0 = x - y$, so ist $0 = x^2 - y^2$. Diese Beziehung soll nun angewendet werden, wobei als x die ersten beiden Summanden und y der dritte Summand der rechten Seite fungieren werden.

$$\begin{aligned}
0 &= \left[(-2r h_2(r) + (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h_2'(r)) h_{\sqrt{-}}^2(r) \right. \\
&\quad \left. - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) (-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r) h_2(r) \right]^2 \\
&\quad - \left[-2kr^2 (\beta_1^2 + c^2 - r^2) h_2'(r) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 h_2'(r) - 4c^2 r^2 h_2'(r) \right. \\
&\quad \left. + 4(k+1)r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) h_2(r) - 4kr^3 h_2(r) \right]^2 h_{\sqrt{-}}^2(r)
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Nun wird in Potenzen von $h_2(r)$ sortiert. Für das absolute Glied $h_2^0(r)$ ist der Koeffizient

$$(\beta_1^2 - c^2 + r^2)^2 h_2'^2(r) h_{\sqrt{-}}^4(r) - \left[-2kr^2 (\beta_1^2 + c^2 - r^2) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 - 4c^2 r^2 \right]^2 h_2'^2(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) .$$

Dieser lautet nach einmaligem Ersetzen von $h_{\sqrt{-}}^2(r)$ im ersten Summanden

$$4r (\beta_1^2 + kc^2 - kr^2) h_2'^2(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) h_2(r) . \tag{A.3}$$

Durch den Faktor $h_2(r)$ in (A.3) ist der Koeffizient für $h_2^0(r)$ eigentlich null, sodass sich nun der Koeffizient für $h_2(r)$ in (A.2) zu

$$\begin{aligned}
&2 \left(-2r h_{\sqrt{-}}^2(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) (-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r) \right) (\beta_1^2 - c^2 + r^2) h_2'(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) \\
&\quad - 2 \left(-2kr^2 (\beta_1^2 + c^2 - r^2) + (\beta_1^2 - c^2 - r^2)^2 - 4c^2 r^2 \right) h_2'(r) \\
&\quad \cdot (4(k+1)r (\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4kr^3) h_{\sqrt{-}}^2(r) \\
&\quad + 4r (\beta_1^2 + kc^2 - kr^2) h_2'^2(r) h_{\sqrt{-}}^2(r)
\end{aligned}$$

ergibt und wiederum nach einmaligem Ersetzen von $h_{\sqrt{-}}^2(r)$ und $h_2'(r)$:

$$4(-\beta_1^2 - k c^2 + 3 k r^2) h_2'(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) h_2(r) \quad (\text{A.4})$$

Auch in (A.4) liegt wiederum ein zusätzlicher Faktor $h_2(r)$ vor, sodass der Koeffizient für $h_2(r)$ eigentlich null ist und sich der Koeffizient für $h_2^2(r)$ in (A.2) zu

$$\begin{aligned} & \left[(-2r) h_{\sqrt{-}}^2(r) - (\beta_1^2 - c^2 + r^2) (-2r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) + 4k^2 c^2 r) \right]^2 \\ & - \left[4(k+1)r(\beta_1^2 + c^2 - r^2) - 4kr^3 \right]^2 h_{\sqrt{-}}^2(r) + 4(-\beta_1^2 - k c^2 + 3 k r^2) h_2'(r) h_{\sqrt{-}}^2(r) \end{aligned}$$

ergibt. Durch Ersetzen von $h_{\sqrt{-}}^2(r)$ und $h_2'(r)$ lässt sich die Gleichung (A.2) als

$$\begin{aligned} 0 = & -4(k+1)h_2^2(r) \\ & \cdot \left[kr^{10} + (4k^3c^2 - 3kc^2 - 3\beta_1^2)r^8 \right. \\ & + (8k^3\beta_1^2c^2 - 8k^3c^4 - 12k^2\beta_1^2c^2 + 4k^2c^4 \\ & \quad - 2k\beta_1^4 + 4k\beta_1^2c^2 + 2kc^4 + 4\beta_1^4 + 8\beta_1^2c^2)r^6 \\ & + (4k^3\beta_1^4c^2 + 8k^3\beta_1^2c^4 + 4k^3c^6 - 8k^2\beta_1^4c^2 + 32k^2\beta_1^2c^4 - 8k^2c^6 \\ & \quad - 6k\beta_1^4c^2 - 12k\beta_1^2c^4 + 2kc^6 + 2\beta_1^6 - 12\beta_1^4c^2 - 6\beta_1^2c^4)r^4 \\ & + (4k^2\beta_1^6c^2 - 4k^2\beta_1^4c^4 - 4k^2\beta_1^2c^6 + 4k^2c^8 + k\beta_1^8 + 4k\beta_1^6c^2 \\ & \quad - 14k\beta_1^4c^4 + 12k\beta_1^2c^6 - 3kc^8 - 4\beta_1^8 + 8\beta_1^6c^2 - 4\beta_1^4c^4)r^2 \\ & \left. + k\beta_1^8c^2 - 4k\beta_1^6c^4 + 6k\beta_1^4c^6 - 4k\beta_1^2c^8 + kc^{10} + \beta_1^{10} \right. \\ & \quad \left. - 4\beta_1^8c^2 + 6\beta_1^6c^4 - 4\beta_1^4c^6 + \beta_1^2c^8 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

schreiben.

Teil 5:

Im nächsten Schritt lässt sich der Vorfaktor $-4(k+1)h_2^2(r)$ ignorieren. Es ist $-4(k+1) < 0$ und $h_2^2(r) > 0$ für $r \in (0, |c| + \beta_1)$ und $r \neq -|c| + \beta_1$.

In den eckigen Klammern der Gleichung (A.5) kommt c nur mit geradem Exponenten vor. Damit lässt sich $c < 0$ ohne Beschränkung der Allgemeinheit vernachlässigen. Auch $c = 0$ muss nach Voraussetzung nicht betrachtet werden. Deshalb lässt sich $c \in (0, \beta_1)$ als $c = u\beta_1$ mit $u \in (0, 1)$ schreiben.

Damit vereinfacht sich (A.5) effektiv zu:

$$\begin{aligned}
0 = & \left[kr^{10} + (4k^3u^2 - 3ku^2 - 3) \beta_1^2 r^8 \right. \\
& + (8k^3u^2 - 8k^3u^4 - 12k^2u^2 + 4k^2u^4 - 2k + 4ku^2 + 2ku^4 + 4 + 8u^2) \beta_1^4 r^6 \\
& + (4k^3u^2 + 8k^3u^4 + 4k^3u^6 - 8k^2u^2 + 32k^2u^4 - 8k^2u^6 \\
& \quad - 6ku^2 - 12ku^4 + 2ku^6 + 2 - 12u^2 - 6u^4) \beta_1^6 r^4 \\
& + (4k^2u^2 - 4k^2u^4 - 4k^2u^6 + 4k^2u^8 + k + 4ku^2 \\
& \quad - 14ku^4 + 12ku^6 - 3ku^8 - 4 + 8u^2 - 4u^4) \beta_1^8 r^2 \\
& \left. + (ku^2 - 4ku^4 + 6ku^6 - 4ku^8 + ku^{10} + 1 - 4u^2 + 6u^4 - 4u^6 + u^8) \beta_1^{10} \right]
\end{aligned}$$

Wegen $0 < r < c + \beta_1 = u\beta_1 + \beta_1 = (1 + u)\beta_1$ lässt sich r auch schreiben als $\sqrt{v}(1 + u)\beta_1$ mit $v \in (0, 1)$. Hier kann $r \neq -c + \beta_1$ vernachlässigt werden. Damit lässt sich auch der Faktor $\beta_1^{10} > 0$ entfernen:

$$\begin{aligned}
0 = & \left[kv^5(1 + u)^{10} + (4k^3u^2 - 3ku^2 - 3) v^4 (1 + u)^8 \right. \\
& + (8k^3u^2 - 8k^3u^4 - 12k^2u^2 + 4k^2u^4 - 2k + 4ku^2 + 2ku^4 + 4 + 8u^2) v^3 (1 + u)^6 \\
& + (4k^3u^2 + 8k^3u^4 + 4k^3u^6 - 8k^2u^2 + 32k^2u^4 - 8k^2u^6 \\
& \quad - 6ku^2 - 12ku^4 + 2ku^6 + 2 - 12u^2 - 6u^4) v^2 (1 + u)^4 \\
& + (4k^2u^2 - 4k^2u^4 - 4k^2u^6 + 4k^2u^8 + k + 4ku^2 \\
& \quad - 14ku^4 + 12ku^6 - 3ku^8 - 4 + 8u^2 - 4u^4) v (1 + u)^2 \\
& \left. + (ku^2 - 4ku^4 + 6ku^6 - 4ku^8 + ku^{10} + 1 - 4u^2 + 6u^4 - 4u^6 + u^8) \right]
\end{aligned}$$

Durch Ersetzen von $u = \frac{\tilde{u}}{1+\tilde{u}}$ und $v = \frac{\tilde{v}}{1+\tilde{v}}$ lässt sich die beschränkte, offene Menge der Paare $(u, v) \in (0, 1)^2$ auf die unbeschränkte, offene Menge der Paare $(\tilde{u}, \tilde{v}) \in (0, \infty)^2$, der positive Quadrant, überführen. Es ergibt sich

$$0 = \frac{(2\tilde{u} + 1)^4}{(1 + \tilde{u})^{10}(1 + \tilde{v})^5} \tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v})$$

mit $\tilde{h}_k : (0, \infty)^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $k \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned}
\tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) = & \left((80k^3 - 16k^2 + 16k - 16) \tilde{u}^6 + (224k^3 - 96k^2 + 64k - 64) \tilde{u}^5 \right. \\
& + (224k^3 - 160k^2 + 96k - 96) \tilde{u}^4 + (96k^3 - 96k^2 + 64k - 64) \tilde{u}^3 \\
& \left. + (16k^3 - 16k^2 + 16k - 16) \tilde{u}^2 \right) \tilde{v}^5 \\
& + \left((112k^3 - 16k^2 - 64k) \tilde{u}^6 + (352k^3 - 160k^2 - 208k + 16) \tilde{u}^5 \right. \\
& + (384k^3 - 320k^2 - 256k + 64) \tilde{u}^4 + (176k^3 - 208k^2 - 160k + 96) \tilde{u}^3 \\
& \left. + (32k^3 - 32k^2 - 64k + 64) \tilde{u}^2 + (-16k + 16) \tilde{u} \right) \tilde{v}^4 \\
& + \left((48k^3 + 16k^2 - 32k) \tilde{u}^6 + (160k^3 - 32k^2 - 128k + 32) \tilde{u}^5 \right. \\
& + (192k^3 - 152k^2 - 148k + 100) \tilde{u}^4 + (96k^3 - 120k^2 - 40k + 104) \tilde{u}^3 \\
& \left. + (20k^3 - 12k^2 + 16k + 32) \tilde{u}^2 + (8k - 8) \tilde{u} + 4k - 4 \right) \tilde{v}^3 \\
& + \left((16k^3 + 16k^2 - 16k - 16) \tilde{u}^6 + (32k^3 + 32k^2 - 48k - 48) \tilde{u}^5 \right. \\
& + (32k^3 + 16k^2 - 32k - 64) \tilde{u}^4 + (16k^3 + 40k - 72) \tilde{u}^3 \\
& \left. + (4k^3 + 8k^2 + 52k - 68) \tilde{u}^2 + (16k - 32) \tilde{u} + 4k - 4 \right) \tilde{v}^2 \\
& + \left((8k^2 + 4k - 4) \tilde{u}^4 + (8k^2 + 16k - 16) \tilde{u}^3 \right. \\
& \left. + (4k^2 + 17k - 19) \tilde{u}^2 + (4k - 6) \tilde{u} + k + 1 \right) \tilde{v} \\
& + (k+1) \tilde{u}^2 + 2\tilde{u} + 1
\end{aligned}$$

Auch hier ist der Vorfaktor $\frac{(2\tilde{u}+1)^4}{(1+\tilde{u})^{10}(1+\tilde{v})^5}$ wiederum positiv und kann ignoriert werden.

Teil 6:

Nun wird gezeigt, dass $\tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) > 0$ für alle $k \in \mathbb{N}$, $k \geq 2$, ist. Dies erfolgt per vollständiger Induktion. Dazu wird mit $k = 1$ gestartet. (Es sei kurz angemerkt, dass mit $k = 2$ gestartet werden könnte. Hier wird der „einfachere“ Anfang bei $k = 1$ gewählt, wobei dort nur $\tilde{h}_1(\tilde{u}, \tilde{v}) \geq 0$ gilt. Erst durch die anschließende Betrachtung der folgenden Differenzen, welche alle strikt positiv sind, folgt die Aussage für $k \geq 2$.)

$$\begin{aligned}
\tilde{h}_1(\tilde{u}, \tilde{v}) = & (64\tilde{u}^6 + 128\tilde{u}^5 + 64\tilde{u}^4) \tilde{v}^5 + (32\tilde{u}^6 - 128\tilde{u}^4 - 96\tilde{u}^3) \tilde{v}^4 \\
& + (32\tilde{u}^6 + 32\tilde{u}^5 - 8\tilde{u}^4 + 40\tilde{u}^3 + 56\tilde{u}^2) \tilde{v}^3 \\
& + (-32\tilde{u}^5 - 48\tilde{u}^4 - 16\tilde{u}^3 - 4\tilde{u}^2 - 16\tilde{u}) \tilde{v}^2 \\
& + (8\tilde{u}^4 + 8\tilde{u}^3 + 2\tilde{u}^2 - 2\tilde{u} + 2) \tilde{v} + 2\tilde{u}^2 + 2\tilde{u} + 1 \\
= & \left((16\tilde{u}^4 + 32\tilde{u}^3 + 16\tilde{u}^2) \tilde{v}^3 + (8\tilde{u}^4 + 16\tilde{u}^3 - 8\tilde{u}) \tilde{v}^2 \right. \\
& \left. + (8\tilde{u}^4 + 16\tilde{u}^3 + 10\tilde{u}^2 + 2\tilde{u} + 2) \tilde{v} + 2\tilde{u}^2 + 2\tilde{u} + 1 \right) \cdot (2\tilde{u}\tilde{v} - 1)^2 \geq 0
\end{aligned}$$

Dabei ist $(2\tilde{u}\tilde{v}-1)^2 \geq 0$ und

$$\begin{aligned} & (16\tilde{u}^4 + 32\tilde{u}^3 + 16\tilde{u}^2) \tilde{v}^3 + (8\tilde{u}^4 + 16\tilde{u}^3 - 8\tilde{u}) \tilde{v}^2 \\ & \quad + (8\tilde{u}^4 + 16\tilde{u}^3 + 10\tilde{u}^2 + 2\tilde{u} + 2) \tilde{v} + 2\tilde{u}^2 + 2\tilde{u} + 1 \\ & \geq 16\tilde{u}^2\tilde{v}^3 - 8\tilde{u}\tilde{v}^2 + 2\tilde{v} = \tilde{v}(4\tilde{u}\tilde{v} - 1)^2 + \tilde{v} > 0 . \end{aligned}$$

Nun wird die Differenz $\tilde{h}_{k+1}(\tilde{u}, \tilde{v}) - \tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v})$ für $k \geq 1$ betrachtet und gezeigt, dass diese positiv ist.

$$\begin{aligned} & \tilde{h}_{k+1}(\tilde{u}, \tilde{v}) - \tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) \\ & = ((240k^2 + 208k + 80) \tilde{u}^6 + (672k^2 + 480k + 192) \tilde{u}^5 + (672k^2 + 352k + 160) \tilde{u}^4 \\ & \quad + (288k^2 + 96k + 64) \tilde{u}^3 + (48k^2 + 16k + \underline{16}) \tilde{u}^2) \tilde{v}^5 \\ & \quad + ((336k^2 + 304k + 32) \tilde{u}^6 + (1056k^2 + 736k - 16) \tilde{u}^5 + (1152k^2 + 512k - 192) \tilde{u}^4 \\ & \quad + (528k^2 + 112k - 192) \tilde{u}^3 + (96k^2 + 32k - 64) \tilde{u}^2 - \underline{16}\tilde{u}) \tilde{v}^4 \\ & \quad + ((144k^2 + 176k + 32) \tilde{u}^6 + (480k^2 + 416k) \tilde{u}^5 + (576k^2 + 272k - 108) \tilde{u}^4 \\ & \quad + (288k^2 + 48k - 64) \tilde{u}^3 + (60k^2 + 36k + 24) \tilde{u}^2 + 8\tilde{u} + \underline{4}) \tilde{v}^3 \\ & \quad + ((48k^2 + 80k + 16) \tilde{u}^6 + (96k^2 + 160k + 16) \tilde{u}^5 + (96k^2 + 128k + 16) \tilde{u}^4 \\ & \quad + (48k^2 + 48k + 56) \tilde{u}^3 + (12k^2 + 28k + 64) \tilde{u}^2 + 16\tilde{u} + \underline{4}) \tilde{v}^2 \\ & \quad + ((16k + 12) \tilde{u}^4 + (16k + 24) \tilde{u}^3 + (8k + 21) \tilde{u}^2 + 4\tilde{u} + 1) \tilde{v} + \tilde{u}^2 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Dabei sind alle Koeffizienten (z. B. $1152k^2 + 512k - 192$) für $k \geq 1$ positiv, bis auf das Glied $-16\tilde{u}\tilde{v}^4$. Also

$$\tilde{h}_{k+1}(\tilde{u}, \tilde{v}) - \tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) > 16\tilde{u}^2\tilde{v}^5 - 16\tilde{u}\tilde{v}^4 + 4\tilde{v}^3 = \tilde{v}^3(4\tilde{u}\tilde{v} - 2)^2 \geq 0 ,$$

wobei $16\tilde{u}^2\tilde{v}^5 - 16\tilde{u}\tilde{v}^4 + 4\tilde{v}^3$ die unterstrichenen Summanden aus (A.6) sind.

Damit folgt iterativ, dass $\tilde{h}_k(\tilde{u}, \tilde{v}) > 0$ für $k > 1$ und $\tilde{h}_1(\tilde{u}, \tilde{v}) \geq 0$ ist.

Teil 7:

Abschließend kann festgehalten werden, dass gezeigt wurde, dass $(\frac{h_1}{h_2})'(r) \neq 0$ und stetig auf \mathcal{I} ist. An der Stelle $-|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1 = -|c| + \beta_1$ ist der Wert positiv. Folglich muss $(\frac{h_1}{h_2})'(r)$ positiv auf \mathcal{I} sein, sodass $\frac{h_1}{h_2}$ streng monoton wachsend auf \mathcal{I} ist. \square

Lemma A.3

In der Situation von Satz 5.9, also insbesondere für $k \geq 2$ und $\beta_0 = c_\lambda$, ist die rechte Seite der Gleichung (5.15) in r auf $\mathcal{I} = (0, \beta_1)$ streng monoton wachsend.

Beweis. Die Nullstellen des Nenners der rechten Seite von (5.15) sind $r = 0$, $r = -\beta_1$ und $r = \beta_1$, sodass im Intervall \mathcal{I} keine Unstetigkeitsstellen sind.

Nun wird untersucht, an welchen Stellen die Monotonie wechseln könnte, sodass die Nullstellen der ersten Ableitung bestimmt werden. Es ist

$$\left(-\frac{2(\beta_1^2 - k r^2)}{(k+1)r(\beta_1^2 - r^2)} \right)' = \frac{2k r^4 + 2(k-3)\beta_1^2 r^2 + 2\beta_1^4}{(k+1)r^2(\beta_1^2 - r^2)^2}$$

mit den beiden Zählernullstellen in r^2 , sofern sie reellwertig existieren,

$$\frac{-(k-3) \pm \sqrt{(k-3)^2 - 4k}}{2k} \beta_1^2 .$$

Da bereits $-(k-3) + \sqrt{(k-3)^2 - 4k} < 0$ für $k \geq 1$ ist, sind beide Zählernullstellen in r^2 negativ oder komplexwertig. Somit hat der Zähler keine reellen Nullstellen in r , sodass kein Monotoniewechsel stattfindet.

Da $\frac{\beta_1}{2} \in \mathcal{I} = (0, \beta_1)$ liegt und die Ableitung der rechten Seite von (5.15) für $r = \frac{\beta_1}{2}$ den positiven Wert

$$\frac{8(5k+4)}{9(k+1)\beta_1^2}$$

liefert, ist die Ableitung auf ganz \mathcal{I} positiv. □

B Anhang — Nachweis der Eigenschaften

Der Vollständigkeit halber sollen hier für die fünf hauptsächlich verwendeten Intensitätsfunktionen überprüft werden, dass sie die jeweiligen Bedingungen (A1) bis (A4) für monotone, vergleiche Seite 54, beziehungsweise (A1), (A2'), (A3'), (A4) und (A5) für unimodale Intensitätsfunktionen, vergleiche Seite 77 und 80, erfüllen.

B.1 Poisson-Regression

Lemma B.1

Die Intensitätsfunktion der Poisson-Regression

$$\lambda_{\text{P}}(z) = \exp(z) ,$$

vergleiche Beispiel 2.1, ist eine monotone Intensitätsfunktion und erfüllt die Bedingungen (A1) bis (A4).

Beweis. Die Intensitätsfunktion λ_{P} besitzt die beiden ersten Ableitungen $\lambda'_{\text{P}}(z) = \exp(z)$ und $\lambda''_{\text{P}}(z) = \exp(z)$. Alle drei Funktionen sind offensichtlich positiv auf \mathbb{R} und stetig. Folglich sind (A1) und (A2) erfüllt.

Es ist $u_{\text{P}}(z) = \frac{1}{\lambda_{\text{P}}(z)} = \exp(-z)$ und damit die erste Ableitung $u'_{\text{P}}(z) = -\exp(-z)$ und die zweite Ableitung $u''_{\text{P}}(z) = \exp(-z)$. Da $\exp(z)$ injektiv auf \mathbb{R} ist, gilt dies auch für u''_{P} , sodass (A3) gezeigt ist.

Ferner ist

$$\frac{\lambda'_{\text{P}}(z)}{\lambda_{\text{P}}(z)} = \frac{\exp(z)}{\exp(z)} = 1$$

konstant eins auf \mathbb{R} , also insbesondere nichtwachsend. Somit gilt (A4). □

B.2 Negativ-Binomial-Regression oder Poisson-Gamma-Regression

Lemma B.2

Die Intensitätsfunktion der Negativ-Binomial-Regression beziehungsweise Poisson-Gamma-Regression

$$\lambda_{\text{NB}}(z) = \frac{\exp(z)}{1 + a^{-1} \exp(z)} \quad \text{mit } a > 0 ,$$

vergleiche Beispiel 2.2, ist eine monotone Intensitätsfunktion und erfüllt die Bedingungen (A1) bis (A4).

Beweis. Die beiden ersten Ableitungen der Intensitätsfunktion λ_{NB} lauten

$$\lambda'_{\text{NB}}(z) = \frac{\exp(z)}{(1 + a^{-1} \exp(z))^2} \quad \text{und} \quad \lambda''_{\text{NB}}(z) = \frac{\exp(z) (1 - a^{-1} \exp(z))}{(1 + a^{-1} \exp(z))^3} .$$

Die Zähler und Nenner der beiden Funktionen λ_{NB} und λ'_{NB} sind alle positiv und stetig auf \mathbb{R} . Weiterhin ist der Nenner von λ''_{NB} positiv und stetig und dessen Zähler stetig auf ganz \mathbb{R} . Daraus folgt, dass die Bedingungen (A1) und (A2) gelten.

Da $u_{\text{NB}}(z) = \frac{1}{\lambda_{\text{NB}}(z)} = \frac{1 + a^{-1} \exp(z)}{\exp(z)} = \exp(-z) + a^{-1}$ und die erste Ableitung $u'_{\text{NB}}(z) = -\exp(-z)$ wie im Beweis zu Lemma B.1 ist, folgt direkt (A3).

Da $\exp(z)$ positiv und streng monoton wachsend ist, ist auch $1 + a^{-1} \exp(z)$ positiv und streng monoton wachsend. Damit ist

$$\frac{\lambda'_{\text{NB}}(z)}{\lambda_{\text{NB}}(z)} = \frac{\exp(z) (1 + a^{-1} \exp(z))}{(1 + a^{-1} \exp(z))^2 \exp(z)} = \frac{1}{1 + a^{-1} \exp(z)}$$

streng monoton fallend und es gilt (A4). □

B.3 Logistische Regression

Lemma B.3

Die Intensitätsfunktion der logistischen Regression

$$\lambda_{\text{logit}}(z) = \frac{\exp(z)}{(1 + \exp(z))^2} ,$$

vergleiche Beispiel 2.3, ist eine symmetrische, unimodale Intensitätsfunktion und erfüllt die fünf Bedingungen (A1), (A2'), (A3'), (A4) und (A5) mit $c_\lambda = c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = 0$.

Beweis. Die erste und zweite Ableitung der Intensitätsfunktion λ_{logit} sind

$$\lambda'_{\text{logit}}(z) = \frac{\exp(z)(1 - \exp(z))}{(1 + \exp(z))^3} \quad \text{und} \quad \lambda''_{\text{logit}}(z) = \frac{\exp(z)(1 - 4\exp(z) + \exp(2z))}{(1 + \exp(z))^4}.$$

Da die Zähler und Nenner der drei Funktionen λ_{logit} , λ'_{logit} und λ''_{logit} alle stetig auf \mathbb{R} und die drei Nenner sowie der Zähler von λ_{logit} zusätzlich positiv sind, ist (A1) erfüllt.

Zur Bestimmung der Extremwerte muss die erste Ableitung λ'_{logit} null gesetzt werden. Da $\exp(z)$ und $(1 + \exp(z))^3$ positiv sind, muss dazu $0 = 1 - \exp(z)$ sein. Also ergibt sich als einzige lokale und damit auf ganz \mathbb{R} globale extremwertverdächtige Stelle die 0. Wegen $\lambda''_{\text{logit}}(0) = -\frac{1}{8} < 0$ ist es das einzige Maximum. Es gibt keine weiteren Extremstellen. Folglich ist die Intensitätsfunktion unimodal mit $c_\lambda^{(A2')} = 0$ und (A2') gültig.

Es ist $u_{\text{logit}}(z) = \frac{(1 + \exp(z))^2}{\exp(z)} = \exp(z) + 2 + \exp(-z)$ und dessen erste drei Ableitungen $u'_{\text{logit}}(z) = \exp(z) - \exp(-z)$ und $u''_{\text{logit}}(z) = \exp(z) + \exp(-z)$ und $u'''_{\text{logit}}(z) = \exp(z) - \exp(-z)$. u''_{logit} ist stetig. Es ist $\exp(z) > 1$ für $z > 0$, $0 < \exp(z) < 1$ für $z < 0$ und $\exp(z) = 1$ für $z = 0$. Damit ist $u'''_{\text{logit}}(z) = \exp(z) - \exp(-z) < 0$ für $z < 0$, $u'''_{\text{logit}}(z) > 0$ für $z > 0$ und $u'''_{\text{logit}}(0) = 0$. Folglich ist u''_{logit} streng monoton fallend auf $(-\infty, 0]$ und streng monoton wachsend auf $[0, \infty)$. Mit der Stetigkeit von u''_{logit} folgt jeweils die Injektivität auf $(-\infty, 0]$ und $[0, \infty)$. Folglich gilt (A3') mit $c_\lambda^{(A3')} = 0$.

Für (A4) wird

$$\frac{\lambda'_{\text{logit}}(z)}{\lambda_{\text{logit}}(z)} = \frac{\exp(z)(1 - \exp(z))(1 + \exp(z))^2}{(1 + \exp(z))^3 \exp(z)} = \frac{1 - \exp(z)}{1 + \exp(z)} \quad \text{und}$$

$$\left(\frac{\lambda'_{\text{logit}}}{\lambda_{\text{logit}}}\right)'(z) = -2 \cdot \frac{\exp(z)}{(1 + \exp(z))^2} = -2 \cdot \lambda_{\text{logit}}(z)$$

betrachtet. Wegen (A1) ist die Ableitung negativ, sodass $\frac{\lambda'_{\text{logit}}}{\lambda_{\text{logit}}}$ streng monoton fallend, also insbesondere nichtwachsend, ist.

In Kombination mit (A1) ist (A5) äquivalent zu $\lim_{z \rightarrow \infty} z^2 \lambda(z) = 0$, vergleiche (5.1). Es ist

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \infty} z^2 \lambda_{\text{logit}}(z) &= \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z^2 \exp(z)}{(1 + \exp(z))^2} \stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2z \exp(z) + z^2 \exp(z)}{2(1 + \exp(z)) \exp(z)} = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2z + z^2}{2(1 + \exp(z))} \\ &\stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2 + 2z}{2 \exp(z)} = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1 + z}{\exp(z)} \stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\exp(z)} = 0. \end{aligned}$$

An den mit (*) gekennzeichneten Umformungen fand die Regel von de l'Hospital Anwendung. Hierbei ist zu erwähnen, dass $z^2 \exp(z)$, $(1 + \exp(z))^2$, $2z + z^2$, $2(1 + \exp(z))$, $1 + z$ und $\exp(z)$ für $z \rightarrow \infty$ nach ∞ divergieren.

Die Symmetrie um $c_\lambda = 0$ ist in

$$\lambda_{\text{logit}}(z) = \frac{\exp(z)}{(1 + \exp(z))^2} = \frac{\exp(z)}{(\exp(z))^2 (\exp(-z) + 1)^2} = \frac{\exp(-z)}{(1 + \exp(-z))^2} = \lambda_{\text{logit}}(-z)$$

ersichtlich. □

B.4 Probit-Modell

Lemma B.4

Die Intensitätsfunktion im Probit-Modell

$$\lambda_{\text{probit}}(z) = \frac{\phi(z)^2}{\Phi(z)(1 - \Phi(z))},$$

vergleiche Beispiel 2.4, ist eine symmetrische, unimodale Intensitätsfunktion und erfüllt die fünf Bedingungen (A1), (A2'), (A3'), (A4) und (A5) mit $c_\lambda = c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = 0$.

Bevor der Beweis dieses Lemmas, siehe Seite 140, beginnen kann, werden noch einige Hilfsresultate benötigt. Die nachfolgenden beiden Lemmata B.5 und B.9 entspringen größtenteils eins zu eins der Publikation von Graßhoff et al. (2021, Lemma A.1 und Lemma A.2), wobei Lemma B.5 um die Ungleichung (B.2) ergänzt wurde. Der Vollständigkeit halber sollen sie aber alle hier nochmals ausführlich aufgeführt werden.

Lemma B.5 (vergleiche Graßhoff et al. (2021, Lemma A.1))

Es ist

$$1 - \Phi(z) \geq \left(1 - \frac{z^2 + 7}{8z^2 + 12}\right) \frac{1}{z} \phi(z) > 0 \quad \text{für } z \geq 1 \quad \text{und} \quad (\text{B.1})$$

$$1 - \Phi(z) \geq \frac{2}{z + \sqrt{z^2 + 4}} \phi(z) \quad \text{für } z \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad (\text{B.2})$$

$$\Phi(z) - \frac{1}{2} \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(z - \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{40}z^5\right) \quad \text{für } 0 \leq z \leq 1. \quad (\text{B.3})$$

Beweis. Sei $\tau(z) = \left(1 - \frac{z^2+7}{8z^2+12}\right) \frac{1}{z} \phi(z)$. Dann gilt für dessen Ableitung

$$-\tau'(z) = \left(1 - \frac{2z^6 + 3z^4 + 12z^2 - 15}{z^2(4z^2 + 6)^2}\right) \phi(z) \leq \phi(z) \quad \text{für } z \geq 1.$$

Hierbei ist zu erwähnen, dass sowohl der Nenner $z^2(4z^2 + 6)^2$ als Quadrat als auch der Zähler $2z^6 + 3z^4 + 12z^2 - 15$ für $z \geq 1$ positiv sind. Denn das Zählerpolynom hat nur eine (reellwertige) extremwertverdächtige Stelle in $z = 0$, die ein lokales Minimum mit Wert -15 ist, ist stetig und hat in 1 den positiven Wert 2. Unter Ausnutzung der Monotonie des Integrals und des Hauptsatzes der Differential- und Integralrechnung folgt

$$1 - \Phi(z) = \int_z^\infty \phi(t) dt \geq \int_z^\infty -\tau'(t) dt = -\lim_{t \rightarrow \infty} \tau(t) + \tau(z) = \tau(z)$$

mit $\lim_{t \rightarrow \infty} \tau(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{t^2+7}{8t^2+12}\right) \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \phi(t) = \frac{7}{8} \cdot 0 \cdot 0 = 0$. Da

$$1 - \frac{z^2 + 7}{8z^2 + 12} > 0 \quad \Leftrightarrow \quad 7z^2 + 5 > 0 \quad \Leftrightarrow \quad z^2 > -\frac{5}{7}$$

für $z \geq 1$ und auch $z^{-1} > 0$ sowie $\phi(z) > 0$ ist, ist $\left(1 - \frac{z^2+7}{8z^2+12}\right) \frac{1}{z} \phi(z) > 0$. Somit sind beide Teile von (B.1) gezeigt.

Analog zum Beweis für die Ungleichung (B.1) lässt sich die Ungleichung (B.2) zeigen. Sei dazu hier $\tau(z) = \frac{2}{z + \sqrt{z^2+4}} \phi(z)$ und damit

$$-\tau'(z) = 2 \left(1 - \frac{z^2 + 3}{z\sqrt{z^2 + 4} + z^2 + 4}\right) \phi(z) \leq \phi(z) \quad \text{für alle } z \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.4})$$

Dabei ist der Nenner $z\sqrt{z^2+4} + z^2 + 4$ positiv. Angenommen er wäre nichtpositiv, dann ließe er sich umformen zu

$$z^2 + 4 \leq -z\sqrt{z^2+4} \quad \Rightarrow \quad z^4 + 8z^2 + 16 \leq z^4 + 4z^2 \quad \Rightarrow \quad 4z^2 + 16 \leq 0,$$

ein Widerspruch. Damit lässt sich dann herleiten

$$\begin{aligned} \frac{z^2+3}{z\sqrt{z^2+4} + z^2 + 4} \geq \frac{1}{2} &\Leftrightarrow 2z^2 + 6 \geq z\sqrt{z^2+4} + z^2 + 4 \Leftrightarrow z^2 + 2 \geq z\sqrt{z^2+4} \\ &\Leftrightarrow \begin{cases} z \geq 0 : z^4 + 4z^2 + 4 \geq z^4 + 4z^2 &\Leftrightarrow 4 \geq 0 \\ z < 0 : z^2 + 2 \geq z\sqrt{z^2+4} \end{cases}, \end{aligned}$$

sodass $2 \left(1 - \frac{z^2+3}{z\sqrt{z^2+4} + z^2 + 4}\right) \leq 1$ ist und die Ungleichung in (B.4) gilt. Wiederum lässt sich unter Ausnutzung der Monotonie des Integrals und des Hauptsatzes der Differential- und Integralrechnung

$$1 - \Phi(z) = \int_z^\infty \phi(t) dt \geq \int_z^\infty -\tau'(t) dt = -\lim_{t \rightarrow \infty} \tau(t) + \tau(z) = \tau(z)$$

mit $\lim_{t \rightarrow \infty} \tau(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2}{t + \sqrt{t^2+4}} \cdot \lim_{t \rightarrow \infty} \phi(t) = 0 \cdot 0 = 0$ folgern. Damit gilt (B.2).

Die Ungleichung (B.3) folgt direkt aus der Taylor-Reihenentwicklung an der Stelle $z = 0$ bis zum fünften Glied. Die Koeffizienten der geraden Glieder sind null und die der ungeraden Glieder sind abwechseln positiv und negativ, wobei sie betragsmäßig kleiner werden. \square

Bemerkung B.6

Auf anderer Art und Weise wird die Ungleichung (B.2) in Birnbaum (1942) mittels der Jensen'schen Ungleichung gezeigt.

Der zweite Teil des folgenden Lemmas inklusive Beweis entstammt Marshall und Olkin (2007, Seite 437, Lemma B.4). Er bezieht sich auf die sogenannte Ausfallrate beziehungsweise Hazardrate $\frac{\phi}{1-\Phi}$.

Lemma B.7

Die Funktionen

$$\frac{\phi(z)}{\Phi(z)} \quad \text{und} \quad \frac{\phi(z)}{1 - \Phi(z)}$$

sind log-konkav.

Beweis. Bezeichne $\varrho(z) = \frac{\phi(z)}{1 - \Phi(z)}$ die Ausfallrate. Zum Nachweis der log-Konkavität muss die zweite Ableitung von $\log(\varrho(z))$ untersucht werden. Dabei ist

$$0 \geq (\log(\varrho(z)))'' = \frac{\varrho''(z)\varrho(z) - \varrho'(z)^2}{\varrho(z)^2} \Leftrightarrow \varrho''(z)\varrho(z) \leq \varrho'(z)^2 .$$

Ebenso lässt sich aus der ersten Ableitung der logarithmierten Ausfallrate der Standard-Normalverteilung mit $\phi'(z) = -z\phi(z)$

$$\frac{\varrho'(z)}{\varrho(z)} = (\log(\varrho(z)))' = -\frac{z\phi(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi(z)}{1 - \Phi(z)} = -z + \varrho(z)$$

und damit $\varrho'(z) = \varrho(z)(\varrho(z) - z)$ herleiten. Daraus ergibt sich als zweite Ableitung der Ausfallrate

$$\varrho''(z) = \varrho'(z)(\varrho(z) - z) + \varrho(z)(\varrho'(z) - 1) = 2\varrho(z)\varrho'(z) - z\varrho'(z) - \varrho(z)$$

und durch erneutes Einsetzen von $\varrho'(z) = \varrho(z)(\varrho(z) - z)$ weiter

$$\varrho''(z) = \varrho(z) (2\varrho(z)^2 - 3z\varrho(z) + z^2 - 1) .$$

Dies in die Bedingung $\varrho''(z)\varrho(z) \leq \varrho'(z)^2$ eingesetzt führt zu

$$\begin{aligned} \varrho(z)^2 (2\varrho(z)^2 - 3z\varrho(z) + z^2 - 1) &\leq \varrho(z)^2 (\varrho(z)^2 - 2z\varrho(z) + z^2) \\ \Leftrightarrow \varrho(z)^2 - z\varrho(z) - 1 &\leq 0 . \end{aligned}$$

Die beiden Nullstellen der nach oben offenen Parabel $\varrho(z)^2 - z\varrho(z) - 1$ bezüglich $\varrho(z)$ sind

$$\frac{z}{2} \pm \sqrt{\frac{z^2}{4} + 1} = \frac{z \pm \sqrt{z^2 + 4}}{2} .$$

Da die Ausfallrate der Standard-Normalverteilung immer positiv ist, ist die negative Nullstelle $\frac{z - \sqrt{z^2 + 4}}{2}$ nicht möglich. Mit $\varrho(z)^2 - z\varrho(z) - 1 \leq 0$ muss dann

$$\varrho(z) \leq \frac{z + \sqrt{z^2 + 4}}{2}$$

sein. Da $z + \sqrt{z^2 + 4}$ positiv ist, gilt diese Ungleichung nach (B.2) für alle $z \in \mathbb{R}$. Damit ist ϱ log-konkav.

Nun muss noch die log-Konkavität von $\frac{\phi(z)}{\Phi(z)}$ gezeigt werden. Dabei ist $\varrho(-z) = \frac{\phi(-z)}{1-\Phi(-z)} = \frac{\phi(z)}{\Phi(z)}$. Da ϱ log-konkav ist, gilt

$$0 \geq (\log(\varrho(z)))'' = \frac{\varrho''(z)\varrho(z) - \varrho'(z)^2}{\varrho(z)^2} \quad \text{für } z \in \mathbb{R} .$$

Aufgrund der Gültigkeit der Ungleichung für alle $z \in \mathbb{R}$ muss auch

$$(\log(\varrho(-z)))'' = \frac{\varrho''(-z)\varrho(-z) - \varrho'(-z)^2}{\varrho(-z)^2}$$

nichtpositiv für alle $z \in \mathbb{R}$ sein. Damit ist auch $\varrho(-z) = \frac{\phi(z)}{\Phi(z)}$ log-konkav. \square

Bemerkung B.8

Auch die Funktionen ϕ , Φ und $1 - \Phi$ sind log-konkav. Dies soll hier aber nicht bewiesen werden. Vergleiche dazu beispielsweise Boyd und Vandenberghe (2009, Abschnitt 3.5.1).

Lemma B.9 (vergleiche Graßhoff et al. (2021, Lemma A.2))

Sei

$$u_{\text{probit}}(z) = \frac{\Phi(z)(1 - \Phi(z))}{\phi(z)^2} .$$

Die dritte Ableitung u_{probit}''' erfüllt $u_{\text{probit}}'''(z) > 0$ für alle $z > 0$.

Beweis. Die ersten drei Ableitungen von u_{probit} sind

$$\begin{aligned} u_{\text{probit}}'(z) &= 2z \frac{\Phi(z)(1 - \Phi(z))}{\phi(z)^2} - 2 \frac{\Phi(z) - \frac{1}{2}}{\phi(z)} , \\ u_{\text{probit}}''(z) &= (4z^2 + 2) \frac{\Phi(z)(1 - \Phi(z))}{\phi(z)^2} - 6z \frac{\Phi(z) - \frac{1}{2}}{\phi(z)} - 2 , \\ u_{\text{probit}}'''(z) &= (8z^3 + 12z) \frac{\Phi(z)(1 - \Phi(z))}{\phi(z)^2} - (14z^2 + 10) \frac{\Phi(z) - \frac{1}{2}}{\phi(z)} - 6z . \end{aligned}$$

Damit ist $u_{\text{probit}}'''(0) = 0$ und

$$\begin{aligned} \phi(z)^2 u_{\text{probit}}'''(z) &= 2z^3 + 3z - (8z^3 + 12z) (\Phi(z) - \frac{1}{2})^2 \\ &\quad - (14z^2 + 10) (\Phi(z) - \frac{1}{2}) \phi(z) - 6z \phi(z)^2 . \end{aligned} \tag{B.5}$$

Für $0 < z \leq 1$ folgt mit $0 < \Phi(z) - \frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{120}z^8 + \frac{1}{1600}z^{10} \leq 0$ aus (B.3)

$$\begin{aligned} (\Phi(z) - \frac{1}{2})^2 &\leq \frac{1}{2\pi} \left(z - \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{40}z^5 \right)^2 = \frac{1}{2\pi} \left(z^2 - \frac{1}{3}z^4 + \frac{7}{90}z^6 - \frac{1}{120}z^8 + \frac{1}{1600}z^{10} \right) \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \left(z^2 - \frac{1}{3}z^4 + \frac{7}{90}z^6 \right) . \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Die aus der Taylor-Reihenentwicklung herleitbare Ungleichung $\exp(-t) \leq 1 - t + \frac{1}{2}t^2$ für $0 \leq t \leq 1$ angewendet auf $t = z^2$ und $t = \frac{1}{2}z^2$ ergibt $\exp(-z^2) \leq 1 - z^2 + \frac{1}{2}z^4$ und $\exp(-\frac{1}{2}z^2) \leq 1 - \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{8}z^4$. Damit und mit (B.3) sowie (B.6) folgt aus (B.5)

$$\begin{aligned} 2\pi \phi(z)^2 u'''_{\text{probit}}(z) &\geq 4\pi z^3 + 6\pi z - (8z^3 + 12z) \left(z^2 - \frac{1}{3}z^4 + \frac{7}{90}z^6 \right) \\ &\quad - (14z^2 + 10) \left(z - \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{40}z^5 \right) \left(1 - \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{8}z^4 \right) - 6z \left(1 - z^2 + \frac{1}{2}z^4 \right) \\ &= (6\pi - 16)z + \left(4\pi - \frac{40}{3} \right) z^3 - \frac{6}{5}z^7 - \frac{269}{1440}z^9 - \frac{7}{160}z^{11} \\ &\geq 2.8z - 0.8z^3 - 1.2z^7 - 0.2z^9 - 0.1z^{11} \geq 0.5z > 0 . \end{aligned}$$

Die Gleichung (B.5) lässt sich für $z > 1$ äquivalent umformen zu

$$\begin{aligned} \frac{\phi(z)^2 u'''_{\text{probit}}(z)}{2z^3 + 3z} &= 1 - \left(1 - 2 \left((1 - \Phi(z)) - \left(1 - \frac{z^2 + 7}{8z^2 + 12} \right) \frac{1}{z} \phi(z) \right) \right)^2 \\ &\quad + \frac{(z^2 - 1)^2 + 24}{(4z^2 + 6)^2 z^2} \phi(z)^2 . \end{aligned}$$

Aus (B.1) folgt, dass $1 > (1 - \Phi(z)) - \left(1 - \frac{z^2 + 7}{8z^2 + 12} \right) \frac{1}{z} \phi(z) \geq 0$ ist. Daraus resultiert weiter $1 \geq 1 - 2 \left((1 - \Phi(z)) - \left(1 - \frac{z^2 + 7}{8z^2 + 12} \right) \frac{1}{z} \phi(z) \right) > -1$ und, dass dessen Quadrat in $[0, 1]$ liegt. Damit ist $1 - \left(1 - 2 \left((1 - \Phi(z)) - \left(1 - \frac{z^2 + 7}{8z^2 + 12} \right) \frac{1}{z} \phi(z) \right) \right)^2$ nichtnegativ. Da offensichtlich $\frac{(z^2 - 1)^2 + 24}{(4z^2 + 6)^2 z^2} \phi(z)^2$ positiv ist, muss auch $\frac{\phi(z)^2 u'''_{\text{probit}}(z)}{2z^3 + 3z}$ und damit u'''_{probit} für $z > 1$ positiv sein. Folglich ist die dritte Ableitung u'''_{probit} positiv für alle $z > 0$. \square

Beweis von Lemma B.4. Die Dichtefunktion der Standard-Normalverteilung $\phi : \mathbb{R} \rightarrow (0, \infty)$ mit $\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{1}{2}z^2)$ ist zweifach stetig differenzierbar und positiv auf \mathbb{R} . Die zugehörige Verteilungsfunktion $\Phi : \mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$ mit $\Phi(z) = \int_{(-\infty, z]} \phi(t) dt$ ist ebenfalls zweifach stetig differenzierbar, positiv auf \mathbb{R} und nimmt zusätzlich nur Werte in $(0, 1)$ an. Damit ist auch $1 - \Phi$ zweifach stetig differenzierbar, positiv auf \mathbb{R} und nimmt ebenfalls nur Werte in $(0, 1)$ an. Als Produkt und Quotient dieser Funktionen ist auch λ_{probit} positiv auf \mathbb{R} und zweifach stetig differenzierbar. Somit ist (A1) erfüllt.

Die Funktionen $\frac{\phi}{\Phi}$ und $\frac{\phi}{1-\Phi}$ sind nach Lemma B.7 log-konkav. Da das (punktweise) Produkt zweier log-konkaver Funktionen wieder log-konkav ist, vergleiche Boyd und Vandenberghe (2009, Abschnitt 3.5.2), ist die Intensitätsfunktion λ_{probit} log-konkav. Damit gilt (A4).

Zur Bestimmung der Unimodalität der Intensitätsfunktion müssen die Extremstellen bestimmt werden. Da λ_{probit} positiv auf \mathbb{R} ist, kann dies auch mittels Betrachtungen der logarithmierten Intensitätsfunktion $\log(\lambda_{\text{probit}}(z)) = 2 \log(\phi(z)) - \log(\Phi(z)) - \log(1 - \Phi(z))$ erfolgen, deren erste Ableitung

$$(\log(\lambda_{\text{probit}}(z)))' = 2 \cdot \frac{-z\phi(z)}{\phi(z)} - \frac{\phi(z)}{\Phi(z)} - \frac{-\phi(z)}{1-\Phi(z)} = -2z - \frac{\phi(z)}{\Phi(z)} + \frac{\phi(z)}{1-\Phi(z)}$$

ist. Hierbei wurde $\phi'(z) = -z\phi(z)$ verwendet. Null ist eine extremwertverdächtige Stelle, da $-2 \cdot 0 - \frac{\phi(0)}{\Phi(0)} + \frac{\phi(0)}{1-\Phi(0)} = 0 - \frac{\phi(0)}{0.5} + \frac{\phi(0)}{0.5} = 0$ ist. Mittels der zweiten Ableitung

$$(\log(\lambda_{\text{probit}}(z)))'' = -2 - \frac{-z\phi(z)\Phi(z) - \phi(z)^2}{\Phi(z)^2} + \frac{-z\phi(z)(1-\Phi(z)) + \phi(z)^2}{(1-\Phi(z))^2}$$

lässt sich durch $-2 - \frac{-0 \cdot \phi(0)\Phi(0) - \phi(0)^2}{\Phi(0)^2} + \frac{-0 \cdot \phi(0)(1-\Phi(0)) + \phi(0)^2}{(1-\Phi(0))^2} = -2 + \frac{\phi(0)^2}{\Phi(0)^2} + \frac{\phi(0)^2}{(1-\Phi(0))^2} = -2 + 2 \cdot \frac{\phi(0)^2}{0.5^2} = -2 + \frac{4}{\pi} \approx -0.73 < 0$ diese Stelle als lokales Maximum identifizieren. Da λ_{probit} log-konkav ist, also $(\log(\lambda_{\text{probit}}(z)))'' \leq 0$ für alle $z \in \mathbb{R}$ gilt, ist $(\log(\lambda_{\text{probit}}(z)))'$ monoton fallend. Somit kann es keine zweite extremwertverdächtige Stelle geben, für die $(\log(\lambda_{\text{probit}}(z)))' = 0$ ist. Aufgrund der Stetigkeit von $\log(\lambda_{\text{probit}}(z))$ beziehungsweise λ_{probit} und nur einer lokalen Extremstelle, dem lokalen Maximum in null, erfüllt λ_{probit} die Bedingung (A2') mit $c_{\lambda}^{(A2')} = 0$.

Es ist $u_{\text{probit}}(z) = \frac{\Phi(z)(1-\Phi(z))}{\phi(z)^2}$ (mindestens) dreifach stetig differenzierbar. Nach Lemma B.9 ist $u_{\text{probit}}'''(z) > 0$ für alle $z > 0$. Mit $(u_{\text{probit}}(-z))''' = -u_{\text{probit}}'''(z)$ ist folglich $u_{\text{probit}}'''(z) < 0$ für alle $z < 0$. Damit ist u_{probit}'' streng monoton wachsend auf $(0, \infty)$ beziehungsweise $[0, \infty)$ und streng monoton fallend auf $(-\infty, 0)$ beziehungsweise $(-\infty, 0]$. Da u_{probit}'' stetig ist, folgt jeweils die Injektivität auf $(-\infty, 0]$ und $[0, \infty)$. Damit gilt (A3') mit $c_{\lambda}^{(A3')} = 0$.

In Kombination mit (A1) ist (A5) äquivalent zu $\lim_{z \rightarrow \infty} z^2 \lambda(z) = 0$, vergleiche (5.1). Es ist

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \infty} z^2 \lambda_{\text{probit}}(z) &= \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z^2 \phi(z)^2}{\Phi(z)(1-\Phi(z))} = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\Phi(z)} \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z^2 \phi(z)^2}{1-\Phi(z)} = 1 \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z^2 \phi(z)^2}{1-\Phi(z)} \\ &\stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2z \phi(z)^2 - z^3 \cdot 2\phi(z)^2}{-\phi(z)} = 2 \lim_{z \rightarrow \infty} (z^3 - z) \phi(z) = 0. \end{aligned}$$

Hier wurde $\lim_{z \rightarrow \infty} \Phi(z) = 1$ genutzt und an der mit (*) gekennzeichneten Umformung die Regel von de l'Hospital unter Ausnutzung von $\phi'(z) = -z\phi(z)$ angewendet, da sowohl Zähler als auch Nenner gegen null konvergieren, denn $\lim_{z \rightarrow \infty} z\phi(z) = 0$ und $\lim_{z \rightarrow \infty} (1 - \Phi(z)) = 0$. Dass der Zähler tatsächlich gegen null geht, lässt sich ebenfalls mit der Regel von de l'Hospital nachweisen.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z\phi(z) = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z}{\phi(z)^{-1}} \stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{-\phi(z)^{-2} \cdot (-z)\phi(z)} = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{\phi(z)}{z} = \lim_{z \rightarrow \infty} \phi(z) \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z} = 0$$

Analog lässt sich auch $\lim_{z \rightarrow \infty} z^3\phi(z) = 0$ herleiten. Damit gilt (A5).

Aus der Symmetrie von ϕ , das heißt, $\phi(-z) = \phi(z)$ für alle $z \in \mathbb{R}$, und der Eigenschaft $\Phi(-z) = 1 - \Phi(z)$ für $z \in \mathbb{R}$ folgt

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{probit}}(-z) &= \frac{\phi(-z)^2}{\Phi(-z)(1 - \Phi(-z))} \\ &= \frac{\phi(z)^2}{(1 - \Phi(z))(1 - (1 - \Phi(z)))} = \frac{\phi(z)^2}{(1 - \Phi(z))\Phi(z)} = \lambda_{\text{probit}}(z), \end{aligned}$$

also die Symmetrie von λ_{probit} um $c_\lambda = c_\lambda^{(A2')} = c_\lambda^{(A3')} = 0$. □

B.5 Komplementäres log-log-Modell

Lemma B.10

Die Intensitätsfunktion des komplementären log-log-Modells

$$\lambda_{\text{comp log log}}(z) = \frac{\exp(2z)}{\exp(\exp(z)) - 1},$$

vergleiche Beispiel 2.5, ist eine unimodale Intensitätsfunktion und erfüllt die fünf Bedingungen (A1), (A2') mit $c_\lambda^{(A2')} \approx 0.466011$, (A3') mit $c_\lambda^{(A3')} \approx 0.049084$, (A4) und (A5).

Bemerkung B.11

Aufgrund der unterschiedlichen Lage von Modus $c_\lambda^{(A2')} \approx 0.466011$ und Schwellenwert $c_\lambda^{(A3')} \approx 0.049084$ kann die Intensitätsfunktion des komplementären log-log-Modells nicht symmetrisch sein, vergleiche Definition 5.8.

Beweis von Lemma B.10. Die ersten beiden Ableitungen der Intensitätsfunktion sind

$$\lambda'_{\text{comp log log}}(z) = \frac{e^{2z} (-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2)}{(e^{e^z} - 1)^2} \quad \text{und}$$

$$\lambda''_{\text{comp log log}}(z) = \frac{e^{2z} \left((-2e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2) (-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2) - e^{e^z} e^z (e^{e^z} - 1) (e^z - 1) \right)}{(e^{e^z} - 1)^3}.$$

(Hier sei kurz angemerkt, dass $\lambda''_{\text{comp log log}}$ für spätere Betrachtungen nicht vollständig vereinfacht worden ist.) Die Zähler und Nenner der drei Funktionen $\lambda_{\text{comp log log}}$, $\lambda'_{\text{comp log log}}$ und $\lambda''_{\text{comp log log}}$ sind stetig auf \mathbb{R} . Da für $z \in \mathbb{R}$ die Funktionen e^{2z} und e^z positiv und damit folglich $e^{e^z} > 1$ und $e^{e^z} - 1 > 0$ sind, sind auch die drei Nenner sowie der Zähler von $\lambda_{\text{comp log log}}$ positiv. Damit ist (A1) erfüllt.

Zur Bestimmung der lokalen Extrema wird die erste Ableitung $\lambda'_{\text{comp log log}}$ null gesetzt. Da e^{2z} und $e^{e^z} - 1$ auf ganz \mathbb{R} positiv sind, ist nur $-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2 = 0$ zu lösen. Numerisch ergibt sich hier eine Lösung von rund 0.466011. Zum Nachweis, dass dies ein lokales Maximum ist, wird hier erst $-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2 = 0$ und dann daraus folgend $-e^{e^z} e^z = -2(e^{e^z} - 1)$ in die zweite Ableitung $\lambda''_{\text{comp log log}}$ eingesetzt:

$$\frac{e^{2z} \left((-2e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2) (-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2) - e^{e^z} e^z (e^{e^z} - 1) (e^z - 1) \right)}{(e^{e^z} - 1)^3}$$

$$= \frac{e^{2z} \left(-e^{e^z} e^z (e^{e^z} - 1) (e^z - 1) \right)}{(e^{e^z} - 1)^3} = \frac{e^{2z} \left(-2(e^{e^z} - 1) (e^{e^z} - 1) (e^z - 1) \right)}{(e^{e^z} - 1)^3} = \frac{-2e^{2z} (e^z - 1)}{e^{e^z} - 1}.$$

Da wiederum e^{2z} und $e^{e^z} - 1$ auf \mathbb{R} positiv sind und $e^z - 1$ positiv für alle $z > 0$ ist, ist die zweite Ableitung für alle positiven extremwertverdächtigen Stellen negativ. Somit muss bei rund 0.466011 ein lokales Maximum liegen. Zur Prüfung, ob dies auch die einzige extremwertverdächtige Stelle, also einzige Lösung von $-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2 = 0$ ist, bietet sich eine Vereinfachung der linken Seite der Gleichung durch Substitution der streng monoton wachsenden sowie stetigen und damit bijektiven Funktion e^z durch t zur Funktion $h_1 : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ mit $h_1(t) = -e^t t + 2e^t - 2$. Die erste Ableitung dieser Funktion ist $h'_1(t) = -e^t t + e^t = e^t(1 - t)$. Damit ergibt sich beim Nullsetzen als einzige potentielle Extremstelle die 1. Die zweite Ableitung $h''_1(t) = -e^t t$ liefert wegen $h''_1(1) = -e < 0$, dass ein lokales Maximum in 1 vorliegt. Da $h_1(1) = e - 2 > 0$ ist, kann h_1 stetig fortgesetzt auf ganz \mathbb{R} maximal zwei Nullstellen besitzen. Eine dieser Nullstellen lässt sich numerisch zu rund 1.593624 bestimmen. Die zweite Nullstelle ist 0, welche aber außerhalb des eigentlichen Definitionsbereiches liegt. Somit ist rund $\log(1.593624) \approx 0.466011$ die

einzig Nullstelle von $-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2$. Folglich ist die Intensitätsfunktion unimodal mit Modus $c_\lambda^{(A2')} \approx 0.466011$ und damit gilt (A2').

Es ist $u_{\text{comp log log}}(z) = e^{e^z} e^{-2z} - e^{-2z}$. Diese Funktion zweimal differenziert ergibt

$$\begin{aligned} u'_{\text{comp log log}}(z) &= e^{e^z} e^{-z} - 2e^{e^z} e^{-2z} + 2e^{-2z} \\ u''_{\text{comp log log}}(z) &= e^{e^z} - 3e^{e^z} e^{-z} + 4e^{e^z} e^{-2z} - 4e^{-2z} \end{aligned}$$

Auch hier bietet es sich an, nicht $u''_{\text{comp log log}}$ auf zweigeteilte Injektivität zu prüfen, sondern die stetige Funktion $h_2 : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ mit $h_2(t) = e^t - 3e^t t^{-1} + 4e^t t^{-2} - 4t^{-2}$ zu betrachten, welche wiederum durch Substitution von e^z durch t entsteht. Diese Ersetzung verändert nicht die Stetigkeit und auch nicht das Monotonieverhalten. Die stetige Funktion h_2 hat nur ein lokales und damit globales Minimum in rund 1.050309 und ist links und rechts davon streng monoton fallend beziehungsweise streng monoton wachsend, also jeweils injektiv, denn die erste Ableitung $h'_2(t) = e^t - 3e^t t^{-1} + 7e^t t^{-2} - 8e^t t^{-3} + 8t^{-3}$ hat dort eine numerisch bestimmbare Nullstelle. Es gibt aber nur diese Nullstelle, da h'_2 streng monoton wachsend ist, denn h''_2 ist positiv auf $(0, \infty)$. Dies soll kurz gezeigt werden.

Mittels Taylor-Reihenentwicklung von e^{-t} in 0 bis zum Grad 4, siehe beispielsweise Walter (2004, Abschnitt 10.15), lässt sich die Ungleichung $e^{-t} \leq 1 - t + \frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{6} + \frac{t^4}{24}$ herleiten. Gleichzeitig ist $t((t-1)^2 + 1) > 0$ für alle $t > 0$. Dies lässt sich äquivalent umformen zu $t^4 - 3t^3 + 10t^2 - 22t + 24 > 24 - 24t + 12t^2 - 4t^3 + t^4$ für alle $t > 0$. Beides zusammen ergibt

$$t^4 - 3t^3 + 10t^2 - 22t + 24 > 24 \cdot \left(1 - t + \frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{6} + \frac{t^4}{24}\right) \geq 24e^{-t},$$

also $t^4 - 3t^3 + 10t^2 - 22t + 24 > 24e^{-t}$. Dies umgeformt führt dazu, dass für $t > 0$ die zweite Ableitung $h''_2(t) = e^t - 3e^t t^{-1} + 10e^t t^{-2} - 22e^t t^{-3} + 24e^t t^{-4} - 24t^{-4}$ positiv ist. Folglich gilt (A3') mit $c_\lambda^{(A3')} \approx \log(1.050309) \approx 0.049084$.

Für die Bedingung (A4) soll

$$\frac{\lambda'_{\text{comp log log}}(z)}{\lambda_{\text{comp log log}}(z)} = \frac{-e^{e^z} e^z + 2e^{e^z} - 2}{e^{e^z} - 1} = -\frac{e^{e^z} e^z}{e^{e^z} - 1} + 2$$

nichtwachsend sein. Dies lässt sich zeigen, sofern die erste Ableitung

$$\left(\frac{\lambda'_{\text{comp log log}}}{\lambda_{\text{comp log log}}}\right)'(z) = \frac{e^{e^z} e^z}{(e^{e^z} - 1)^2} \cdot (e^z + 1 - e^{e^z}) \leq 0 \quad \text{für alle } z \in \mathbb{R}$$

ist. Wie bereits hier mehrfach ausgenutzt ist e^{e^z} , e^z und $e^{e^z} - 1$ immer positiv. Da

$$(e^z + 1 - e^{e^z})'(z) = -e^z (e^{e^z} - 1) < 0 \quad \text{für alle } z \in \mathbb{R}$$

ist, hat $e^z + 1 - e^{e^z}$ kein lokales Extremum. Das Verhalten dieser Funktion im Unendlichen ist $\lim_{z \rightarrow -\infty} e^z + 1 - e^{e^z} = 0 + 1 - e^0 = 0$ und $\lim_{z \rightarrow \infty} e^z + 1 - e^{e^z} = -\infty$. Letzteres folgt direkt aus

$$\lim_{z \rightarrow \infty} e^{e^z + 1 - e^{e^z}} = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{e^{e^z} e^{(*)}}{e^{e^{e^z}}} \stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{e^{e^z} e^z e}{e^{e^{e^z}} e^{e^z} e^z} = \lim_{z \rightarrow \infty} e^{-e^{e^z} + 1} = 0 \quad (\searrow 0)$$

unter Zuhilfenahme der Regel von de l'Hospital an der mit (*) gekennzeichneten Stelle. Aufgrund des Verhaltens im Unendlichen und dem Nichtvorhandensein von Extremstellen, muss der stetige Term $e^z + 1 - e^{e^z}$ auf ganz \mathbb{R} negativ sein. Und damit ist $\frac{\lambda_{\text{comp log log}}}{\lambda_{\text{comp log log}}}$ nichtwachsend und folglich (A4) erfüllt.

Es ist

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \infty} z^2 \lambda_{\text{comp log log}}(z) &= \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z^2 e^{2z}}{e^{e^z} - 1} \stackrel{(*)}{=} \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2z e^{2z} + 2z^2 e^{2z}}{e^{e^z} e^z} = 2 \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{(z + z^2) e^z}{e^{e^z}} \\ &\stackrel{(*)}{=} 2 \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{(1 + 2z) e^z + (z + z^2) e^z}{e^{e^z} e^z} = 2 \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1 + 3z + z^2}{e^{e^z}} \\ &\stackrel{(*)}{=} 2 \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{3 + 2z}{e^{e^z} e^z} \stackrel{(*)}{=} 2 \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2}{e^{e^z} e^z (e^z + 1)} = 0. \end{aligned}$$

Die Regel von de l'Hospital wurde an den mit (*) gekennzeichneten Umformungen angewendet. Dabei divergieren $z^2 e^{2z}$, $e^{e^z} - 1$, $(z + z^2) e^z$, e^{e^z} , $1 + 3z + z^2$, $3 + 2z$, $e^{e^z} e^z$ und $e^{e^z} e^z (e^z + 1)$ für $z \rightarrow \infty$ nach ∞ . Damit ist in Verbindung mit (A1) die Bedingung (A5), vergleiche (5.1), erfüllt. \square

Bemerkung B.12

Der numerisch bestimmte Modus $c_\lambda^{(A2')} \approx 0.466011$ lässt sich unter Nutzung der Standard-Lambert-W-Funktion, der inversen Funktion von $x \mapsto x \exp(x)$, auch analytisch darstellen. Dazu wird zunächst die Nullstelle der im Beweis von Lemma B.10 eingeführten Funktion h_1 bestimmt. Es ist

$$\begin{aligned} -e^t t + 2e^t - 2 = 0 &\iff (t - 2)e^t = -2 \iff (t - 2)e^{t-2} = -2e^{-2} \\ &\iff t - 2 = W(-2e^{-2}) \iff t = W(-2e^{-2}) + 2 \end{aligned}$$

Anschließendes Logarithmieren liefert den Modus $\log(W(-2e^{-2}) + 2) \approx 0.466011$.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Illustration eines Tetraeders mit Umkugel und Zitat von Albrecht Dürer .	1
4.1	Poisson-Regression: Position des Orbits x_{12}^* abhängig von β_1	68
4.2	Poisson-Regression: D -optimales Design auf der dreidim. Einheitskugel .	69
4.3	Negativ-Binomial-Regression: Orbitposition abhängig von β_1 bei $\beta_0 - \log a = 0$	70
4.4	Negativ-Binomial-Regression: Orbitposition abhängig von β_1 bei $k = 2$.	72
4.5	Zensierte Modelle: Orbitposition abhängig von β_1 bei $\beta_0 + \log c = 0$. . .	73
4.6	Zensierte Modelle: Orbitposition abhängig von β_1 bei $k = 2$	73
5.1	Intensitätsfunktionen λ_{logit} und λ_{probit} sowie u''_{logit} und u''_{probit}	76
5.2	Intensitätsfunktionen $\lambda_{\text{comp log log}}$ und $\lambda_{\text{double exp}}$ sowie $u''_{\text{comp log log}}$ und $u''_{\text{double exp}}$	78
5.3	Logit-Modell: Abhängigkeit von x_{11}^* , x_{12}^* und der Gewichte von $-\beta_0$. . .	89
5.4	Probit-Modell: Abhängigkeit von x_{11}^* , x_{12}^* und der Gewichte von $-\beta_0$. . .	90
5.5	Logit-Modell: Diskretisierte (lokal) D -optimale Designs für $\beta_1 = 1$ und $k = 3$	91
5.6	Komplementäres log-log-Modell: Abhängigkeit von x_{11}^* , x_{12}^* und der Gewichte von $-\beta_0$	93
5.7	Logit-Modell: Ausdehnung des Falls ($c\theta$) in Abhängigkeit von β_1 und k .	103
5.8	Probit-Modell: Ausdehnung des Falls ($c\theta$) in Abhängigkeit von β_1 und k	104
5.9	Übergang vom voll- zum teilfaktoriellen Design und Einbettung in die Kugel	106
5.10	Logit-Modell: Diskretisierte (lokal) D -optimale Designs für $-\beta_0 = 0$ und $\beta_1 = 1$ und $k = 3$ mit 6 beziehungsweise 4 Trägerpunkten	107
5.11	Effizienz im Logit-Modell für Dimension 3	114
5.12	Effizienz im Logit-Modell für Dimension 6	115

Literaturverzeichnis

- ATKINSON, Anthony C.; FEDOROV, Valerii V.; HERZBERG, Agnes M.; ZHANG, Rongmei: Elemental information matrices and optimal experimental design for generalized regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* 144 (2014), S. 81–91
- BIEDERMANN, Stefanie; DETTE, Holger; ZHU, Wei: Optimal Designs for Dose-Response Models With Restricted Design Spaces. *Journal of the American Statistical Association* 101 (2006), S. 747–759
- BIRNBAUM, Zygmunt W.: An Inequality for Mill's Ratio. *The Annals of Mathematical Statistics* 13 (1942), Nr. 2, S. 245–246
- BOX, George E.; DRAPER, Norman R.: *Empirical model-building and response surfaces*. New York: John Wiley & Sons, 1987
- BOYD, Stephen; VANDENBERGHE, Lieven: *Convex Optimization*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009
- CHRISTENSEN, Jens Peter R.: On Some Measures Analogous to Haar Measure. *Mathematica Scandinavica* 26 (1970), S. 103–106
- COOK, R. D.; THIBODEAU, L. A.: Marginally restricted D-optimal designs. *Journal of the American Statistical Association* 75 (1980), S. 366–371
- DÜRER, Albrecht: *Underweysung der messung mit dem zirckel un[d] richtscheyt, in Linien ebnen unnd gantzen corporen*. Nüremberg: Hieronymus Andreae, 1525
- EHRENFELD, Sylvain: Complete Class Theorems in Experimental Design. In: *Proceedings of the Third Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 1: Contributions to the Theory of Statistics* Bd. 3, University of California Press, 1956, S. 57–67

- ELSTRODT, Jürgen: *Maß- und Integrationstheorie*. Berlin: Springer, 2007
- EUKLID: *Euklids Elemente: funfzehn Bücher*. Halle: Verlag der Buchhandlung des Waisenhauses, 1781. – übersetzt von Johann Friedrich Lorenz.
- FARRELL, R. H.; KIEFER, J.; WALBRAN, A.: Optimum multivariate designs. In: *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 1: Statistics*. Berkeley, Calif.: University of California Press, 1967, S. 113–138
- FEDOROV, Valerii V.: *Theory of optimal experiments*. New York: Academic Press, 1972
- FISCHER, Gerd: *Lineare Algebra*. Wiesbaden: Vieweg Verlag, 2002
- FORD, Ian; TORSNEY, Bernard; WU, C.F.J.: The Use of a Canonical Form in the Construction of Locally Optimal Designs for Non-linear Problems. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 54 (1992), S. 569–583
- GRASSHOFF, Ulrike; GROSSMANN, Heiko; HOLLING, Heinz; SCHWABE, Rainer: Optimal design for probit choice models with dependent utilities. *Statistics* 55 (2021), Nr. 1, S. 173–194
- HALMOS, Paul R.: *Measure theory*. New York: Springer, 1974
- HUPPERT, Bertram; WILLEMS, Wolfgang: *Lineare Algebra*. Wiesbaden: Teubner, 2006
- KIEFER, Jack C.: Optimum experimental designs V, with applications to systematic and rotatable designs. In: *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability* Bd. 1, University of California Press, 1961, S. 381–405
- KIEFER, Jack C.; WOLFOWITZ, Jacob: The Equivalence of Two Extremum Problems. *Canadian Journal of Mathematics* 12 (1960), S. 363–366
- KLENKE, Achim: *Wahrscheinlichkeitstheorie*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2013
- KONSTANTINOU, Maria; BIEDERMANN, Stefanie; KIMBER, Alan: Optimal designs for two-parameter nonlinear models with application to survival models. *Statistica Sinica* 24 (2014), S. 415–428
- MARSHALL, Albert W.; OLKIN, Ingram: *Life Distributions: Structure of Nonparametric, Semiparametric, and Parametric Families*. New York: Springer, 2007

- MCCULLAGH, Peter; NELDER, John A.: *Generalized Linear Models, Second Edition*. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 1989
- MCCULLOCH, Charles E.; SEARLE, Shayle R.: *Generalized, Linear, and Mixed Models*. New York: John Wiley & Sons, 2001
- PRONZATO, Luc; PÁZMAN, Andrej: *Design of Experiments in Nonlinear Models: Asymptotic Normality, Optimality Criteria and Small-Sample Properties*. New York: Springer, 2013
- PUKELSHEIM, Friedrich: *Optimal Design of Experiments*. New York: John Wiley & Sons, 1993
- QUARTERONI, Alfio; SACCO, Riccardo; SALERI, Fausto; TOBISKA, Lutz: *Numerische Mathematik 1*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2002
- RADLOFF, Martin; SCHWABE, Rainer: Invariance and equivariance in experimental design for nonlinear models. In: KUNERT, Joachim (Hrsg.); MÜLLER, Christine H. (Hrsg.); ATKINSON, Anthony C. (Hrsg.): *mODa 11-Advances in Model-Oriented Design and Analysis*. Cham: Springer, 2016, S. 217–224
- RADLOFF, Martin; SCHWABE, Rainer: Locally D -optimal Designs for Non-linear Models on the k -dimensional Ball. *Journal of Statistical Planning and Inference* 203 (2019a), S. 106–116
- RADLOFF, Martin; SCHWABE, Rainer: Locally D -optimal designs for a wider class of nonlinear models on the k -dimensional ball with applications to logit and probit models. *Statistical Papers* 60 (2019b), S. 165–177
- RADLOFF, Martin; SCHWABE, Rainer: D -optimal and nearly D -optimal exact designs for binary response on the ball. *Statistical Papers* 64 (2023), S. 1021–1040
- RODRÍGUEZ-TORREBLANCA, C.; RODRÍGUEZ-DÍAZ, J. M.: Locally D - and c -optimal designs for Poisson and negative binomial regression models. *Metrika* 66 (2007), S. 161–172
- RUSSELL, Kenneth G.; WOODS, David C.; LEWIS, S M.; ECCLESTON, J A.: D -optimal designs for Poisson regression models. *Statistica Sinica* 19 (2009), S. 721–730

- SCHMIDT, Dennis: *Versuchsplanung für nichtlineare multiple Regressionsmodelle mit Anwendung auf zensierte Daten*, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg – Fakultät für Mathematik, Diss., 2017. <http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn:nbn:de:gbv:ma9:1-9987>. – URN urn:nbn:de:gbv:ma9:1-9987
- SCHMIDT, Dennis; SCHWABE, Rainer: Optimal design for multiple regression with information driven by the linear predictor. *Statistica Sinica* 27 (2017), S. 1371–1384
- SCHWABE, Rainer: *Optimum Designs for Multi-Factor Models*. New York: Springer, 1996
- SILVEY, Samuel D.: *Optimal design: an introduction to the theory for parameter estimation*. London: Chapman and Hall, 1980
- WALTER, Wolfgang: *Analysis 1*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004
- WIJSMAN, Robert A.: *Invariant Measures on Groups and Their Use in Statistics*. Hayward: Institute of Mathematical Statistics, 1990