

**Optimale Versuchspläne
bei Einschränkungen
in der Versuchspunktwahl**

Dissertation

von

Frank Miller

Karlsruhe 2002

Optimale Versuchspläne bei Einschränkungen in der Versuchspunktwahl

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN

von der Fakultät für Mathematik der
Universität Karlsruhe
genehmigte

DISSERTATION

von
Dipl.-Math. Frank Miller
aus Rastatt

Tag der mündlichen Prüfung:

11. Dezember 2002

Referent:

Prof. Dr. Wolfgang Bischoff

Koreferenten:

Prof. Dr. Holger Dette

Prof. Dr. Norbert Henze

Karlsruhe 2002

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Mathematische Stochastik der Universität Karlsruhe. Mein herzlicher Dank geht an alle, die mich bei der Anfertigung der Arbeit unterstützt, ermuntert und beraten haben.

- Zuerst danke ich Herrn Prof. Dr. Wolfgang Bischoff für die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit. Er hat mir in zahlreichen Gesprächen stets wertvolle Anregungen gegeben. Darüberhinaus hat er meinen wissenschaftlichen Werdegang bereits seit meinem Studium begleitet und beeinflusst.
- Weiter danke ich den Herren Prof. Dr. Holger Dette und Prof. Dr. Norbert Henze für die freundliche Übernahme des Koreferats.
- Den Herren Dr. Tim Friede, Dr. Enkelejd Hashorva, Prof. Dr. Jürg Hüsler, Priv.-Doz. Dr. Meinhard Kieser danke ich, da wir in produktiver Atmosphäre mehrere Arbeiten über verschiedene Themen anfertigen konnten. Herrn Hashorva danke ich außerdem für das Korrekturlesen einiger Teile dieser Arbeit.
- Zudem danke ich allen Mitgliedern des Instituts für Mathematische Stochastik der Universität Karlsruhe für das angenehme Arbeitsklima, das während meiner Zeit am Institut herrschte.
- Meiner Frau, meiner Mutter und Hannah Wunsch danke ich für die Unterstützung beim Kresse-Experiment.
- Schließlich danke ich meiner Frau Sabine von Herzen dafür, dass sie mir in den letzten Jahren liebend zur Seite stand.

Karlsruhe, den 11.12.2002

Inhaltsverzeichnis

1	Schätzen und Testen im linearen Regressionsmodell	5
1.1	Lineares Regressionsmodell	5
1.2	Versuchspläne	7
1.3	Schätzbarkeit und Identifizierbarkeit von Parameter-Teilsystemen	7
2	Grundlegende Methoden der Versuchsplanung	11
2.1	Kriterienfunktionen	11
2.1.1	Die D -Optimalität	11
2.1.2	Die E -Optimalität	12
2.1.3	Die A -Optimalität	12
2.1.4	Die ϕ_p -Optimalität	12
2.1.5	Die G -Optimalität	13
2.1.6	Die \mathbf{c} -Optimalität	13
2.2	Approximative und asymptotische Versuchspläne	14
2.2.1	Approximative Versuchspläne	14
2.2.2	Asymptotische Versuchspläne	16
2.2.3	Die Mengen $\tilde{\Xi}$ und Ξ	21
2.2.4	Asymptotische Versuchspläne bei Einschränkungen in der Versuchspunktwahl	22
2.3	Der Satz von Carathéodory	23
2.4	Äquivalenztheoreme	24
2.4.1	Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität	24
2.4.2	D - und G -Optimalität	29
2.4.3	Invarianz der D -Optimalität	32

2.4.4	Geometrische Interpretation der D -Optimalität	33
2.5	Äquivalenztheoreme für die \mathbf{c} -Optimalität	34
2.5.1	Das Elfving-Theorem	34
2.5.2	Spezialisierung allgemeiner Äquivalenztheoreme für \mathbf{c} -Optimalität in Ξ	37
2.5.3	Äquivalenztheoreme in $L^2(\xi)$ für \mathbf{c} -Optimalität in Ξ	39
2.6	Optimale Versuchspläne für die \mathbf{c} - und D -Optimalität	44
2.6.1	Polynomregression	45
2.6.2	Change-Point-Regression	47
2.6.3	Trigonometrische Regression	51
2.7	Gleichzeitige Betrachtung mehrerer Optimalitätskriterien	52
2.7.1	Sequentielles Optimieren von zwei Optimalitätskriterien	53
2.7.2	Optimieren mit Minimum-Effizienz-Forderung bezüglich eines anderen Kriteriums	54
2.7.3	Optimieren von gewichteten Mitteln zweier Kriterien	55
3	Einschränkungen aus der Praxis an den Versuchsplan	56
3.1	Versuchspunktwahl mit Kontrolle des vermuteten Regressionsmodells	56
3.1.1	Die LOF-Optimalität	57
3.1.2	Sequentielles Optimieren	59
3.1.3	Optimieren mit minimaler Effizienz des LOF-Tests	60
3.2	Beschränkung der Lebesgue-Dichte des Versuchsplans	62
3.2.1	Beobachtungen mit fortschreitender Zeit	62
3.2.2	Beobachtungen auf räumlichem Versuchsbereich	64
3.2.3	Beobachtung einer Stichprobe der Grundgesamtheit	65
3.3	Definition der Teilmenge $\Upsilon[a, b]$ von Ξ	66
3.4	Äquivalenztheoreme für Optimalität in $\Upsilon[a, b]$	68
4	D- und e_k-optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ für Polynomregression	82
4.1	e_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit a allgemein	83
4.2	e_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit $a = \alpha$ konstant	90
4.3	D -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit $a = \alpha$ konstant	99
4.4	Optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ mit $a = \alpha$, $b = \beta$ konstant	109

5	Optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ für die Change-Point-Regression	123
5.1	e_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \infty]$	123
5.2	Das volle Change-Point-Modell	131
6	Ein Anwendungsbeispiel	139
A	Tschebyschev-Polynome	145
B	Legendre-Polynome	148

Einleitung

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die statistische Versuchsplanung. Was verstehen wir hier unter Versuchsplanung? Bevor wir den Begriff der Versuchsplanung definieren, betrachten wir folgendes Beispiel.

Bereits im alten Testament wird von einem (statistischen) Experiment berichtet (Buch Daniel 1,12-16). Daniel befindet sich zusammen mit drei Freunden in babylonischer Gefangenschaft. Da er sich nicht mit den angeordneten königlichen Speisen unrein machen will, schlägt er seinem Aufseher ein Experiment vor. Es soll untersucht werden, ob die Speisen und der Wein der königlichen Tafel oder aber pflanzliche Nahrung und Wasser nahrhafter wären. Zehn Tage lang sollten Daniel und seine Freunde pflanzlich ernährt werden und anschließend mit dem Aussehen anderer junger Leute gleichen Alters verglichen werden, die von den Speisen des Königs essen. Von dem Ausgang dieses Zwei-Stichproben-Experiments sollte die weitere Ernährung von Daniel und seinen Freunden abhängen. Nach den zehn Tagen sahen Daniel und seine Freunde besser und wohlgenährter aus als die anderen.

Dieses bemerkenswerte Beispiel, das Stigler (1974) erwähnt, ist eines der ältesten Beispiele für ein geplantes statistisches Experiment. Für uns ist es jedoch noch kein Beispiel für statistische Versuchsplanung. Statistische Versuchsplanung ist die Entscheidung zur Durchführung von einem bestimmten statistischen Experiment aus einer Menge von mehreren möglichen statistischen Experimenten. Die Entscheidung erfolgt vor Beginn der Beobachtungen aufgrund von bestimmten, statistisch motivierten Kriterien. Wenn man sich beispielsweise für den Vergleich von Ernährungen die Frage stellen würde, wieviele Personen die pflanzliche, wieviele die königliche Ernährung erhalten sollten, so wäre dies ein Problem der Versuchsplanung.

Für die Analyse von Messungen wird in der Praxis nicht selten ein lineares Regressionsmodell ver-

wendet. An gewissen Versuchspunkten eines Versuchsbereiches¹ wird eine Größe gemessen, die von Interesse ist. Von dieser Größe wird angenommen, dass sie (abgesehen von einem additiven stochastischen Fehler) funktional von den Versuchspunkten abhängt, z.B. könnte der Ertrag einer Nutzpflanze funktional von der Düngermenge abhängen, siehe dazu ein Beispiel in Kapitel 1. Diese funktionale Abhängigkeit wird durch eine Linearkombination von bekannten Funktionen modelliert (in dem erwähnten Beispiel sind dies die Funktionen 1 , x und x^2 mit x =Düngermenge). Der Parametervektor, der die Gewichte dieser Funktionen in der Linearkombination angibt, ist unbekannt. Dieser Parametervektor (oder ein Teil davon) soll mit Hilfe der Beobachtungen geschätzt werden, es soll ein Konfidenzbereich dafür angegeben werden oder es soll eine Hypothese über den Parametervektor getestet werden. Versuchsplanung für das Regressionsmodell, die wir in dieser Arbeit betrachten, ist nun die Beantwortung der Frage, an welchen Punkten des Versuchsbereichs die Beobachtungen gemacht werden sollten. Die „Güte“ der Schätzung des unbekanntem Parametervektors (oder des Konfidenzbereichs oder des Tests von Hypothesen) hängt nämlich von der Wahl der Versuchspunkte ab. Führt man in dieser Weise eine Versuchsplanung vor Beginn des Experiments durch, erhält man genauere Aussagen als bei ungeplanter und intuitiver Versuchspunktwahl. Eine bemerkenswert frühe Arbeit, die theoretische Untersuchungen zur Versuchsplanung für Regressionsmodelle durchführt, ist Smith (1918).

In der Versuchsplanung für Regressionsmodelle wurden in der zweiten Hälfte des vergangenen Jahrhunderts weitreichende Ergebnisse erzielt. Ein Hauptkritikpunkt dieser Theorie ist jedoch, dass die optimalen Versuchspläne in der Regel maßgeschneidert für das angenommene Regressionsmodell sind. Abweichungen vom angenommenen Regressionsmodell, die in der Praxis nie auszuschließen sind, können mit den optimalen Versuchsplänen nur eingeschränkt oder überhaupt nicht erkannt werden. In dieser Arbeit wird ein Weg aufgezeigt, wie dieses Problem mathematisch-statistisch beschrieben werden kann. Weiter werden in bestimmten, wichtigen Fällen optimale Versuchspläne berechnet, mit denen Abweichungen vom angenommenen Regressionsmodell erkannt werden können.

Oft können optimale Versuchspläne deshalb nicht angewendet werden, da aufgrund praktischer Gegebenheiten ein Mindestabstand zwischen den Versuchspunkten eingehalten werden muss. Dies kann zum Beispiel dann der Fall sein, wenn der Versuchsbereich ein Zeitintervall ist. Auch diese Einschränkung modellieren wir und geben optimale Versuchspläne in der Menge der Versuchspläne an, bei denen ein solcher Mindestabstand (zumindest asymptotisch) eingehalten wird.

Es gibt weitere Bereiche der Versuchsplanung, die sich von der oben beschriebenen Versuchspla-

¹Wir betrachten in dieser Arbeit in der Regel ein kompaktes Intervall der reellen Zahlen als Versuchsbereich

nung in Regressionsmodellen unterscheiden, sowohl von der Idee her als auch von den mathematischen Methoden wie die optimalen Versuchspläne bestimmt werden. Dies sind zum Beispiel adaptive/sequentielle Versuchspläne oder randomisierte Versuchspläne. Auf diese Bereiche der Versuchsplanung wird in dieser Arbeit nicht eingegangen.

In *Kapitel 1* führen wir die mathematische Notation für das Regressionsmodell ein. Im Gegensatz zu einer üblichen Voraussetzung bei der Versuchsplanung im Regressionsmodell, lassen wir auch unstetige Regressionsfunktionen zu, da diese in Anwendungen eine wichtige Rolle spielen.

In *Kapitel 2* formulieren wir einen Zugang zu approximativen und asymptotischen Versuchsplänen. Die Modellierung von asymptotischen Versuchsplänen, die wir ausführlich betrachten, kommt bislang nicht in dieser Form in der Literatur vor. Äquivalenztheoreme, d.h. äquivalente Bedingungen zur Optimalität von Versuchsplänen, spielen in der statistischen Versuchsplanung eine Hauptrolle. Wir geben Äquivalenztheoreme an, wobei wir auf die sonst übliche Stetigkeitsvoraussetzung der Regressionsfunktionen verzichten. Wir geben eine geometrische Konstruktionsmöglichkeit für sogenannte \mathbf{c} -optimale Versuchspläne an, wobei wir dazu den Raum von quadratisch integrierbaren Funktionen betrachten. Diese Möglichkeit zur Konstruktion von optimalen Versuchsplänen wurde bisher in der Literatur nicht beachtet. Für die stetige und unstetige Change-Point-Regression geben wir neue Resultate für optimale Versuchspläne an.

Das bereits erwähnte Problem, dass Versuchspläne die Erkennung von Abweichungen vom angenommenen Regressionsmodell möglich machen sollten und dass es Fälle gibt, bei denen ein Mindestabstand zwischen den Versuchspunkten einzuhalten ist, wird in *Kapitel 3* betrachtet. Wir motivieren so eine Menge von Versuchsplänen, deren Lebesgue-Dichte zwischen einer unteren und oberen Schranke liegen. Für diese Menge von Versuchsplänen beweisen wir einige Äquivalenztheoreme.

In *Kapitel 4* suchen wir im wichtigen Fall der Polynomregression optimale Versuchspläne für die in Kapitel 3 motivierte Menge von Versuchsplänen. Hier ist es uns gelungen, ein weitreichendes Ergebnis für Polynomregression zu beliebigem, festen Grad zu erzielen. Die optimalen Versuchspläne haben eine überraschend einfache Gestalt. In Fällen, in denen kein so weitreichendes Ergebnis möglich war, konnten immerhin für die praktisch relevanten Polynomgrade optimale Versuchspläne explizit oder numerisch berechnet werden. Darüberhinaus können wir die optimalen Versuchspläne in einer Vielzahl von Grafiken veranschaulichen.

Für die Change-Point-Regression, insbesondere auch für den unstetigen Fall, berechnen wir in *Kapitel 5* optimale Versuchspläne für die Menge von Versuchsplänen aus Kapitel 3.

Kapitel 6 beschließt den Hauptteil dieser Arbeit mit einem Anwendungsbeispiel, bei dem deutlich wird, wie die entwickelte Theorie auf praktische Probleme angewendet werden kann.

Im *Anhang* geben wir einige für uns wichtige Eigenschaften von Tschebyschev- und Legendre-Polynomen an. Wir weisen auf das anschließende *Symbolverzeichnis* hin, das dem Leser zum Nutzen dienen soll.

Kapitel 1

Schätzen und Testen im linearen Regressionsmodell

1.1 Lineares Regressionsmodell

Für die Analyse von Messungen wird in der Praxis nicht selten ein lineares Regressionsmodell verwendet. An gewissen Versuchspunkten x_1, x_2, \dots, x_n eines Versuchsbereiches \mathcal{E} wird die zu beobachtende Größe gemessen. Von dieser Größe wird angenommen, dass sie (abgesehen von einem additiven stochastischen Fehler) funktional von den Versuchspunkten abhängt. In der üblichen mathematischen Notation lautet dieses Modell für die Beobachtungen Y_1, Y_2, \dots, Y_n :

$$Y_i = f(x_i)^\top \boldsymbol{\theta} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.1)$$

wobei $f : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}^k$ ein Vektor von bekannten Regressionsfunktionen, $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^k$ ein unbekannter Parametervektor und $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ reellwertige Zufallsvariablen sind. Wir betrachten in dieser Arbeit den sogenannten homoskedastischen Fall, d.h. wir nehmen an, dass $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ unabhängig, identisch verteilt sind mit Erwartungswert 0 und Varianz $\sigma^2 \in (0, \infty)$.

Beispiel 1.1 *Es soll untersucht werden, wie die Düngermenge den Ertrag einer Nutzpflanze beeinflusst. In n unabhängigen Versuchen wird die Nutzpflanze jeweils mit unterschiedlichen Düngermengen x_i ($i = 1, \dots, n$) gedüngt. Man nimmt an, dass sich der mittlere Ertrag durch ein quadratisches Polynom beschreiben lässt. Bei jedem Versuch tritt jedoch noch ein additiver stochastischer Fehler*

ε_i auf. Als Spezialfall von (1.1) haben wir dann das lineare Regressionsmodell

$$Y_i = \theta_1 + x_i\theta_2 + x_i^2\theta_3 + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.2)$$

Man bezeichnet das Regressionsmodell (1.2) als linear, da der Parameter $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)^\top$ linear in die rechte Seite von (1.2) eingeht.

Von Interesse sind statistische Aussagen über den unbekanntem Parametervektor $\boldsymbol{\theta}$ auf Grundlage der Beobachtungen Y_1, Y_2, \dots, Y_n . Die wichtigsten Aussagen, an denen ein Praktiker interessiert ist, sind das Schätzen von $\boldsymbol{\theta}$, das Verwerfen oder Nicht-Verwerfen von Hypothesen über $\boldsymbol{\theta}$ oder Konfidenzbereiche für $\boldsymbol{\theta}$.

Wir betrachten zunächst das Problem der Schätzung von $\boldsymbol{\theta}$. Der beliebteste Schätzer für diesen Parametervektor ist der Kleinste-Quadrate-Schätzer $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Wenn man, wie allgemein üblich, das Modell (1.1) in der Matrixschreibweise

$$\mathbf{Y} = X\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

schreibt mit $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^\top$, $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)^\top$ und $X = (f(x_1), \dots, f(x_n))^\top$, so ist der Kleinste-Quadrate-Schätzer gegeben durch

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (X^\top X)^{-1} X^\top \mathbf{Y}.$$

Wir setzen hierbei voraus, dass die Versuchspunkte x_1, x_2, \dots, x_n so gewählt sind, dass die Matrix X vollen Rang k hat. Die Varianz dieses Schätzers ist gegeben durch $\sigma^2(X^\top X)^{-1}$. Die statistische Begründung für die Verwendung des Schätzers $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ ist, dass er bester linearer erwartungstreuer Schätzer ist (BLUE - *best linear unbiased estimator*). Er hat unter allen linearen erwartungstreuen Schätzern die kleinste Varianz (bezüglich der Loewner-Ordnung). Nimmt man normalverteilte Fehler an ($\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n \sim N(0, \sigma^2)$), so ist $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ sogar bester erwartungstreuer Schätzer (BUE - *best unbiased estimator*), siehe hierzu Arnold (1981) und Pukelsheim (1993).

Die Matrix X und damit die Kovarianzmatrix $\sigma^2(X^\top X)^{-1}$ hängt von der Wahl der Versuchspunkte x_1, \dots, x_n ab. Je „kleiner“ die Kovarianzmatrix ist, desto besser ist der Schätzer $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Eine wichtige Bedeutung hat die *Momentenmatrix* $M := \frac{1}{n} X^\top X$, die (bis auf skalare Multiplikation) die Inverse der Kovarianzmatrix ist. Je „größer“ M ist, desto besser ist $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Man nennt die *Momentenmatrix* auch *Informationsmatrix* (für den Parameter $\boldsymbol{\theta}$).

1.2 Versuchspläne

Für den Praktiker ist ein Versuchsplan für n Beobachtungen eine Liste (x_1, \dots, x_n) von n Elementen aus \mathcal{E} (bei der die Reihenfolge der Einträge keine Rolle spielt). Eine für den Statistiker nützliche Notation eines solchen Versuchsplans ist die folgende: Mit der Liste (x_1, \dots, x_n) wird ein diskretes Wahrscheinlichkeitsmaß ξ auf \mathcal{E} identifiziert durch

$$\xi = \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \delta_{x_i},$$

wobei δ_x das Einpunktmaß in x beschreibt. ξ ist also das Wahrscheinlichkeitsmaß mit Masse $\#\{i = 1, \dots, n \mid x_i = x\}/n$ in $x \in \mathcal{E}$. Mit dem Wahrscheinlichkeitsmaß ξ kann die Momentenmatrix in der Form

$$M(\xi) = \frac{1}{n} X^\top X = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) f(x_i)^\top = \int_{\mathcal{E}} f(x) f(x)^\top \xi(dx) \quad (1.3)$$

geschrieben werden. Wir definieren die Menge der Wahrscheinlichkeitsmaße Ξ_n durch

$$\Xi_n := \left\{ \xi = \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \delta_{x_i} \mid (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{E}^n \right\}.$$

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die Versuchsplanung. Das Ziel der Versuchsplanung ist, den Versuchsplan $\xi \in \Xi_n$ so zu wählen, dass die interessierende Fragestellung (z.B. Schätzen von $\boldsymbol{\theta}$ oder Testen von $H_0 : \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_0$) „möglichst gut“ beantwortet werden kann.

1.3 Schätzbarkeit und Identifizierbarkeit von Parameter-Teilsystemen

Bisher sind wir davon ausgegangen, dass statistische Aussagen über den gesamten Parameter $\boldsymbol{\theta}$ in unserem Interesse stehen. Häufig ist man jedoch nur an einzelnen Komponenten θ_i interessiert oder allgemeiner an einem linearen Funktional (Parameter-Teilsystem) $K^\top \boldsymbol{\theta}$ von $\boldsymbol{\theta}$ (wobei $K \in \mathbb{R}^{k \times s}$). Wir setzen in dieser Arbeit generell voraus:

$$K \in \mathbb{R}^{k \times s}, \quad 1 \leq s \leq k, \quad \text{Rang}(K) = s. \quad (1.4)$$

Nicht jeder Versuchsplan ist dazu geeignet, statistische Aussagen über das Parameter-Teilsystem $K^\top \boldsymbol{\theta}$ zu machen. Bevor wir uns überlegen können, welcher Versuchsplan möglichst gut ist, müssen wir die Menge der Versuchspläne beschreiben, mit denen man überhaupt Aussagen über $K^\top \boldsymbol{\theta}$ machen kann.

Definition 1.2 (Schätzbarkeit) Das Parameter-Teilsystem $K^\top \boldsymbol{\theta}$ heißt linear schätzbar, wenn ein $W \in \mathbb{R}^{n \times s}$ existiert, so dass für alle $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^k$ gilt:

$$E_{\boldsymbol{\theta}}(W^\top Y) = K^\top \boldsymbol{\theta}.$$

Hierbei bezeichnet $E_{\boldsymbol{\theta}}(W^\top Y)$ den Erwartungswert von $W^\top Y$ für $\boldsymbol{\theta}$, d.h. $E_{\boldsymbol{\theta}}(W^\top Y) = E(W^\top (X\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}))$.

Wegen $E_{\boldsymbol{\theta}}(W^\top Y) = E(W^\top (X\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon})) = W^\top X\boldsymbol{\theta}$ ist $K^\top \boldsymbol{\theta}$ genau dann linear schätzbar, wenn die Spalten von K in dem linearen Unterraum von \mathbb{R}^n liegen, der von den Zeilen von X erzeugt wird. In Formeln heißt dies:

$$K^\top \boldsymbol{\theta} \text{ ist linear schätzbar} \iff [K] \subseteq [X^\top].$$

Wegen $[X^\top] = [X^\top X] = [M(\xi)]$ gilt

$$K^\top \boldsymbol{\theta} \text{ ist linear schätzbar} \iff [K] \subseteq [M(\xi)].$$

Die Bedingung $[K] \subseteq [M(\xi)]$ ist nicht nur äquivalent zur Schätzbarkeit. Auch die „Testbarkeit“ der linearen Hypothese $H_0 : K^\top \boldsymbol{\theta} = \mathbf{0}_s = (0, \dots, 0)^\top \in \mathbb{R}^s$ ist äquivalent zu $[K] \subseteq [M(\xi)]$, siehe Pukelsheim (1993), Seite 67. Weiter ist die *Identifizierbarkeit* äquivalent zu $[K] \subseteq [M(\xi)]$, siehe Pukelsheim (1993), Seite 72.

Definition 1.3 (Identifizierbarkeit) Das Parameter-Teilsystem $K^\top \boldsymbol{\theta}$ heißt identifizierbar, wenn für alle $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2 \in \mathbb{R}^k$ gilt:

$$X\boldsymbol{\theta}_1 = X\boldsymbol{\theta}_2 \implies K^\top \boldsymbol{\theta}_1 = K^\top \boldsymbol{\theta}_2.$$

Damit das Parameter-Teilsystem $K^\top \boldsymbol{\theta}$ schätzbar (oder testbar oder identifizierbar) ist, müssen also die Versuchspunkte so gewählt werden, dass die Spalten von K in dem von den Spalten von $M(\xi)$ erzeugten Unterraum von \mathbb{R}^k liegen. Die Versuchspläne, die diese Eigenschaft besitzen, werden als durchführbar (*feasible*) für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ bezeichnet. Wir bezeichnen die Menge aller durchführbaren Versuchspläne mit

$$\mathcal{S}_n(K) := \{\xi \in \Xi_n \mid [K] \subseteq [M(\xi)]\}. \quad (1.5)$$

Betrachtet man die Momentenmatrix $M(\xi)$ eines für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ durchführbaren Versuchsplans ξ , so ist

$$\frac{\sigma^2}{n} K^\top M(\xi)^{-1} K$$

die Varianz des besten linearen erwartungstreuen Schätzers für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ (Pukelsheim (1993), Seite 65). Hierbei bezeichnet M^- eine verallgemeinerte Inverse von M , d.h. eine Matrix mit $MM^-M = M$. Die verallgemeinerte Inverse ist nicht eindeutig bestimmt. Dagegen hängt $K^\top M(\xi)^- K$ nicht von der Wahl der verallgemeinerten Inversen ab und ist (wegen $\text{Rang}(K) = s$) positiv definit (siehe Pukelsheim (1993), Seite 17).

Wir bezeichnen die $s \times s$ -Matrix

$$(K^\top M(\xi)^- K)^{-1}$$

als *Informationsmatrix* für $K^\top \boldsymbol{\theta}$.

Sind wir, wie in Abschnitt 1.2, an dem gesamten Parametervektor $\boldsymbol{\theta}$ interessiert, so können wir $K = I_k$ setzen ($I_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ Einheitsmatrix). Es gilt dann

$$\mathcal{S}_n(I_k) = \{\xi \in \Xi_n \mid M(\xi) \text{ positiv definit}\}.$$

Da $M(\xi)$ genau dann positiv definit ist, wenn für die Matrix X gilt $\text{Rang}(X) = k$, war in Abschnitt 1.2 die Voraussetzung, dass X vollen Rang hat, eine sehr sinnvolle Voraussetzung. Wenn wir dagegen an einem Parameter-Teilsystem $K^\top \boldsymbol{\theta}$ mit $s < k$ interessiert sind, gibt es auch Versuchspläne ξ , für die $K^\top \boldsymbol{\theta}$ schätzbar ist und für die $M(\xi)$ nicht positiv definit sondern nur nicht negativ definit ist.

Hauptsächlich werden wir in dieser Arbeit die folgenden Spezialfälle für die Matrix K betrachten.

- $K = \mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$. Hier ist die Information $(\mathbf{c}^\top M(\xi)^- \mathbf{c})^{-1}$ reellwertig.
- $K = I_k$, d.h. der gesamte Parametervektor wird betrachtet, $K^\top \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}$, $(K^\top M(\xi)^- K)^{-1} = M(\xi)$ für $\xi \in \mathcal{S}_n(I_k)$.

Im Falle von $K = \mathbf{c}$ ist klar, wie wir einen optimalen Versuchsplan definieren sollten:

$$\xi \in \Xi_n \text{ ist optimal für } \mathbf{c}^\top \boldsymbol{\theta} \iff \xi \in \mathcal{S}_n(\mathbf{c}) \text{ und } (\mathbf{c}^\top M(\xi)^- \mathbf{c})^{-1} \text{ ist maximal in } \mathcal{S}_n(\mathbf{c}).$$

Falls aber $s \geq 2$, benötigt man Kriterienfunktionen, um zu entscheiden, welche von zwei Informationsmatrizen für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ „besser“ als die andere ist. Auf Kriterienfunktionen werden wir zu Beginn von Kapitel 2 eingehen.

In dieser Arbeit legen wir das Modell (1.1) zugrunde und setzen weiter voraus:

Voraussetzung 1.4 a) Der Versuchsbereich $\mathcal{E} \subseteq \mathbb{R}$ sei ein kompaktes Intervall.

b) Die messbare Funktion $f : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}^k$ sei in jedem inneren Punkt von \mathcal{E} linksseitig oder rechtsseitig stetig und sie sei beschränkt auf \mathcal{E} .

c) $f(\mathcal{E}) \subseteq \mathbb{R}^k$ spannt den \mathbb{R}^k auf.

Ist f zusätzlich stetig, so ist $f(\mathcal{E})$ kompakt.

In den Lehrbüchern zur Versuchsplanung wird in der Regel generell vorausgesetzt, dass f stetig ist. Es gibt jedoch wichtige praktische Problemstellungen, bei denen auch unstetige Regressionsfunktionen vorkommen. Beispielsweise spielen Change-Point-Regressionsmodelle eine wichtige Rolle in der industriellen Qualitätskontrolle, vgl. Abschnitt 2.6.2.

Etliche wichtige Sätze der Versuchsplanung (z.B. das Elfving-Theorem, der Satz von Kiefer und Wolfowitz) werden in den Lehrbüchern unter Ausnutzung der Stetigkeitsvoraussetzung bewiesen, siehe z.B. Pukelsheim (1993). Erfreulicherweise, wie sich in Kapitel 2 zeigen wird, kann man eine große Zahl wichtiger Aussagen auch mit obigen abgeschwächten Voraussetzungen zeigen.

Kapitel 2

Grundlegende Methoden der Versuchsplanung

2.1 Kriterienfunktionen

Wir betrachten die Menge der durchführbaren Versuchspläne $\mathcal{S}_n(K)$. Der Versuchsplan $\xi \in \mathcal{S}_n(K)$ soll so gewählt werden, dass die Informationsmatrix $C = (K^\top M(\xi) - K)^{-1} \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $1 \leq s \leq k$, „möglichst groß“ bezüglich der Loewner-Halbordnung wird. Da es (außer in einzelnen Spezialfällen) keinen Versuchsplan geben wird, der die Informationsmatrix bezüglich der dieser Halbordnung maximiert, benötigen wir Funktionen

$$\psi : PD(s) \rightarrow \mathbb{R}, \quad \text{wobei } PD(s) := \{A \in \mathbb{R}^{s \times s} \mid A \text{ symmetrisch, } A \text{ positiv definit}\},$$

die einer Informationsmatrix eine reelle Größe zuweist, und so ermöglicht, alle Informationsmatrizen mittels der Totalordnung auf \mathbb{R} zu vergleichen. Diese Funktionen werden Kriterienfunktionen genannt. In der Entwicklung der Versuchsplanung im vergangenen Jahrhundert haben sich mehrere Kriterien herausgebildet. Wir erläutern die Kriterien im Folgenden für die Optimalität für das Parameter-Teilsystem $K^\top \theta$.

2.1.1 Die D -Optimalität

Die sogenannte *verallgemeinerte Varianz* eines mehrdimensionalen Zufallsvektors ist die Determinante der Kovarianzmatrix. Krafft (1978), Seite 31-36, motiviert die Betrachtung der verallgemeinerten Varianz und interpretiert sie geometrisch. Findet man einen Versuchsplan, der die Determinante

der Kovarianzmatrix minimiert, d.h. die Determinante der Informationsmatrix maximiert, so wird dieser Versuchsplan D -optimal (*determinant optimal*) genannt. Dieses Optimalitätskriterium wird Wald (1943) zugeschrieben, der dieses Kriterium einführt und in speziellen Modellen D -optimale Versuchspläne bestimmt. Später wird dieses Kriterium aufgrund wichtiger Eigenschaften *die* zentrale Bedeutung unter den Kriterienfunktionen erhalten. Interessanterweise motiviert Wald in seiner Arbeit jedoch gar nicht die D -Optimalität, sondern die E -Optimalität und zieht sich dann lediglich „for the sake of certain mathematical simplifications“ auf die D -Optimalität zurück.

2.1.2 Die E -Optimalität

Generell sind wichtige Größen zur Beurteilung einer Informationsmatrix die Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_s$ der Matrix. Argumentiert man über die Eigenwerte $\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_s^{-1}$ der Kovarianzmatrix, so sieht man, dass der größte Eigenwert der Kovarianzmatrix die größte Varianz einer Linearkombination $\mathbf{z}^\top K^\top \boldsymbol{\theta}$, $\|\mathbf{z}\| = 1$, bestimmt (nämlich der Linearkombination $\mathbf{z}^\top K^\top \boldsymbol{\theta}$ mit dem normierten Eigenvektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^s$ zum größten Eigenwert). Die Benutzung des Minimaxprinzips führt auf ein Optimalitätskriterium: Will man die schlechtmöglichste Varianz einer Parameterlinearkombination so klein wie möglich halten, dann muss man dazu den kleinsten Eigenwert $\min_{i=1, \dots, s} \lambda_i$ der Informationsmatrix maximieren. Dieses Kriterium wird E -Optimalität (*smallest-eigenvalue optimality*) genannt.

2.1.3 Die A -Optimalität

Wenn die einzelnen Komponenten des Vektors $\boldsymbol{\theta}$ eine spezielle (z.B. physikalische) Bedeutung besitzen und die Bedeutung der Komponenten untereinander gleich einzuschätzen ist, bietet sich ein anderes Kriterium an: Die A -Optimalität (*average-variance optimality*) will die mittlere Varianz der einzelnen Komponenten von $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ minimieren. Ausgedrückt mit der Informationsmatrix C (bzw. mit den Eigenwerten λ_i von C) maximiert ein A -optimaler Versuchsplan

$$\psi(C) := 1/\text{Spur}(C^{-1}) = 1/\left(\sum_{i=1}^s \lambda_i^{-1}\right).$$

2.1.4 Die ϕ_p -Optimalität

Die drei letztgenannten Kriterien haben eine Sache gemeinsam: sie hängen lediglich durch die Eigenwerte von der Informationsmatrix ab. Daher können sie als Spezialfälle einer großen Klasse von

Kriterienfunktionen aufgefasst werden. Seien $\lambda_1, \dots, \lambda_s$ die (nach Voraussetzung positiven) Eigenwerte der Informationsmatrix C . Dann ist das ϕ_p -Kriterium für $p \in [-\infty, 1]$ definiert durch

$$\phi_p(C) = \begin{cases} (\frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \lambda_i^p)^{1/p}, & p \in (-\infty, 0) \text{ oder } p \in (0, 1), \\ (\prod_{i=1}^s \lambda_i)^{1/s}, & p = 0, \\ \min_{i=1}^s \lambda_i, & p = -\infty. \end{cases}$$

Ein Versuchsplan, der $\phi_p(C)$ maximiert, heißt ϕ_p -optimal für $K^\top \boldsymbol{\theta}$. Die D -Optimalität entspricht also der ϕ_0 -Optimalität, die E -Optimalität der $\phi_{-\infty}$ -Optimalität und die A -Optimalität der ϕ_{-1} -Optimalität. Die Bezeichnungen ϕ_0 und $\phi_{-\infty}$ sind wegen

$$\lim_{p \rightarrow 0} \phi_p(C) = \phi_0(C), \quad \lim_{p \rightarrow -\infty} \phi_p(C) = \phi_{-\infty}(C)$$

gerechtfertigt. Die ϕ_p -Optimalität wurde von Kiefer (1974) betrachtet, siehe auch Pukelsheim (1980, 1993).

2.1.5 Die G -Optimalität

Betrachten wir den Fall $K = I_k$. Hat man den Parameter $\boldsymbol{\theta}$ durch $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ geschätzt, so erhält man damit auch eine Schätzung des Mittelwertes $f(x)^\top \boldsymbol{\theta}$ an einer beliebigen Stelle $x \in \mathcal{E}$ durch $f(x)^\top \hat{\boldsymbol{\theta}}$. Diese Schätzung hat die Varianz $d(x, \xi) := f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x)$, $\xi \in \Xi_n \cap \mathcal{S}_n(I_k)$. Unter Verwendung des Minimax-Prinzips ist es daher sinnvoll, einen Versuchsplan zu suchen, der das Maximum von $d(x, \xi)$, $x \in \mathcal{E}$, minimiert. Äquivalent dazu können wir einen Versuchsplan suchen, der

$$\psi(M(\xi)) := 1 / \left(\sup_{x \in \mathcal{E}} f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x) \right)$$

maximiert. Dieses Kriterium wird bereits von Smith (1918) verwendet. Später erhielt es den Namen G -Optimalität (*global optimality*).

2.1.6 Die \mathbf{c} -Optimalität

Im Falle von $s = 1$, also $K = \mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$ benötigen wir keine Kriterienfunktionen. Die Informationsmatrix

$$(\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{c})^{-1}$$

ist eine reelle Zahl. Ein Versuchsplan der diese Information maximiert, wird \mathbf{c} -optimal genannt.

2.2 Approximative und asymptotische Versuchspläne

Sei $\psi : PD(s) \rightarrow \mathbb{R}$ eine Kriterienfunktion und sei $\Psi : \mathcal{S}_n(K) \rightarrow \mathbb{R}$ die Verknüpfung von ψ und $\xi \rightarrow (K^\top M(\xi) - K)^{-1}$ (wobei $M(\xi) = \int_{\mathcal{E}} f f^\top d\xi$), also

$$\Psi : \mathcal{S}_n(K) \rightarrow \mathbb{R}, \quad \xi \mapsto \psi((K^\top M(\xi) - K)^{-1}). \quad (2.1)$$

Wir bezeichnen Ψ als *Optimalitätskriterium*.

Die in der Versuchsplanung zu lösende Aufgabe ist:

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi(\xi) \text{ in der Menge } \mathcal{S}_n(K) = \{\xi \in \Xi_n \mid [K] \subseteq [M(\xi)]\}. \quad (2.2)$$

Bei der mathematischen Analyse dieses Problems bereitet die diskrete Natur der Menge Ξ_n Probleme. Insbesondere macht Schwierigkeiten, dass Ξ_n nicht konvex ist. Daher geht man in der Versuchsplanung oft zu leichter handhabbaren Mengen über.

Die in der Versuchsplanung übliche Vorgehensweise besteht aus folgenden drei Schritten:

- Nehme weitere Wahrscheinlichkeitsmaße zu Ξ_n hinzu, bis diese Obermenge von Ξ_n günstige mathematische Eigenschaften besitzt („Übertragung auf eine Obermenge“).
- Löse das Maximierungsproblem (2.2) in dieser Obermenge von Ξ_n .
- Suche dann ein $\xi_n \in \Xi_n$, welches das optimale (ein optimales) ξ in dieser Obermenge approximiert („Rückübertragung auf Ξ_n “).

In den folgenden beiden Abschnitten 2.2.1 und 2.2.2 werden wir solche Obermengen auf zwei unterschiedliche Arten konstruieren und angeben, wie eine geeignete Rückübertragung von Wahrscheinlichkeitsmaßen der Obermenge auf Wahrscheinlichkeitsmaße aus Ξ_n aussehen kann.

2.2.1 Approximative Versuchspläne

Das Hauptproblem bei der Untersuchung von (2.2) ist, dass Ξ_n nicht konvex ist. Nimmt man deshalb zu den jeweiligen Elementen aus Ξ_n (endliche) Konvexkombinationen der Form

$$\sum_{i=1}^m p_i \xi^{(i)}, \quad m \in \mathbb{N}, p_i > 0, \sum_{i=1}^m p_i = 1, \xi^{(i)} \in \Xi_n$$

hinzu, erhält man eine konvexe Menge von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf \mathcal{E} , die man, wie leicht zu sehen ist, in der folgenden Form schreiben kann:

$$\tilde{\Xi} := \{\xi \mid \xi \text{ ist Wahrscheinlichkeitsmaß auf } \mathcal{E} \text{ mit endlichem Träger}\}.$$

Offensichtlich gilt für jedes $n \in \mathbb{N}$: $\Xi_n \subseteq \tilde{\Xi}$. Der Unterschied zwischen Ξ_n und $\tilde{\Xi}$ liegt darin, dass die Gewichte der Wahrscheinlichkeitsmaße in Ξ_n Vielfache von $\frac{1}{n}$ sind, während bei den Maßen in $\tilde{\Xi}$ alle reellen Gewichte im Intervall $[0, 1]$ vorkommen können. Es ist daher naheliegend, dass der Unterschied zwischen den beiden Mengen umso unbedeutender wird, je größer n ist.

Als nächster Schritt, dem spätere Kapitel dieser Arbeit gewidmet sind, steht nun die Lösung der Aufgabe

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi(M(\xi)) \text{ in der Menge } \tilde{\mathcal{S}}(K) \quad (2.3)$$

an. Hierbei schreiben wir $M(\xi) := \int_{\mathcal{E}} f(t)f(t)^\top \xi(dt)$ auch für $\xi \in \tilde{\Xi}$ und definieren analog zur Definition von $\mathcal{S}_n(K)$ die Menge der Versuchspläne aus $\tilde{\Xi}$, für die $K^\top \theta$ identifizierbar ist, durch

$$\tilde{\mathcal{S}}(K) := \{\xi \in \tilde{\Xi} \mid [K] \subseteq [M(\xi)]\}.$$

Hat man eine Lösung ξ^* der Aufgabe (2.3) in $\tilde{\Xi}$ gefunden, so muss man ein $\xi_n \in \Xi_n$ suchen, das dieses ξ^* approximiert. Hierzu verwendet man intuitiv naheliegende Rundungsverfahren $\tilde{R}_n : \tilde{\Xi} \rightarrow \Xi_n$. In den allermeisten Fällen wird eine solche Rundung der Lösung ξ^* von (2.3) ein befriedigendes Ergebnis $\xi_n^* = \tilde{R}_n(\xi^*)$ liefern, d.h. $\Psi(M(\tilde{R}_n(\xi^*)))$ ist nur unwesentlich kleiner als $\max\{\Psi(M(\xi)) \mid \xi \in \mathcal{S}_n(K)\}$. Es gilt

$$\max\{\Psi(M(\xi)) \mid \xi \in \mathcal{S}_n(K)\} - \Psi(M(\tilde{R}_n(\xi^*))) \leq \Psi(M(\xi^*)) - \Psi(M(\tilde{R}_n(\xi^*))). \quad (2.4)$$

Daher sind Abschätzungen nach oben der rechten Seite in Ungleichung (2.4) auch eine obere Schranke der eigentlich interessierenden linken Seite in (2.4).

Ein effizientes Rundungsverfahren $\tilde{R}_n : \tilde{\Xi} \rightarrow \Xi_n$, wird in Pukelsheim (1993), Kapitel 12, angegeben und theoretisch untersucht, siehe hierzu auch Pukelsheim und Rieder (1992). Es werden dort Abschätzungen für dieses Rundungsverfahren angegeben, aus denen insbesondere folgt, dass

$$|\Psi(M(\tilde{R}_n(\xi))) - \Psi(M(\xi))| = O\left(\frac{1}{n}\right) \text{ für } n \rightarrow \infty,$$

wobei für nichtnegative Folgen a_n, b_n gilt $a_n = O(b_n) : \iff \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{b_n} < \infty$. Unter weiteren Voraussetzungen (Differenzierbarkeitsvoraussetzungen an f), ist die Konvergenzgeschwindigkeit sogar $O(1/n^2)$.

Versuchspläne gefordert. Es genügt aber, die starke Konvergenz zu fordern. Es sei dabei daran erinnert, dass wir in Voraussetzung 1.4 b) die Beschränktheit von f gefordert haben. Eine ausführliche Betrachtung der starken Konvergenz ist in Bader (1997) zu finden.

Wir erweitern nun die Menge Ξ_n , indem wir zunächst die Versuchspläne für alle $n \in \mathbb{N}$ hinzunehmen, d.h. wir betrachten $\cup_{n=1}^{\infty} \Xi_n$ und nehmen auch „asymptotische Versuchspläne“ hinzu, die als Grenzwert von Folgen $(\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$, $\xi_n \in \Xi_n$, anfallen. Wir erhalten die (konvexe) Menge

$$\Xi := \{\xi \mid \xi \text{ ist beliebiges Wahrscheinlichkeitsmaß auf } \mathcal{E}\}.$$

Offensichtlich gilt für jedes $n \in \mathbb{N}$:

$$\Xi_n \subseteq \tilde{\Xi} \subseteq \Xi.$$

In dieser Arbeit betrachten wir auf Ξ die von der starken Konvergenz (2.5) induzierte Metrik. Die Menge der Versuchspläne aus Ξ , für die $K^\top \theta$ identifizierbar ist, sei $\mathcal{S}(K)$, also

$$\mathcal{S}(K) = \{\xi \in \Xi \mid [K] \subseteq [M(\xi)]\}.$$

Im Folgenden werden wir wegen $\mathcal{S}_n(K) = \Xi_n \cap \mathcal{S}(K)$, $\tilde{\mathcal{S}}(K) = \tilde{\Xi} \cap \mathcal{S}(K)$ nur noch $\mathcal{S}(K)$ und nicht mehr $\mathcal{S}_n(K)$, $\tilde{\mathcal{S}}(K)$ benutzen.

Wenn man nun ein Optimierungsproblem in Ξ löst, d.h.

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi \left(\int_{\mathcal{E}} f f^\top d\xi \right) \text{ in der Menge } \mathcal{S}(K) \quad (2.6)$$

und als Lösung ein $\xi \in \Xi$ erhält, so muss man ξ in Ξ_n approximieren, um es in der Praxis anwenden zu können. Für Wahrscheinlichkeitsmaße aus $\Xi \setminus \tilde{\Xi}$ sind die meisten Rundungsverfahren (auf die im vorherigen Abschnitt verwiesen wurde) jedoch nicht anwendbar. Wir stellen daher im Folgenden ein Approximationsverfahren $R_n : \Xi \rightarrow \Xi_n$ vor, das (für praktische Situationen) unter sehr schwachen Voraussetzungen eine Konvergenzrate von $O(\frac{1}{n})$ aufweist.

Eine gute Möglichkeit, einen gegebenen Versuchsplan $\xi \in \Xi$ für festes $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, durch einen Versuchsplan $\xi_n \in \Xi_n$ anzunähern, ist die folgende Konstruktion: Sei F_0 die maßdefinierende Funktion von ξ , Q_0 die rechtsstetige Umkehrfunktion von F_0 . Definiere

$$\xi_n := R_n(\xi) := \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \delta_{Q_0(i/(n-1))}. \quad (2.7)$$

Dass ξ_n auch bezüglich des Optimalitätskriteriums nahe bei ξ liegt (zumindest für hinreichend großes n), sagt der folgende Satz 2.2. Zuvor definieren wir noch eine Eigenschaft, die viele Optimalitätskriterien aufweisen.

Definition 2.1 Sei

$$NND(k) := \{A \in \mathbb{R}^{k \times k} \mid A \text{ symmetrisch, } A \text{ nichtnegativ definit}\}.$$

Ein Optimalitätskriterium $\tilde{\Psi} : (NND(k), \|\cdot\|_{\max}) \rightarrow (\mathbb{R}, |\cdot|)$ heißt lokal Lipschitz-stetig (der Ordnung 1) im Punkt $A \in NND(k)$, wenn Konstanten $\epsilon = \epsilon(A) > 0$ und $c = c(A) > 0$ existieren, so dass aus $\|B - A\|_{\max} < \epsilon$ folgt: $|\tilde{\Psi}(B) - \tilde{\Psi}(A)| < c \cdot \|B - A\|_{\max}$. Dabei ist $\|\cdot\|_{\max}$ die Maximumsnorm auf $\mathbb{R}^{k \times k}$.

Ein Optimalitätskriterium Ψ , wie wir es in (2.1) eingeführt haben, ist genau genommen eine Abbildung von $\mathcal{S}_n(K)$ nach \mathbb{R} . Wir haben in Definition 2.1 eine Funktion $\tilde{\Psi} : NND(k) \rightarrow \mathbb{R}$ betrachtet und das Optimalitätskriterium ist durch $\Psi(\xi) = \tilde{\Psi}(M(\xi))$ gegeben. Wir vernachlässigen jedoch diesen Unterschied zwischen Ψ und $\tilde{\Psi}$ und bezeichnen auch $\tilde{\Psi}$ als Optimalitätskriterium.

Satz 2.2 Sei $f : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}^k$ von beschränkter Variation, sei $\xi \in \Xi$ und ξ_n ($n \in \mathbb{N}$) gemäß (2.7) definiert. $\tilde{\Psi}$ sei ein Optimalitätskriterium, das lokal Lipschitz-stetig (der Ordnung 1) im Punkt $M(\xi)$ ist. Dann ist

$$\left| \tilde{\Psi} \left(\int_{\mathcal{E}} ff^{\top} d\xi_n \right) - \tilde{\Psi} \left(\int_{\mathcal{E}} ff^{\top} d\xi \right) \right| = O \left(\frac{1}{n} \right).$$

Beweis: Sei F_n die maßdefinierende Funktion zu ξ_n . Leicht zu sehen ist: $\forall x \in \mathcal{E} : |F_n(x) - F_0(x)| \leq 1/(n-1)$. Unter Verwendung partieller Integration für signierte Maße (siehe z.B. Hewitt und Stromberg (1969), Seite 419) folgt:

$$\begin{aligned} \left\| \int_{\mathcal{E}} ff^{\top} d\xi_n - \int_{\mathcal{E}} ff^{\top} d\xi \right\|_{\max} &= \left\| \int_{\mathcal{E}} ff^{\top} dF_n - \int_{\mathcal{E}} ff^{\top} dF_0 \right\|_{\max} \\ &= \left\| \int_{\mathcal{E}} F_n(x-) ff^{\top}(dx) - \int_{\mathcal{E}} F_0(x-) ff^{\top}(dx) \right\|_{\max}. \end{aligned}$$

Hierbei fassen wir alle Integrale als Maß-Integrale auf und definieren für $G : \mathcal{E} \rightarrow [0, 1]$ das Integral $\int_{\mathcal{E}} G(x) ff^{\top}(dx) := (\int_{\mathcal{E}} G(x) (f_i f_j)(dx))_{i,j=1,\dots,k}$ komponentenweise. Im Folgenden sei für eine Funktion $g : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ von beschränkter Variation mit $g = g_1 - g_2$ für monoton wachsende Funktionen $g_1, g_2 : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ definiert: $|g|(dx) = g_1(dx) + g_2(dx)$. Mit dieser Schreibweise gilt $V(g) = \int_{\mathcal{E}} 1 |g|(dx)$, wobei $V(g)$ die Variationsnorm von g bezeichnet. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \left\| \int_{\mathcal{E}} F_n(x-) ff^{\top}(dx) - \int_{\mathcal{E}} F_0(x-) ff^{\top}(dx) \right\|_{\max} &= \left\| \int_{\mathcal{E}} F_n(x-) - F_0(x-) ff^{\top}(dx) \right\|_{\max} \\ &\leq \left\| \int_{\mathcal{E}} |F_n(x-) - F_0(x-)| |ff^{\top}|(dx) \right\|_{\max} \\ &\leq \frac{1}{n-1} \|V(ff^{\top})\|_{\max} = O \left(\frac{1}{n} \right). \end{aligned}$$

Hierbei ist $V(ff^\top)$ die Matrix, deren (i, j) -te Komponente die Variationsnorm von $f_i f_j$ ist. Die Aussage folgt nun aus der lokalen Lipschitz-Stetigkeit von $\tilde{\Psi}$ in $M(\xi)$. \square

Wann sind nun die Voraussetzungen von Satz 2.2 erfüllt? Betrachten wir einen Versuchsplan $\xi \in \Xi$, so dass $M(\xi) \in PD(k)$ ist. Die Menge der positiv definiten $\mathbb{R}^{k \times k}$ -Matrizen $PD(k)$ sei versehen mit dem euklidischen Skalarprodukt $\langle A, B \rangle_2 := \text{Spur}(A \cdot B)$ und der Norm $\|A\|_2 = \text{Spur}(A^2)^{1/2}$. Für $p > -\infty$ ist $\tilde{\Psi} : PD(k) \rightarrow \mathbb{R}$, $A \mapsto \phi_p((K^\top A^{-1} K)^{-1})$ differenzierbar, siehe Pukelsheim (1993), Seite 179. Dies heißt, dass eine Abbildung $\nabla \tilde{\Psi} : PD(k) \rightarrow PD(k)$ existiert, so dass für alle $A, B \in PD(k)$ gilt:

$$\lim_{B \rightarrow A} \frac{\tilde{\Psi}(B) - \tilde{\Psi}(A) - \langle \nabla \tilde{\Psi}(A), B - A \rangle_2}{\|B - A\|_2} = 0.$$

Zum Differenzierbarkeitsbegriff vgl. man Silvey (1980), Seite 74 oder Rockafellar (1970), Seite 241. Aus der Differenzierbarkeit folgt die lokale Lipschitz-Stetigkeit der Ordnung 1. Daher ist $\tilde{\Psi}(\cdot) = \phi_p((K^\top(\cdot)^{-1}K)^{-1})$, $p > -\infty$, auch lokal Lipschitz-stetig in jedem Punkt $A \in PD(k)$, wobei zu beachten ist, dass die Wahl der Norm ($\|\cdot\|_{\max}$ oder $\|\cdot\|_2$) hier keine Rolle spielt, da $PD(k)$ endlich dimensional ist.

Wie sieht es mit dem G -Kriterium¹ aus? Zu diesem Zweck beweisen wir zunächst ein Lemma.

Lemma 2.3 *Seien $M, N \in \mathbb{R}^{k \times k}$ positiv definit und es gelte $\|M - N\|_{\max} \leq (2\|M^{-1}\|_{\max})^{-1}$. Dann haben wir die Abschätzung*

$$\sup_{x \in \mathcal{E}} \left| f(x)^\top M^{-1} f(x) - f(x)^\top N^{-1} f(x) \right| \leq 2k^2 \cdot \left(\sup_{x \in \mathcal{E}, i=1, \dots, k} |f_i(x)| \right)^2 \cdot \|M^{-1}\|_{\max}^2 \cdot \|M - N\|_{\max}.$$

Beweis: Für beliebige positiv definite Matrizen M, N gilt

$$\begin{aligned} \sup_{x \in \mathcal{E}} \left| f(x)^\top M^{-1} f(x) - f(x)^\top N^{-1} f(x) \right| &= \sup_{x \in \mathcal{E}} \left| f(x)^\top (M^{-1} - N^{-1}) f(x) \right| \\ &= \sup_{x \in \mathcal{E}} \left| \sum_{i,j=1}^k f_i(x) f_j(x) (M^{-1} - N^{-1})_{ij} \right| \\ &\leq k^2 \cdot \sup_{x \in \mathcal{E}, i=1, \dots, k} (f_i(x))^2 \cdot \|M^{-1} - N^{-1}\|_{\max}. \end{aligned}$$

Unter Anwendung des Satzes über die Neumannsche Reihe (siehe z.B. Heuser (1992), S. 109) hat

¹Man beachte, dass das G -Kriterium nicht differenzierbar ist. Man vgl. hierzu z.B. Wong (1993) oder betrachte $\mathcal{E} = [-1, 1]$, $f(x) = (1, x)^\top$ und den Punkt $M(\xi) = M((\delta_{-1} + \delta_1)/2)$.

man für M, N mit $\|M - N\|_{\max} \leq (2\|M^{-1}\|_{\max})^{-1}$:

$$\begin{aligned}
\|M^{-1} - N^{-1}\|_{\max} &= \|(I - (I - M^{-1}(M - N))^{-1})M^{-1}\|_{\max} \\
&= \left\| \left(\sum_{i=1}^{\infty} (M^{-1}(M - N))^i \right) M^{-1} \right\|_{\max} \\
&\leq \|M^{-1}\|_{\max} \cdot \left(\sum_{i=1}^{\infty} (\|M^{-1}\|_{\max} \cdot \|M - N\|_{\max})^i \right) \\
&= \|M^{-1}\|_{\max}^2 \cdot \|M - N\|_{\max} \cdot \left(\sum_{i=0}^{\infty} (\|M^{-1}\|_{\max} \cdot \|M - N\|_{\max})^i \right) \\
&\leq 2 \cdot \|M^{-1}\|_{\max}^2 \cdot \|M - N\|_{\max}.
\end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung. □

Wegen

$$\left| \sup_{x \in \mathcal{E}} f(x)^\top M^{-1} f(x) - \sup_{x \in \mathcal{E}} f(x)^\top N^{-1} f(x) \right| \leq \sup_{x \in \mathcal{E}} \left| f(x)^\top M^{-1} f(x) - f(x)^\top N^{-1} f(x) \right| \quad (2.8)$$

folgt aus Lemma 2.3 und der Beschränktheit von f , dass das G -Kriterium $\psi : PD(k) \rightarrow \mathbb{R}, M \mapsto 1/(\sup_{x \in \mathcal{E}} f(x)^\top M^{-1} f(x))$ lokal Lipschitz-stetig in jedem $M \in PD(k)$ ist

Wir verwenden nun Lemma 2.3 zum Beweis einer Stetigkeitsaussage, die später (in Kapitel 4) noch eine wichtige Rolle spielen wird. Dafür definieren wir

$$\Xi^+ := \{\xi \in \Xi \mid M(\xi) \in PD(k)\} = \mathcal{S}(I_k).$$

Satz 2.4 Sei Ξ^+ mit einer Metrik versehen, die die starke Konvergenz (2.5) induziert und die Menge $C[\mathcal{E}]$ der stetigen Funktionen auf \mathcal{E} mit der Supremumsmetrik $\|u - v\| = \sup_{t \in \mathcal{E}} |u(t) - v(t)|$. Dann sind die Abbildungen

$$\begin{cases} \Xi^+ & \rightarrow & C[\mathcal{E}] \\ \xi & \mapsto & d(x, \xi) := f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x) \end{cases}$$

und (für $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$ fest)

$$\begin{cases} \Xi^+ & \rightarrow & C[\mathcal{E}] \\ \xi & \mapsto & c(x, \xi) := f(x)^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{c} \end{cases}$$

stetig.

Beweis: Wir versehen den Raum der positiv definiten $\mathbb{R}^{k \times k}$ -Matrizen mit der Maximumsnorm. Aus der Beschränktheit von $ff^\top : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}^{k \times k}$ folgt die Stetigkeit von $\xi \mapsto M(\xi) = \int_{\mathcal{E}} ff^\top d\xi$.

Nach Lemma 2.3 ist die Abbildung $M \mapsto f(x)^\top M^{-1} f(x)$ stetig. Die Abbildung $\xi \mapsto d(x, \xi)$ ist eine Verknüpfung dieser beiden Abbildungen und daher stetig. Analog folgt die Stetigkeit von $\xi \mapsto c(x, \xi)$, da auch Lemma 2.3 geeignet modifiziert werden kann. \square

2.2.3 Die Mengen $\tilde{\Xi}$ und Ξ

In diesem Abschnitt wollen wir auf die Unterscheidung von $\tilde{\Xi}$ und Ξ eingehen. Wir werden im Folgenden sehen, dass diese Unterscheidung für das Maximierungsproblem (2.3) von untergeordneter Bedeutung ist. Es gibt nämlich zu jedem $\xi \in \Xi$ ein $\tilde{\xi} \in \tilde{\Xi}$, das dieselbe Informationsmatrix besitzt.

Für uns ist die Unterscheidung von $\tilde{\Xi}$ und Ξ dennoch wichtig: Wir werden in Kapitel 3 das Problem (2.3) modifizieren, indem wir über eine Teilmenge von Ξ maximieren, die disjunkt zu $\tilde{\Xi}$ ist. Daher werden wir in dieser Arbeit stets das Optimierungsproblem in der Obermenge Ξ von Ξ_n betrachten (oder später auch in Teilmengen $\Upsilon \subseteq \Xi$).

Lemma 2.5 Sei $\mathcal{C} \subseteq \mathbb{R}^m$ konvex, η ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R}^m mit $\eta(\mathcal{C}) = 1$ und $\mathbf{z} = \int \mathbf{y} \eta(d\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^m$. Dann gilt $\mathbf{z} \in \mathcal{C}$.

Beweis: Der Beweis kann mit Induktion über m geführt werden. Der Induktionsanfang für $m = 1$ ist klar, siehe Elstrodt (1996), Seite 220. Der Induktionsschritt folgt unter Anwendung des Trennungssatzes, siehe Lemma 4.12 a der Vorlesung Statistische Entscheidungstheorie, WS 1994/95, Universität Karlsruhe. \square

Lemma 2.6 Die Mengen der von $\tilde{\Xi}$ und Ξ erzeugten Momentenmatrizen stimmen überein: $M(\tilde{\Xi}) = M(\Xi)$.

Beweis: „ \supseteq “: Sei $\xi \in \Xi$ und η das Bildmaß von ξ unter der Abbildung $\mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}^{k \times k}$, $x \mapsto f(x)f(x)^\top$. Es gilt

$$M(\xi) = \int_{\mathcal{E}} f(x)f(x)^\top \xi(dx) = \int \mathbf{y} \eta(d\mathbf{y}).$$

Wegen $\eta(\{f(x)f(x)^\top \mid x \in \mathcal{E}\}) = 1$ folgt $\eta(M(\tilde{\Xi})) = 1$. Da $M(\tilde{\Xi})$ konvex ist, können wir Lemma 2.5 anwenden und erhalten $M(\xi) \in M(\tilde{\Xi})$.

„ \subseteq “: Folgt aus $\tilde{\Xi} \subseteq \Xi$. \square

In Pukelsheim (1993), Seite 409-410, wird Lemma 2.6 nicht mit Lemma 2.5 sondern mit Hilfe der Kompaktheit von $M(\tilde{\Xi})$ nachgewiesen (vgl. Lemma 2.7), also ohne Verwendung des Trennungssatzes. Es ist daher hervorzuheben, dass $M(\tilde{\Xi}) = M(\Xi)$ auch dann gilt, wenn $M(\tilde{\Xi})$ nicht kompakt ist.

Beim „Satz von Carathéodory“, siehe Abschnitt 2.3, werden wir sehen, dass sogar $M(\Xi) = M(\tilde{\Xi}) = M(\{\xi \in \tilde{\Xi} \mid \xi \text{ hat Masse in höchstens } n \text{ Punkten}\})$ für ein geeignetes n gilt.

Die Menge $\tilde{\Xi}$ wird von Elfving (1952) und Kiefer (1959) motiviert und verwendet. Kiefer (1959) erwähnt dabei die Möglichkeit, auch Ξ zu betrachten. Er begründet die Verwendung von $\tilde{\Xi}$ statt Ξ damit, dass die Maße mit endlichem Träger die einzigen Maße seien, die „practically meaningful or necessary to consider“ sind. Smith (1918) benutzt Ξ , ohne dies näher zu begründen. In den modernen Lehrbüchern zur Versuchsplanung wird in einigen $\tilde{\Xi}$, in anderen Ξ motiviert und verwendet. Zum Beispiel benutzt Pukelsheim (1993) die Menge $\tilde{\Xi}$. Wie bereits erwähnt, weist er jedoch auf Seite 409-410 darauf hin, dass $M(\tilde{\Xi}) = M(\Xi)$ gilt.

Im Abschnitt 2.4 werden wir Äquivalenztheoreme angeben. Solange sich die Aussage nur auf die Informationsmatrix $M(\xi)$ bezieht (wie z.B. bei Satz 2.12), spielt es also nach Lemma 2.6 keine Rolle, ob man $\tilde{\Xi}$ oder Ξ betrachtet. Bezieht sich die Aussage dagegen auf den Versuchsplan ξ selbst (wie z.B. bei Korollar 2.14), macht es einen Unterschied, ob $\tilde{\Xi}$ oder Ξ betrachtet wird. Dann kann ein in der Literatur angegebene Beweis für $\tilde{\Xi}$ nicht für Ξ direkt übernommen werden.

Lemma 2.7 *Ist f eine stetige Regressionsfunktion, so ist $M(\tilde{\Xi})$ (und damit auch $M(\Xi)$) kompakt.*

Beweis: Da \mathcal{E} kompakt und f stetig ist, ist $\{f(x)f(x)^\top \mid x \in \mathcal{E}\}$ kompakt. Weil $M(\tilde{\Xi})$ die konvexe Hülle von $\{f(x)f(x)^\top \mid x \in \mathcal{E}\}$ ist, ist $M(\tilde{\Xi})$ kompakt, siehe z.B. Rockafellar (1970), Seite 158. \square

Beispiel 2.8 *Die Stetigkeitsvoraussetzung in Lemma 2.7 ist notwendig. Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$, $f(x) = x \cdot \mathbf{1}_{(-1,1)}(x)$, $x \in \mathcal{E}$, also $k = 1$. Dann gilt*

$$M(\Xi) = M(\tilde{\Xi}) = \text{Konv}(\{f(x)^2 \mid x \in \mathcal{E}\}) = \text{Konv}([0, 1]) = [0, 1),$$

wobei $\text{Konv}(\mathcal{C})$ die konvexe Hülle einer Menge \mathcal{C} angibt. Also ist $M(\tilde{\Xi})$ nicht kompakt.

2.2.4 Asymptotische Versuchspläne bei Einschränkungen in der Versuchspunktwahl

In der Praxis gibt es oft Einschränkungen, die nicht die Auswahl jedes Versuchsplans aus Ξ_n zulassen. In Kapitel 3 werden wir auf spezielle durch die Praxis motivierte Einschränkungen eingehen. Wir

wollen hier zunächst für eine allgemeine Teilmenge Υ_n von Ξ_n beschreiben, was bei der Übertragung auf eine geeignete Obermenge und bei der Rückübertragung von der Obermenge auf Υ_n zu beachten ist. Statt der direkten Lösung des Problems

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi(M(\xi)) \text{ in der Menge } \Upsilon_n \cap \mathcal{S}(K) \quad (\Upsilon_n \subseteq \Xi_n) \quad (2.9)$$

gehen wir analog zu vorher in drei Schritten vor.

Im ersten Schritt bilden wir Υ als die Menge aller Grenzwerte von Folgen $(\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$, $\xi_n \in \Upsilon_n$. Offensichtlich ist $\Upsilon \subseteq \Xi$. Im zweiten Schritt versuchen wir das Maximierungsproblem

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi(M(\xi)) \text{ in der Menge } \Upsilon \cap \mathcal{S}(K) \quad (\Upsilon \subseteq \Xi) \quad (2.10)$$

zu lösen. Dieser Schritt ist für die in Kapitel 3 motivierten Υ der Hauptbestandteil dieser Arbeit. Er wird in Kapitel 3-5 durchgeführt. Im dritten Schritt übertragen wir die erhaltene Lösung durch ein Approximationsverfahren $R_n : \Xi \rightarrow \Xi_n$. Eine notwendige Eigenschaft, die das Verfahren besitzen sollte, ist hierbei $R_n(\Upsilon) \subseteq \Upsilon_n$.

2.3 Der Satz von Carathéodory

In diesem Abschnitt stellen wir den Satz von Carathéodory und seine Konsequenz für die Versuchsplanung vor.

Satz 2.9 (von Carathéodory) *Sei $\mathcal{C} \subseteq \mathbb{R}^m$ und $\mathbf{c} \in \text{Konv}(\mathcal{C})$. Dann kann man \mathbf{c} als Linearkombination von höchstens $m+1$ Elementen aus \mathcal{C} darstellen. Wenn \mathbf{c} auf dem Rand von $\text{Konv}(\mathcal{C})$ liegt, genügen m statt $m+1$ Punkte.*

Beweis: siehe z.B. Silvey (1980), Seite 72-73. □

Wir können den Satz von Carathéodory auf die Teilmenge $\mathcal{C} = \{f(x)f(x)^\top \mid x \in \mathcal{E}\}$ der symmetrischen $\mathbb{R}^{k \times k}$ -Matrizen anwenden. Der Raum der symmetrischen $\mathbb{R}^{k \times k}$ -Matrizen hat die Dimension $m = k(k+1)/2$. Wegen $M(\Xi) = \text{Konv}(\{f(x)f(x)^\top \mid x \in \mathcal{E}\}) \subseteq \mathbb{R}^{k \times k}$ und Lemma 2.6 folgt dann:

Korollar 2.10 *Jedes $M \in M(\Xi) (\subseteq \mathbb{R}^{k \times k})$ lässt sich als Linearkombination aus höchstens $\frac{k(k+1)}{2} + 1$ Punkten darstellen, d.h. es gibt $x_i \in \mathcal{E}$ und $p_i \geq 0$, $i = 1, \dots, k(k+1)/2 + 1$ mit $\sum p_i = 1$ und*

$$M = M \left(\sum_{i=1}^{k(k+1)/2+1} p_i \delta_{x_i} \right).$$

2.4 Äquivalenztheoreme

2.4.1 Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität

In Äquivalenztheoremen werden Bedingungen angegeben, wann ein Versuchsplan optimal bezüglich eines Optimalitätskriteriums ist. Sie dienen dazu bei vorliegendem Versuchsplan ξ nachzuweisen, dass ξ optimal bzw. nicht optimal ist.

In der Literatur werden in der Regel stetige Regressionsfunktionen betrachtet. Als Konsequenz sind die Mengen $M(\Xi)$ bzw. $M(\Upsilon)$ in denen das Optimierungsproblem gelöst werden soll, kompakt. Wir haben diese Voraussetzung jedoch nicht gemacht. Daher können wir die in der Literatur angegebenen Äquivalenztheoreme nicht ohne weiteres übernehmen.

Wir geben als nächstes ein grundlegendes Äquivalenztheorem für die kompakten Mengen $M(\Upsilon)$ an. Dieses Äquivalenztheorem benutzen wir dann im Beweis von Satz 2.12, der das Äquivalenztheorem auf Mengen Υ verallgemeinert, für die $M(\Upsilon)$ beschränkt aber nicht notwendigerweise abgeschlossen ist.

Wir formulieren das nachfolgende Äquivalenztheorem ausnahmsweise mit Momentenmatrizen und nicht mit den Versuchsplänen selbst, da wir diese Version im Beweis von Satz 2.12 benötigen.

Satz 2.11 (Äquivalenztheoreme für ϕ_p -Optimalität in kompakten Mengen $\mathcal{M} \subseteq M(\Xi)$)

Sei $p \in (-\infty, 1)$ und $\mathcal{M} \subseteq M(\Xi)$ konvex und kompakt und $\mathcal{M} \cap M(\mathcal{S}(K)) \neq \emptyset$. $M \in \mathcal{M}$ ist ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in \mathcal{M} genau dann, wenn $M \in M(\mathcal{S}(K))$ und eine verallgemeinerte Inverse G von M existiert, so dass

$$\forall \tilde{M} \in \mathcal{M} : \quad \text{Spur} \tilde{M} G K (K^\top M^- K)^{-p-1} K^\top G \leq \text{Spur} (K^\top M^- K)^{-p}. \quad (2.11)$$

Ein solches ϕ_p -optimales $M \in \mathcal{M}$ existiert stets.

Beweis: Siehe Pukelsheim (1993), S.178f. Es sei daran erinnert, dass es nach Lemma 2.6 in diesem Fall keine Rolle spielt, dass Pukelsheim (1993) die Menge $\tilde{\Xi}$ statt Ξ betrachtet, da Satz 2.12 nur eine Aussage über die Momentenmatrizen macht. Da es sich nur um eine Aussage über Momentenmatrizen handelt, benötigt Pukelsheim (1993) für den Beweis des Satzes auch keine Voraussetzungen an f . Er setzt lediglich voraus, dass $\mathcal{M} \subseteq NND(k)$ eine kompakte und konvexe Menge ist (Seite 170). Die Existenz des ϕ_p -optimalen M folgt aus Pukelsheim (1993), Seite 174. \square

Das folgende Äquivalenztheorem (zur ϕ_p -Optimalität in Υ für $K^\top \theta$) bildet unseren Ausgangspunkt. Wir werden es später in verschiedene Richtungen spezialisieren (spezielles ϕ_p , spezielles Υ , spezielles K).

Satz 2.12 (Allgemeines Äquivalenztheoreme für ϕ_p -Optimalität in $\Upsilon \subseteq \Xi$)

Sei $p \in (-\infty, 1)$, $\Upsilon \subseteq \Xi$ konvex mit $\Upsilon \cap \mathcal{S}(K) \neq \emptyset$ und $\xi \in \Upsilon$. ξ ist ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in Υ genau dann, wenn $\xi \in \mathcal{S}(K)$ und eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ existiert, so dass

$$\forall \eta \in \Upsilon : \quad \text{Spur} M(\eta) G K (K^\top M(\eta)^- K)^{-p-1} K^\top G \leq \text{Spur} (K^\top M(\xi)^- K)^{-p}. \quad (2.12)$$

Beweis: „ \Rightarrow “: Sei ξ ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in Υ . Formuliert mit Momentenmatrizen heißt dies: $M := M(\xi)$ ist ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in $\mathcal{M} := M(\Upsilon \cap \mathcal{S}(K))$. Die Menge $\mathcal{S}(K)$ ist konvex, vergleiche Pukelsheim (1993), Seite 64. Also ist auch $\Upsilon \cap \mathcal{S}(K)$ und schließlich \mathcal{M} konvex. $\overline{\mathcal{M}}$ bezeichne den Abschluss und $\text{ri}\mathcal{M}$ das relative Innere von \mathcal{M} (zur Definition des relativen Inneren einer Menge siehe z.B. Webster (1994), Seite 37). Wir betrachten nun das Optimalitätsproblem auf $\overline{\mathcal{M}}$. Nach Satz 2.11 existiert ein $M_0 \in \overline{\mathcal{M}}$, das ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in $\overline{\mathcal{M}}$ ist. Die Menge $\mathcal{M} \neq \emptyset$ ist konvex und beschränkt. Nach Webster (1994), Theorem 2.3.1 folgt aus $\mathcal{M} \neq \emptyset$ auch $\text{ri}\mathcal{M} \neq \emptyset$. Sei $M_1 \in \text{ri}\mathcal{M}$ und $M_n := \frac{n-1}{n}M_0 + \frac{1}{n}M_1$, $n \geq 2$. Nach Webster (1994), Theorem 2.3.4 folgt $M_n \in \text{ri}\mathcal{M}$, also insbesondere $M_n \in \mathcal{M}$, $n \in \mathbb{N}$. Außerdem strebt M_n auf einer Geraden gegen M_0 . Nach Pukelsheim (1993), Seite 76-79, folgt

$$(K^\top M_n^- K)^{-1} \rightarrow (K^\top M_0^- K)^{-1} \quad (2.13)$$

und wegen der Stetigkeit von ϕ_p gilt

$$\phi_p((K^\top M_n^- K)^{-1}) \rightarrow \phi_p((K^\top M_0^- K)^{-1}).$$

Da M ϕ_p -optimal in \mathcal{M} ist, erhält man damit

$$\phi_p((K^\top M^- K)^{-1}) = \phi_p((K^\top M_0^- K)^{-1})$$

und sieht, dass $M := M(\xi)$ ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in $\overline{\mathcal{M}}$ ist. Mit Satz 2.11 folgt dann die Behauptung.

„ \Leftarrow “: Es existiere eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ mit

$$\forall \tilde{M} \in \mathcal{M} := M(\Upsilon) : \quad \text{Spur} \tilde{M} G K (K^\top \tilde{M}(\xi)^- K)^{-p-1} K^\top G \leq \text{Spur} (K^\top M(\xi)^- K)^{-p}.$$

Sei $\tilde{M}_0 \in \overline{\mathcal{M}} \setminus \mathcal{M}$. Dann existiert eine Folge $\tilde{M}_n \in \mathcal{M}$ mit $\tilde{M}_n \rightarrow \tilde{M}_0$. Da die Abbildung $A \mapsto \text{Spur} AB$ für festes $B \in \text{NND}(s)$ stetig auf $\text{NND}(s)$ ist, folgt

$$\forall \tilde{M} \in \overline{\mathcal{M}} : \quad \text{Spur} \tilde{M} G K (K^\top \tilde{M}(\xi)^- K)^{-p-1} K^\top G \leq \text{Spur} (K^\top M(\xi)^- K)^{-p},$$

also mit Satz 2.11 die Behauptung. \square

Eine Umformulierung von Satz 2.12 wird in folgendem Korollar angegeben:

Korollar 2.13 (Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität in $\Upsilon \subseteq \Xi$) Sei $p \in (-\infty, 1)$, $\Upsilon \subseteq \Xi$ konvex mit $\Upsilon \cap \mathcal{S}(K) \neq \emptyset$ und $\xi \in \Xi$. ξ ist ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ in Υ genau dann, wenn $\xi \in \mathcal{S}(K)$ und eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ existiert, so dass für

$$N := GK(K^\top M(\xi)^- K)^{-p-1} K^\top G$$

gilt

$$\forall \eta \in \Upsilon : \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\eta \leq \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi. \quad (2.14)$$

Beweis: Sei $\eta \in \Upsilon$ beliebig. Dann gilt

$$\begin{aligned} \text{Spur} M(\eta) GK(K^\top M(\xi)^- K)^{-p-1} K^\top G &= \text{Spur} M(\eta) N \\ &= \text{Spur} \int_{\mathcal{E}} f(y) f(y)^\top \eta(dy) N = \int_{\mathcal{E}} f(y)^\top N f(y) \eta(dy). \end{aligned}$$

Für $\xi \in \mathcal{S}(K)$ gilt $K^\top G M(\xi) GK = K^\top GK$ und damit

$$\text{Spur}(K^\top M(\xi)^- K)^{-p} = \text{Spur} M(\xi) N = \int_{\mathcal{E}} f(z)^\top N f(z) \xi(dz).$$

\square

Für $\Upsilon = \Xi$ folgt aus Korollar 2.13:

Korollar 2.14 (1.Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität in Ξ) Sei $p \in (-\infty, 1)$ und $\xi \in \Xi$. ξ ist ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ (in Ξ) genau dann, wenn $\xi \in \mathcal{S}(K)$ und eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ existiert, so dass für

$$N := GK(K^\top M(\xi)^- K)^{-p-1} K^\top G$$

gilt

$$\forall y \in \mathcal{E} : f(y)^\top N f(y) \leq \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi. \quad (2.15)$$

Beweis: Zunächst gilt $\Xi \cap \mathcal{S}(K) = \mathcal{S}(K) \neq \emptyset$ wegen Voraussetzung 1.4 c). Damit ist die Voraussetzung von Korollar 2.13 erfüllt. Nun geben wir eine äquivalente Bedingung zu (2.14) an. Wählt man für η speziell die Einpunktmaße in $y \in \mathcal{E}$, so folgt aus Ungleichung (2.14) die Ungleichung (2.15).

Hat man umgekehrt ein beliebiges Maß $\eta \in \Xi$, so folgt durch Integration von (2.15) bezüglich η die Ungleichung (2.14). \square

Schreibt man die Ungleichung (2.15) in der Form

$$\forall y \in \mathcal{E} : \quad f(y)^\top N f(y) \leq \text{Spur}(M(\xi)N), \quad (2.16)$$

so hat man eine Aussage, die sich alleine auf die Momentenmatrizen bezieht und nicht auf den Versuchsplan ξ selbst.

Wir geben in folgendem Korollar 2.18 eine Aussage an, die vom Versuchsplan ξ selbst abhängt. Dieses Äquivalenztheorem lässt sich später in schöner Weise für die Optimalität in der in Kapitel 3 motivierten Menge Υ verallgemeinern, siehe Satz 3.15. Zuvor definieren wir noch den sogenannten essentiellen Träger eines Versuchsplans.

Definition 2.15 Sei $\xi \in \Xi$ ein Versuchsplan auf \mathcal{E} . Der essentielle Träger von ξ ist definiert durch

$$\text{eSupp}(\xi) := \{x \in \mathcal{E} \mid \forall \epsilon > 0 : \xi((x - \epsilon, x]) > 0 \text{ und } \xi([x, x + \epsilon)) > 0\}.$$

Es gilt stets $\text{eSupp}(\xi) \subseteq \text{Supp}(\xi)$ für $\text{Supp}(\xi) = \{x \in \mathcal{E} \mid \forall \epsilon > 0 : \xi((x - \epsilon, x + \epsilon)) > 0\}$.

Beispiel 2.16 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und

$$\xi = \frac{1}{5}(\delta_{-1} + \delta_0 + \delta_{1/2}) + \lambda|_{[0, 1/5]} + \lambda|_{[4/5, 1]},$$

wobei λ das Lebesgue-Maß auf der Borel- σ -Algebra in \mathbb{R} ist. Dann ist

$$\begin{aligned} \text{Supp}(\xi) &= \{-1\} \cup [0, 1/5] \cup \{1/2\} \cup [4/5, 1], \\ \text{eSupp}(\xi) &= \{-1\} \cup [0, 1/5] \cup \{1/2\} \cup (4/5, 1). \end{aligned}$$

Wenn wir nur stetige Regressionsfunktionen f betrachten würden, könnten wir im Folgenden stets statt dem essentiellen Träger $\text{eSupp}(\xi)$ den (kompakten) Träger $\text{Supp}(\xi)$ verwenden. Für die in dieser Arbeit betrachteten Regressionsfunktionen, die in jedem Punkt linksseitig oder rechtsseitig stetig sind, erweist sich aber Definition 2.15 als nützlich.

Lemma 2.17 Sei $\xi \in \Xi$ und $N \in \mathbb{R}^{k \times k}$ beliebig. Dann folgt aus

$$\forall z \in \text{eSupp}(\xi) : \quad f(z)^\top N f(z) \leq \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi \quad (2.17)$$

bereits

$$\forall z \in \text{eSupp}(\xi) : \quad f(z)^\top N f(z) = \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi. \quad (2.18)$$

Beweis: Annahme: Es existiert ein $z_0 \in \text{eSupp}(\xi)$ mit $f(z_0)^\top N f(z_0) < \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi$. Die Funktion f ist in z_0 linksseitig oder rechtsseitig stetig oder z_0 ist ein Randpunkt von \mathcal{E} . Wir betrachten den Fall, dass f in z_0 linksseitig stetig ist oder dass z_0 der linke Randpunkt von \mathcal{E} ist (die anderen Fälle gehen analog). Wegen der linksseitigen Stetigkeit von f gibt es ein $\epsilon > 0$ mit

$$\forall \tilde{z} \in (z_0 - \epsilon, z_0] \cap \mathcal{E} : \quad f(\tilde{z})^\top N f(\tilde{z}) < \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi$$

und wegen $\xi((z_0 - \epsilon, z_0] \cap \mathcal{E}) > 0$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi &= \int_{(z_0 - \epsilon, z_0] \cap \mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi + \int_{\mathcal{E} \setminus (z_0 - \epsilon, z_0]} f^\top N f \, d\xi \\ &< \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi \cdot \xi((z_0 - \epsilon, z_0] \cap \mathcal{E}) + \int_{\mathcal{E} \setminus (z_0 - \epsilon, z_0]} f^\top N f \, d\xi \\ &\leq \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi \cdot \xi((z_0 - \epsilon, z_0] \cap \mathcal{E}) + \int_{\mathcal{E} \setminus (z_0 - \epsilon, z_0]} \left(\int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi \right) d\xi = \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi. \end{aligned}$$

Widerspruch, also gilt (2.18). □

Korollar 2.18 (2.Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität in Ξ) Sei $p \in (-\infty, 1)$ und $\xi \in \Xi$. ξ ist ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$ (in Ξ) genau dann, wenn $\xi \in \mathcal{S}(K)$ und eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ existiert, so dass für

$$N := GK(K^\top M(\xi)^{-p-1} K^\top G$$

gilt

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : \quad f(y)^\top N f(y) \leq f(z)^\top N f(z). \quad (2.19)$$

Beweis: „ \Rightarrow “: Der Versuchsplan ξ sei ϕ_p -optimal für $K^\top \theta$. Mit Korollar 2.14 folgt $\xi \in \mathcal{S}(K)$ und die Ungleichung (2.17). Nach Lemma 2.17 folgt also (2.18) und somit sind (2.15) und (2.19) gleichbedeutend.

„ \Leftarrow “: Integriert man die rechte Seite von (2.19) bezüglich ξ , so sieht man $\forall y \in \mathcal{E} : f(y)^\top N f(y) \leq \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi$, also insbesondere (2.17). Nach Lemma 2.17 gilt also (2.18) und somit folgt aus (2.19) die Aussage (2.15). Korollar 2.14 liefert die Behauptung. □

Bemerkung 2.19 (Transformation des Versuchsbereichs) Bisher haben wir immer einen fest vorgegebenen Versuchsbereich \mathcal{E} (kompaktes Intervall) und eine Regressionsfunktion definiert auf \mathcal{E} betrachtet. Der optimale Versuchsplan ist abhängig davon, welchen Bereich \mathcal{E} man verwendet. Wir

geben nun an, wie man ein Optimierungsproblem, das auf einem Versuchsbereich \mathcal{E} gelöst ist, auf ein anderes Intervall $\tilde{\mathcal{E}}$ übertragen kann.

Sei

$$\tilde{f}(x) := f(vx + w), \quad x \in \tilde{\mathcal{E}} := \frac{1}{v}\mathcal{E} - \frac{w}{v}, \quad v > 0, w \in \mathbb{R},$$

und sei $\xi \in \Xi$ ein Versuchsplan auf \mathcal{E} . Definiere den transformierten Versuchsplan $\tilde{\xi}$ auf $\tilde{\mathcal{E}}$ durch

$$\tilde{\xi}(A) := \xi(vA + w), \quad A \in \mathcal{B}|_{\tilde{\mathcal{E}}}$$

($\mathcal{B}|_{\tilde{\mathcal{E}}}$ = Borel- σ -Algebra eingeschränkt auf $\tilde{\mathcal{E}}$). Aus dem Transformationssatz für Integrale mit der Transformation $t = vx + w$ folgt:

$$\int_{\mathcal{E}} f(t)f(t)^\top \xi(dt) = \int_{\tilde{\mathcal{E}}} f(vx + w)f(vx + w)^\top \tilde{\xi}(dx) = \int_{\tilde{\mathcal{E}}} \tilde{f}(x)\tilde{f}(x)^\top \tilde{\xi}(dx).$$

Man hat also dieselbe Momentenmatrix für das Modell f auf \mathcal{E} und das Modell \tilde{f} auf $\tilde{\mathcal{E}}$. Also: ξ ist ein optimaler Versuchsplan auf \mathcal{E} für das Modell f , genau dann wenn $\tilde{\xi}$ ein optimaler Versuchsplan auf $\tilde{\mathcal{E}}$ für das Modell \tilde{f} ist.

2.4.2 D- und G-Optimalität

In diesem Abschnitt diskutieren wir, unter welchen Voraussetzungen D- und G-Optimalität äquivalent sind.

Ist ein Versuchsplan D-optimal für θ (in Ξ) und hat die Minimalzahl von k Versuchspunkten, so muss auf allen Versuchspunkten jeweils die gleiche Masse $1/k$ liegen. Dies sagt das folgende Lemma:

Lemma 2.20 (Gewichte von D-optimalen Versuchsplänen mit k Versuchspunkten)

Sei $\xi \in \tilde{\Xi} \cap \mathcal{S}(I_k)$ D-optimal für θ in Ξ mit $\xi = \sum_{i=1}^k p_i \delta_{x_i}$, $p_i > 0$, $\sum_{i=1}^k p_i = 1$, $x_i \in \mathcal{E}$. Dann gilt:

$$\forall i = 1, \dots, k : \quad p_i = \frac{1}{k}.$$

Beweis: (Nach Silvey (1980), Seite 42). Es gilt

$$M(\xi) = \sum_{i=1}^k p_i f(x_i)f(x_i)^\top = FPF^\top$$

mit $F = (f(x_1), \dots, f(x_k))$ und $P \in \mathbb{R}^{k \times k}$ die Diagonalmatrix mit Diagonalelementen p_i : $P = \text{diag}(p_1, \dots, p_k)$. Wegen

$$\det M(\xi) = (\det F)^2 \cdot \prod_{i=1}^k p_i.$$

wird die Determinante (für feste Versuchspunkte x_i , also für festes F) maximal, wenn $p_i = 1/k$, $i = 1, \dots, k$. □

Wie bereits in Satz 2.4 eingeführt, schreiben wir

$$d(x, \xi) = f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x), \quad x \in \mathcal{E}, \xi \in \Xi^+ = \{\xi \in \Xi \mid M(\xi) \in PD(k)\} = \mathcal{S}(I_k).$$

Ein Versuchsplan $\xi \in \Xi^+$ ist also G -optimal, genau dann wenn $\sup_{x \in \mathcal{E}} d(x, \xi) = \inf_{\eta \in \Xi} \sup_{x \in \mathcal{E}} d(x, \eta)$.

Das Supremum (über $x \in \mathcal{E}$) von $d(x, \xi)$ besitzt die untere Schranke k , was leicht zu beweisen ist:

Lemma 2.21 *Sei $\xi \in \Xi^+$. Dann:*

$$a) \quad k = \int_{\mathcal{E}} f^\top M(\xi)^{-1} f \, d\xi \leq \sup_{x \in \mathcal{E}} d(x, \xi).$$

$$b) \quad \xi \text{ } D\text{-optimal für } \theta \text{ in } \Xi \Rightarrow \forall z \in \text{eSupp}(\xi) : f(z)^\top M(\xi)^{-1} f(z) = k = \int_{\mathcal{E}} f^\top M(\xi)^{-1} f \, d\xi = \sup_{x \in \mathcal{E}} d(x, \xi).$$

Beweis: a) Wegen $k = \text{Spur} I_k$ gilt

$$k = \text{Spur} M(\xi)^{-1} \int_{\mathcal{E}} f f^\top \, d\xi = \int_{\mathcal{E}} f^\top M(\xi)^{-1} f \, d\xi \leq \int_{\mathcal{E}} \sup_{x \in \mathcal{E}} f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x) \, d\xi = \sup_{x \in \mathcal{E}} d(x, \xi).$$

b) Korollar 2.14 und Lemma 2.17. □

Nun geben wir den Satz von Kiefer und Wolfowitz formuliert für Momentenmatrizen an. In der Literatur wird in der Regel vorausgesetzt, dass f eine stetige Regressionsfunktion ist. In diesem Falle ist $M(\Xi)$ kompakt. Wir verallgemeinern zunächst den Satz für nicht kompakte $M(\xi)$ soweit, wie es ohne weiteren Beweis möglich ist. Nach Voraussetzung 1.4 b) ist f und damit auch $M(\Xi)$ beschränkt.

Satz 2.22 (von Kiefer und Wolfowitz) *Sei $M \in M(\Xi)$ positiv definit und seien die folgenden Aussagen gegeben:*

$$a) \quad M \text{ ist } D\text{-optimal für } \theta \text{ in } M(\Xi),$$

$$b) \quad \forall \mathbf{y} \in f(\mathcal{E}) : \mathbf{y}^\top M^{-1} \mathbf{y} \leq k,$$

$$c) \quad \sup_{\mathbf{y} \in f(\mathcal{E})} \mathbf{y}^\top M^{-1} \mathbf{y} = k,$$

$$d) \quad M \text{ ist } G\text{-optimal für } \theta \text{ in } M(\Xi).$$

Dann gilt $a) \iff b) \iff c) \Rightarrow d)$.

Ist $M(\Xi)$ kompakt (dies ist z.B. erfüllt, wenn f stetig ist), dann gilt auch $d) \Rightarrow c)$.

Beweis: „a) \Rightarrow c)“: Lemma 2.21 b).

„c) \Rightarrow b)“: klar.

„b) \Rightarrow a)“: Lemma 2.21 a) und Korollar 2.14.

„a) \Rightarrow d)“: Lemma 2.21.

In Pukelsheim (1993), S. 212, wird die Äquivalenz von a), b), c) und d) gezeigt für kompakte $M(\Xi)$, siehe auch Kiefer und Wolfowitz (1960). \square

Der Beweis von dem Satz von Kiefer und Wolfowitz bei Pukelsheim (1993) suggeriert, dass die Kompaktheitsvoraussetzung für die volle Äquivalenz aller Aussagen notwendig ist. Dass dies nicht der Fall ist, zeigt aber der folgende Satz.

Satz 2.23 (von Kiefer und Wolfowitz für beschränkte Regressionsfunktionen)

Sei $\xi \in \Xi^+$. Dann sind äquivalent:

a) ξ ist D -optimal für θ in Ξ ,

b) $\forall x \in \mathcal{E}: d(x, \xi) \leq k$,

c) $\sup_{x \in \mathcal{E}} d(x, \xi) = k$,

d) ξ ist G -optimal für θ in Ξ .

Wenn eine der Voraussetzungen a), b), c) oder d) erfüllt ist, dann gilt

$$\forall x \in \text{eSupp}(\xi) : d(x, \xi) = k. \quad (2.20)$$

Beweis: Die Implikationen a) \iff b) \iff c) \Rightarrow d) übertragen sich direkt von Satz 2.22. Da für nicht kompakte $M(\Xi)$ im Allgemeinen kein D -optimaler Versuchsplan existieren muss, wird der Beweis für d) \Rightarrow c) etwas aufwändiger:

„d) \Rightarrow c)“: Da $M(\Xi)$ beschränkt ist, ist $\overline{M(\Xi)}$ kompakt. Weil $M \mapsto \det(M)$ stetig auf $\overline{M(\Xi)}$ ist, existiert eine D -optimale Matrix N für θ in $\overline{M(\Xi)}$. Weiter gibt es eine Folge $N_n \in M(\Xi)$ mit $N_n \rightarrow N$. Mit Lemma 2.3 in Verbindung mit (2.8) (für die erste Gleichheit) und mit der Implikation „a) \Rightarrow c)“ aus Satz 2.22 (für die letzte Gleichheit) hat man

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\mathbf{y} \in f(\mathcal{E})} \mathbf{y}^\top N_n^{-1} \mathbf{y} = \sup_{\mathbf{y} \in f(\mathcal{E})} \mathbf{y}^\top N^{-1} \mathbf{y} = k.$$

Sei ξ ein G -optimaler Versuchsplan. Dann gilt

$$k \leq \sup_{\mathbf{y} \in f(\mathcal{E})} \mathbf{y}^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{y} = \inf_{\tilde{N} \in M(\Xi)} \sup_{\mathbf{y} \in f(\mathcal{E})} \mathbf{y}^\top \tilde{N}^{-1} \mathbf{y} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\mathbf{y} \in f(\mathcal{E})} \mathbf{y}^\top N_n^{-1} \mathbf{y} = k.$$

Also ist c) gezeigt.

Die Formel (2.20) ergibt sich aus a) und Lemma 2.21 b). □

Der Satz von Kiefer und Wolfowitz war ein großer Durchbruch für die Versuchsplanung. Die Äquivalenz zweier so unterschiedlicher Optimalitätskriterien wie der D - und der G -Optimalität war eine Überraschung. Gleichzeitig ist durch den Satz eine weitere Begründung für die Verwendung der D -Optimalität gegeben.

Es gibt jedoch auch Fälle, in denen D - und G -Optimalität nicht äquivalent sind. Wenn die Voraussetzung der Homoskedastizität der Fehler fallengelassen wird (wir setzen in dieser Arbeit jedoch immer Homoskedastizität voraus), so gilt die Äquivalenz nicht mehr, siehe Wong und Cook (1993).

Eine weitere unbedingt notwendige Voraussetzung im Satz von Kiefer und Wolfowitz ist, dass Optimalität in der gesamten Menge Ξ betrachtet wird. Sucht man D - bzw. G -optimale Versuchspläne in einer Teilmenge Υ von Ξ , so gilt der Satz im Allgemeinen nicht mehr. Für die Menge $\Upsilon = \Xi_n$, $n \in \mathbb{N}$ fest, sieht man dies an folgendem wohlbekanntem Beispiel:

Beispiel 2.24 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x)^\top$ (Geradenregression), $n \in \mathbb{N}$ ungerade. In Krafft (1978), Seite 243-253, wird gezeigt, dass ein Versuchsplan $\xi \in \Xi_n$ genau dann D -optimal in Ξ_n ist, wenn

$$\xi \in \left\{ \frac{n-1}{2n} \delta_{-1} + \frac{n+1}{2n} \delta_1, \frac{n+1}{2n} \delta_{-1} + \frac{n-1}{2n} \delta_1 \right\}$$

und genau dann G -optimal in Ξ_n ist, wenn

$$\xi = \frac{n-1}{2n} \delta_{-1} + \frac{1}{n} \delta_0 + \frac{n-1}{2n} \delta_1.$$

Auch für die Teilmengen Υ von Ξ , die in Kapitel 3 motiviert werden, gilt die Äquivalenz von D - und G -Optimalität nicht.

2.4.3 Invarianz der D -Optimalität

Eine wichtige Eigenschaft der D -Optimalität ist, dass sie invariant gegenüber regulären Transformationen des Modells ist. Sei $\tilde{f}(x) = Af(x)$, $x \in \mathcal{E}$, für eine reguläre Matrix A . Dann gilt für alle

$\xi \in \Xi$:

$$\det \left(\int_{\mathcal{E}} \tilde{f} \tilde{f}^{\top} d\xi \right) = \det \left(A \int_{\mathcal{E}} f f^{\top} d\xi A^{\top} \right) = \det(A)^2 \det \left(\int_{\mathcal{E}} f f^{\top} d\xi \right).$$

Also hat man die Aussage

$$\xi \text{ ist } D\text{-optimal in } \Xi \text{ für das Modell } \tilde{f} \iff \xi \text{ ist } D\text{-optimal in } \Xi \text{ für das Modell } f,$$

siehe auch Dette und Studden (1997), Seite 146.

Beispiel 2.25 (Polynomregression und Wahl des Versuchsbereiches) Sei $\mathcal{E} = [w - v, w + v]$, $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^{\top}$. Nach Bemerkung 2.19 ist ξ optimal auf \mathcal{E} für f genau dann, wenn $\tilde{\xi}$ definiert durch

$$\tilde{\xi}(A) = \xi(vA + w), \quad A \in \mathcal{B}|_{[-1,1]},$$

optimal auf $[-1, 1]$ für \tilde{f} ist mit

$$\tilde{f}(x) := f(vx + w) = (1, vx + w, \dots, (vx + w)^{k-1})^{\top} = Af(t),$$

A geeignete reguläre Matrix. Da die D -Optimalität invariant gegenüber regulären Transformationen ist, gilt also für die Polynomregression

$$\xi \text{ ist } D\text{-optimal in } \Xi \text{ auf } \mathcal{E} \iff \tilde{\xi} \text{ ist } D\text{-optimal in } \Xi \text{ auf } [-1, 1].$$

Bei der D -Optimalität für Polynomregression können wir also ohne Beschränkung der Allgemeinheit den Versuchsbereich $\mathcal{E} = [-1, 1]$ betrachten.

2.4.4 Geometrische Interpretation der D -Optimalität

Wir definieren für positiv definites $M \in \mathbb{R}^{k \times k}$ die „von M erzeugte Ellipse“ durch

$$\text{Ellipse}(M) := \{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^k \mid \mathbf{u}^{\top} M^{-1} \mathbf{u} \leq k\}.$$

Mit dieser Ellipse können wir drei verschiedene geometrische Interpretationen der D -Optimalität angeben.

Betrachten wir noch einmal den Satz von Kiefer und Wolfowitz (Satz 2.23) und speziell die Äquivalenz „a) \iff b)“. Diese Äquivalenz besagt, dass ein Versuchsplan genau dann D -optimal in Ξ ist, wenn $f(\mathcal{E}) \subseteq \text{Ellipse}(M(\xi))$.

Für die zweite geometrische Interpretation bemerken wir, dass das Volumen von $\text{Ellipse}(M)$ proportional zu $\det(M)^{1/2}$ ist. Daher ist die Suche nach einem D -optimalen Versuchsplan in Ξ gleichbedeutend mit der Suche nach $\text{Ellipse}(M(\xi))$, $\xi \in \Xi$, mit *maximalem* Volumen.

Ein anderes geometrisches Problem ist: Suche unter den Ellipsen, die $f(\mathcal{E})$ enthalten, eine mit *minimalem* Volumen. Silvey (1972) vermutete, dass dieses „Minimum-Ellipsen-Problem“ ein duales Problem zum „ D -Optimalitäts-Problem in Ξ “ ist. Dies bedeutet, dass

$$\forall M \in M(\Xi), N \text{ positiv definit mit } f(\mathcal{E}) \subseteq \text{Ellipse}(N) : \quad \det M \leq \det N$$

und dass für Lösungen N^* des Minimum-Ellipsen-Problems und ξ^* des D -Optimalitäts-Problems in Ξ gilt:

$$M(\xi^*) = N^*.$$

Silveys Vermutung wurde von Sibson (1972) mit der Lagrange-Multiplikatoren-Methode bewiesen. Wir können also folgenden Satz formulieren:

Satz 2.26 (Silvey und Sibson) *Ein Versuchsplan $\xi \in \Xi^+$ ist genau dann D -optimal in Ξ , wenn*

$$\forall N \text{ positiv definit mit } f(\mathcal{E}) \subseteq \text{Ellipse}(N) : \quad \lambda^k(\text{Ellipse}(M(\xi))) \leq \lambda^k(\text{Ellipse}(N))$$

(λ^k das Lebesgue-Maß auf der Borel- σ -Algebra in \mathbb{R}^k).

2.5 Äquivalenztheoreme für die \mathbf{c} -Optimalität

In diesem Abschnitt betrachten wir den Spezialfall $K = \mathbf{c}$ und $\Upsilon = \Xi$. Für diesen wichtigen Spezialfall gibt es einige weiterreichende Resultate und Interpretationen.

2.5.1 Das Elfving-Theorem

Wir stellen eine geometrische Interpretation im \mathbb{R}^k des \mathbf{c} -optimalen Versuchsplans in Ξ vor, die auf Elfving (1952) zurückgeht.

Dazu betrachten wir den \mathbb{R}^k und darin die Menge $\mathcal{K} := \{f(x) \mid x \in \mathcal{E}\} \subseteq \mathbb{R}^k$. Wir definieren die sogenannte Elfving-Menge \mathcal{R} als die kleinste konvexe, um $\mathbf{0}_k$ symmetrische Menge in \mathbb{R}^k , die \mathcal{K} enthält. Als Formel können wir

$$\mathcal{R} = \text{Konv}(\mathcal{K} \cup \{-\mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in \mathcal{K}\})$$

schreiben, wobei $\text{Konv}(\mathcal{C})$ die konvexe Hülle einer Menge \mathcal{C} angibt. Der Punkt $\mathbf{0}_k$ liegt im Inneren von \mathcal{R} (da $f(\mathcal{E})$ den \mathbb{R}^k aufspannt). Nun definieren wir die sogenannte Elfving-Norm ρ auf \mathbb{R}^k durch

$$\rho(\mathbf{v}) := \inf\{\gamma \geq 0 \mid \mathbf{v}/\gamma \in \mathcal{R}\}, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^k.$$

Es wird sich im Beweis von Satz 2.28 als nützlich erweisen, dass wir zunächst das Elfving-Theorem für den Bildbereich von f und Bildmaße η auf $\mathcal{K}(= f(\mathcal{E}))$ formulieren. Sei $\Xi(\mathcal{K})$ die Menge aller Wahrscheinlichkeitsmaße auf \mathcal{K} .

Satz 2.27 (Elfving-Theorem für Kompakta) *Sei $\mathcal{K} \subseteq \mathbb{R}^k$ kompakt, $\mathbf{0}_k$ liege im Inneren von $\text{Konv}(\mathcal{K} \cup \{\mathbf{y} \mid -\mathbf{y} \in \mathcal{K}\})$. Ein Versuchsplan $\eta \in \Xi(\mathcal{K})$ ist optimal für $\mathbf{c}^\top \boldsymbol{\theta}$ in $\Xi(\mathcal{K})$ genau dann, wenn es eine Borel-messbare Funktion $\varphi : \mathcal{K} \rightarrow \{-1, 1\}$ gibt mit*

$$\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}) = \int_{\mathcal{K}} \varphi(\mathbf{y}) \mathbf{y} \eta(d\mathbf{y}).$$

Ein solcher Versuchsplan existiert stets.

Beweis: Pukelsheim (1993), S.50f. Siehe auch Pukelsheim (1981). □

Satz 2.28 (Elfving-Theorem für beschränkte Regressionsfunktionen)

Ein Versuchsplan $\xi \in \Xi$ ist optimal für $\mathbf{c}^\top \boldsymbol{\theta}$ in Ξ genau dann, wenn es eine Borel-messbare Funktion $\varphi : \mathcal{E} \rightarrow \{-1, 1\}$ gibt mit

$$\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}) = \int_{\mathcal{E}} \varphi(x) f(x) \xi(dx). \tag{2.21}$$

Beweis: „ \Leftarrow “: Folgt aus Satz 2.27 für $\mathcal{K} = f(\mathcal{E})$ und η das Bildmaß von ξ unter f , da für diese Implikation die Voraussetzung der Kompaktheit von \mathcal{K} nicht benötigt wird, siehe Pukelsheim (1993), Seite 51.

„ \Rightarrow “: Mit Voraussetzung 1.4 folgt, dass $f(\mathcal{E})$ beschränkt (aber nicht notwendigerweise abgeschlossen) ist. Sei $\mathcal{K} := \overline{f(\mathcal{E})}$, also \mathcal{K} kompakt. Nach dem Satz von Elfving für Kompakta (Satz 2.27) existiert ein Versuchsplan $\eta^* \in \Xi(\mathcal{K})$, der optimal für $\mathbf{c}^\top \boldsymbol{\theta}$ ist und für den gilt

$$\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}) = \int_{\mathcal{K}} \varphi^*(\mathbf{y}) \mathbf{y} \eta^*(d\mathbf{y})$$

für ein messbares $\varphi^* : \mathcal{K} \rightarrow \{-1, 1\}$. Sei $M_0 := M(\eta^*)$ und $M_1 \in \text{ri}M(\Xi(f(\mathcal{E})))$. Wie im Beweis von Satz 2.12 ist die Existenz eines solchen M_1 sichergestellt. Wir definieren die $M_n := \frac{n-1}{n} M_0 +$

$\frac{1}{n}M_1, n \geq 2$. Mit Webster (1994), Theorem 2.3.4, haben wir $M_n \in M(\Xi(f(\mathcal{E}))), n \in \mathbb{N}$. Außerdem strebt M_n auf einer Geraden gegen M_0 . Nach Pukelsheim (1993), Seite 76-79, folgt

$$(\mathbf{c}^\top M_n^- \mathbf{c})^{-1} \rightarrow (\mathbf{c}^\top M(\eta^*)^- \mathbf{c})^{-1}. \quad (2.22)$$

Sei nun $\xi \in \Xi$ optimal in Ξ und η das Bildmaß von ξ unter f . Also ist η optimal in $\Xi(f(\mathcal{E}))$. Wegen (2.22) muss η auch optimal in $\Xi(\overline{f(\mathcal{E})})$ sein. Nach dem Satz von Elfving für Kompakta (Satz 2.27) gilt für $\mathcal{K} = \overline{f(\mathcal{E})}$:

$$\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}) = \int_{\mathcal{K}} \varphi(\mathbf{y})\mathbf{y} \eta(d\mathbf{y}) = \int_{\mathcal{E}} \varphi(f(x))f(x) \xi(dx).$$

□

Sei $\mathbf{v} \in \text{Rand}(\mathcal{R})$, wobei $\text{Rand}(\mathcal{R})$ den Rand von \mathcal{R} bezeichne (also die Mengendifferenz vom Abschluss und dem Inneren von \mathcal{R}). Da \mathcal{R} konvex ist, existiert in \mathbf{v} eine Tangentialhyperebene $\{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k \mid \mathbf{h}^\top \mathbf{y} = \mathbf{h}^\top \mathbf{v}\}$ wobei $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$ ein Tangenten-erzeugender Vektor ist, für den wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\mathbf{h}^\top \mathbf{v} = 1$ festlegen können. Wir identifizieren die Tangentialhyperebene mit ihrem erzeugenden Vektor und definieren die Menge aller Tangentialhyperebenen in \mathbf{v} durch

$$\mathcal{T}(\mathbf{v}) := \{\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k \mid \forall \mathbf{y} \in \mathcal{R} : \mathbf{h}^\top \mathbf{y} \leq \mathbf{h}^\top \mathbf{v} = 1\} = \{\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k \mid \forall y \in \mathcal{E} : |\mathbf{h}^\top f(y)| \leq \mathbf{h}^\top \mathbf{v} = 1\}.$$

Als Anwendung des Elfving-Theorems betrachten wir zwei Beispiele, wobei in Beispiel 2.29 eine nicht stetige Regressionsfunktion betrachtet wird.

Beispiel 2.29 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x \cdot \mathbf{1}_{[-1,1)}(x))^\top$. Die Elfving-Menge ist

$$\mathcal{R} = \{(x_1, x_2)^\top \in \mathbb{R}^2 \mid |x_1| \leq 1, |x_2| < 1\} \cup \{(1, -1)^\top, (-1, 1)^\top\}.$$

Sei $\mathbf{c} = (1, 0)^\top$. Dann ist $\rho(\mathbf{c}) = 1$. Ein Versuchsplan ξ ist \mathbf{c} -optimal in Ξ genau dann, wenn $\int_{\mathcal{E}} x \cdot \mathbf{1}_{[-1,1)}(x) \xi(dx) = 0$ (also z.B. $\xi = \delta_0$, $\xi = \delta_1$ oder $\xi = \lambda_{[-1,1]}/2$), denn

$$\begin{aligned} (1, 0)^\top &= \int_{\mathcal{E}} \varphi(x)f(x) \xi(dx) \iff (1, 0)^\top = \int_{\mathcal{E}} (1, x \cdot \mathbf{1}_{[-1,1)}(x))^\top \xi(dx) \\ &\iff 0 = \int_{\mathcal{E}} x \cdot \mathbf{1}_{[-1,1)}(x) \xi(dx). \end{aligned}$$

Sei $\mathbf{c} = (1, -1)^\top$. Der Versuchsplan $\xi = \delta_{-1}$ ist \mathbf{c} -optimal in Ξ , denn

$$\int_{\mathcal{E}} f(x) d\delta_{-1} = f(-1) = (1, -1)^\top = \mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}).$$

Da $(1, -1)^\top$ auf keine andere Weise durch (2.21) dargestellt werden kann, ist dies der einzige \mathbf{c} -optimale Versuchsplan.

Sei $\mathbf{c} = (0, 1)^\top$. Es ist $\rho(\mathbf{c}) = 1$. Da $\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$ nicht in der Form (2.21) darstellbar ist, gibt es keinen \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in Ξ .

Beispiel 2.30 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$, $f(x) = (1, x, x^2)^\top$ und $\mathbf{c} = (1, 0, 1/2)^\top$. Für $t \in [1/\sqrt{2}, 1]$ seien die Versuchspläne ξ_t definiert durch

$$\xi_t := \frac{1}{4t^2}(\delta_{-t} + \delta_t) + \left(1 - \frac{1}{2t^2}\right) \delta_0.$$

Wegen

$$\int_{\mathcal{E}} f \, d\xi_t = (1, 0, 1/2)^\top = \mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$$

ist ξ_t \mathbf{c} -optimal in Ξ . Man beachte dabei, dass $\text{Rang}(M(\xi_{1/\sqrt{2}})) = 2$ und $\text{Rang}(M(\xi_t)) = 3$ für $t \in (1/\sqrt{2}, 1]$.

2.5.2 Spezialisierung allgemeiner Äquivalenztheoreme für \mathbf{c} -Optimalität in Ξ

Korollar 2.18 nimmt für $K = \mathbf{c}$, $\Upsilon = \Xi$ folgende Form an:

Satz 2.31 Sei $\xi \in \Xi$. ξ ist \mathbf{c} -optimal in Ξ genau dann, wenn $\xi \in \mathcal{S}(\mathbf{c})$ und eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ existiert, so dass

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : \quad (\mathbf{c}^\top Gf(y))^2 \leq (\mathbf{c}^\top Gf(z))^2. \quad (2.23)$$

Beweis: Wir können in Korollar 2.18 den Parameter p beliebig wählen und wählen sinnvollerweise $p = -1$. Dann gilt $N = G\mathbf{c}\mathbf{c}^\top G$ und $f(x)^\top Nf(x) = (\mathbf{c}^\top Gf(x))^2$ für alle $x \in \mathcal{E}$. \square

Bemerkung 2.32 Entsprechend erhalten wir mit Korollar 2.14 statt mit Korollar 2.18:

ξ ist \mathbf{c} -optimal in Ξ genau dann, wenn $\xi \in \mathcal{S}(\mathbf{c})$ und eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi)$ existiert, so dass

$$\forall y \in \mathcal{E} : \quad (\mathbf{c}^\top Gf(y))^2 \leq \rho(\mathbf{c})^2. \quad (2.24)$$

Hierbei folgt $\int_{\mathcal{E}} (\mathbf{c}^\top Gf)^2 = \rho(\mathbf{c})^2$ folgendermaßen:

Es gilt $\int_{\mathcal{E}} (\mathbf{c}^\top Gf)^2 \, d\xi = \mathbf{c}^\top GM(\xi)G\mathbf{c}$. Wegen $\xi \in \mathcal{S}(\mathbf{c})$ existiert ein $\tilde{\mathbf{c}}$ mit $\mathbf{c} = M(\xi)\tilde{\mathbf{c}}$ und $\mathbf{c}^\top GM(\xi)G\mathbf{c} = \mathbf{c}^\top GM(\xi)GM(\xi)\tilde{\mathbf{c}} = \mathbf{c}^\top GM(\xi)\tilde{\mathbf{c}} = \mathbf{c}^\top G\mathbf{c}$. Nach Pukelsheim (1993), Seite 49-51, gilt $\mathbf{c}^\top G\mathbf{c} = \rho(\mathbf{c})^2$.

Wir definieren

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\xi, \mathbf{c}) &:= \{G \in M(\xi)^- \mid \forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : (\mathbf{c}^\top Gf(y))^2 \leq (\mathbf{c}^\top Gf(z))^2\} \\ &= \{G \in M(\xi)^- \mid \forall y \in \mathcal{E} : (\mathbf{c}^\top Gf(y))^2 \leq \rho(\mathbf{c})^2\}.\end{aligned}$$

Mit dieser Schreibweise lautet Satz 2.31

$$\xi^* \text{ ist } \mathbf{c}\text{-optimal in } \Xi \iff \xi \in \mathcal{S}(\mathbf{c}) \text{ und } \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c}) \neq \emptyset.$$

Wir können nun den Zusammenhang von Satz 2.31 (bzw. Bemerkung 2.32) und dem Elfving-Theorem (Satz 2.28) in nachfolgendem Satz näher erläutern:

Satz 2.33 *Sei $\xi^* \in \Xi$ ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in Ξ . Dann sind die Vektoren $G\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$, $G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})$, genau die Tangentialhyperebenen von \mathcal{R} im Punkt $\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$:*

$$\{G\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}) \mid G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})\} = \mathcal{T}(\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})).$$

Beweis: „ \subseteq “: Folgt direkt aus Bemerkung 2.32.

„ \supseteq “: Sei $\mathbf{h} \in \mathcal{T}(\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}))$. Wir konstruieren nun eine verallgemeinerte Inverse G von $M(\xi^*)$. Die Konstruktion erfolgt analog zu Pukelsheim (1993), Seite 53-54. Es gilt $\mathbf{c}^\top \mathbf{h} \neq 0$. Wegen $\mathbf{c} \in [M(\xi^*)]$ folgt:

$$[\mathbf{h}] \cap [\mathbf{c}]^\perp = \{\mathbf{0}_k\} \Rightarrow [\mathbf{h}]^\perp \cup [\mathbf{c}] = \mathbb{R}^k \Rightarrow [\mathbf{h}]^\perp \cup [M(\xi^*)] = \mathbb{R}^k.$$

Daher existiert eine nichtnegativ definite Matrix $H \in \mathbb{R}^{k \times k}$ mit

$$[H] \subseteq [\mathbf{h}]^\perp, \quad [H] \cup [M(\xi^*)] = \mathbb{R}^k, \quad [H] \cap [M(\xi^*)] = \{\mathbf{0}_k\}.$$

Definiere $G := (M(\xi^*) + H)^{-1}$. Nach Pukelsheim (1993), Seite 52, ist dies eine verallgemeinerte Inverse von $M(\xi^*)$. Es gilt

$$\mathbf{h} = (M(\xi^*) + H)^{-1}(M(\xi^*) + H)\mathbf{h} = GM(\xi^*)\mathbf{h} + GH\mathbf{h} = GM(\xi^*)\mathbf{h}.$$

Weiter haben wir nach Pukelsheim (1993), Seite 51: $M(\xi^*)\mathbf{h} = \frac{\mathbf{c}}{\rho(\mathbf{c})}$. Also gilt $\mathbf{h} = G\frac{\mathbf{c}}{\rho(\mathbf{c})}$ und die Behauptung folgt. \square

Das Elfving-Theorem besagt, dass ein Versuchsplan ξ genau dann \mathbf{c} -optimal ist, wenn der Vektor $\frac{\mathbf{c}}{\rho(\mathbf{c})} \in \text{Rand}(\mathcal{R})$ durch die Punkte $f(x)$, $-f(x)$ mit $x \in \text{eSupp}(\xi)$ als Linearkombination bezüglich ξ dargestellt werden kann. Für \mathbf{c} -optimales ξ liegt für jedes $x \in \text{eSupp}(\xi)$ der Punkt $f(x)$ oder $-f(x)$ also alle auf der Tangentialhyperebene $\mathcal{T}(\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}))$.

2.5.3 Äquivalenztheoreme in $L^2(\xi)$ für \mathbf{c} -Optimalität in Ξ

Es gibt eine weitere Möglichkeit, einen \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in Ξ geometrisch zu interpretieren. Im Gegensatz zum Elfving-Theorem betrachten wir nicht den \mathbb{R}^k sondern für $\xi \in \Xi$ den Raum $L^2(\xi) = \{g : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\mathcal{E}} g^2 d\xi < \infty\}$. Das Skalarprodukt $\int_{\mathcal{E}} g \cdot h d\xi$ in $L^2(\xi)$ bezeichnen wir mit $\langle g, h \rangle_{\xi}$.

Satz 2.34 Sei $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_k)^{\top} \in \mathbb{R}^k$. Ein Versuchsplan $\xi \in \Xi$ ist \mathbf{c} -optimal in Ξ genau dann, wenn eine Funktion $g_{\xi} \in [f_1, \dots, f_k]$ existiert mit $\langle g_{\xi}, f_j \rangle_{\xi} = c_j$, $j = 1, \dots, k$ und

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : |g_{\xi}(y)| \leq |g_{\xi}(z)|. \quad (2.25)$$

Beweis: „ \Rightarrow “: Nach Satz 2.31 existiert eine verallgemeinerte Inverse G_{ξ} von $M(\xi)$, so dass

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : (\mathbf{c}^{\top} G_{\xi} f(y))^2 \leq (\mathbf{c}^{\top} G_{\xi} f(z))^2.$$

Wegen $\xi \in \mathcal{S}(\mathbf{c})$ existiert ein $\tilde{\mathbf{c}}$ mit $\mathbf{c} = M(\xi)\tilde{\mathbf{c}}$. Wir definieren $\tilde{g}_{\xi}(x) := \mathbf{c}^{\top} G_{\xi} f(x) \in [f_1, \dots, f_k]$. Es gilt für $j \in \{1, \dots, k\}$:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{g}_{\xi}, f_j \rangle_{\xi} &= \int_{\mathcal{E}} \tilde{g}_{\xi}(x) f_j(x) \xi(dx) = \mathbf{c}^{\top} G_{\xi} \int_{\mathcal{E}} f(x) f_j(x) \xi(dx) \\ &= \tilde{\mathbf{c}}^{\top} M(\xi) G_{\xi} M(\xi) \mathbf{e}_j = \tilde{\mathbf{c}}^{\top} M(\xi) \mathbf{e}_j = c_j, \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^k$ der j -te Einheitsvektor im \mathbb{R}^k ist.

„ \Leftarrow “: Sei $\mathbf{w}_{\xi} \in \mathbb{R}^k$ mit $g_{\xi}(t) = \mathbf{w}_{\xi}^{\top} f(t)$. Dann gilt für $j = 1, \dots, k$: $c_j = \langle g_{\xi}, f_j \rangle_{\xi} = \mathbf{w}_{\xi}^{\top} M(\xi) \mathbf{e}_j$, also $\mathbf{c} = M(\xi) \mathbf{w}_{\xi}$. Also gilt $\xi \in \mathcal{S}(\mathbf{c})$. Es existiert eine symmetrische, nichtnegativ definite verallgemeinerte Inverse G_{ξ} von $M(\xi)$, so dass $G_{\xi} \mathbf{c} = \mathbf{w}_{\xi}$. Daher gilt $g_{\xi}(x) = \mathbf{w}_{\xi}^{\top} f(x) = \mathbf{c}^{\top} G_{\xi} f(x)$ und mit Satz 2.31 folgt die Behauptung. \square

Beispiel 2.35 (\mathbf{c} -optimale Versuchspläne in Ξ für Geradenregression) Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (f_1(x), f_2(x))^{\top} = (1, x)^{\top}$ (Geradenregression). Wir suchen alle \mathbf{c} -optimalen Versuchspläne in Ξ für $\mathbf{c} = (1, c_2)^{\top}$, $c_2 \in \mathbb{R}$. Alle anderen Vektoren $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^2$ sind Vielfache entweder von diesen \mathbf{c} oder von $\mathbf{e}_2 = (0, 1)^{\top}$, welches später in Satz 2.40 betrachtet wird.

Nach Satz 2.34 ist $\xi \in \Xi$ genau dann \mathbf{c} -optimal in Ξ , wenn $g_{\xi}(x) = \gamma_0 + \gamma_1 x$ existiert mit

$$\langle g_{\xi}, f_1 \rangle_{\xi} = 1 \quad \text{und} \quad \langle g_{\xi}, f_2 \rangle_{\xi} = c_2 \quad (2.26)$$

und

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : |g_\xi(y)| \leq |g_\xi(z)|. \quad (2.27)$$

Damit Bedingung (2.27) erfüllt ist, gibt es folgende Möglichkeiten:

- a) $g_\xi(x) = \gamma_0$, $\xi \in \Xi$ beliebig,
- b) $g_\xi(x) = \gamma_1 x$, $\gamma_1 \neq 0$, $\xi = p\delta_{-1} + (1-p)\delta_1$, $p \in [0, 1]$,
- c) $g_\xi(x) = \gamma_0 + \gamma_1 x$, $\gamma_0 \cdot \gamma_1 > 0$, $\xi = \delta_1$,
- d) $g_\xi(x) = \gamma_0 + \gamma_1 x$, $\gamma_0 \cdot \gamma_1 < 0$, $\xi = \delta_{-1}$.

Im Falle a) ist (2.26) genau dann erfüllt, wenn $\gamma_0 = 1$ und $\int_{\mathcal{E}} x \xi(dx) = c_2$. Letzteres kann nur erfüllt sein, wenn $|c_2| \leq 1$ ist. Wenn $|c_2| = 1$ ist, folgt darüberhinaus bereits $\xi = \delta_{-1}$ bzw. $\xi = \delta_1$.

Im Falle b) ist (2.26) genau dann erfüllt, wenn $p = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\gamma_1}$ und $\gamma_1 = c_2$. Also haben wir $p = \frac{1}{2} - \frac{1}{2c_2}$.

Es gilt $p \in (0, 1) \iff |c_2| > 1$, $p = 0 \iff c_2 = 1$ und $p = 1 \iff c_2 = -1$.

Im Falle c) ist (2.26) genau dann erfüllt, wenn $\gamma_0 + \gamma_1 = 1$ und $\gamma_0 + \gamma_1 = c_2$. Also haben wir $c_2 = 1$.

Im Falle d) ergibt sich analog $c_2 = -1$.

Insgesamt hat man für $\mathbf{c} = (1, c_2)^\top$: $\xi \in \Xi$ ist \mathbf{c} -optimal in Ξ genau dann, wenn

$$\begin{cases} \int_{\mathcal{E}} x \xi(dx) = c_2, & \text{falls } c_2 \in (-1, 1), \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2c_2}\right)\delta_{-1} + \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2c_2}\right)\delta_1, & \text{falls } |c_2| > 1, \\ \delta_{-1}, & \text{falls } c_2 = -1, \\ \delta_1, & \text{falls } c_2 = 1. \end{cases}$$

Im Falle $c_2 \in (-1, 1)$ sind also sowohl $\delta_{c_2} \in \Xi \setminus \Xi^+$ als auch unendlich viele Versuchspläne $\xi \in \Xi^+$ \mathbf{c} -optimal in Ξ .

Ist $\xi \in \Xi$ so, dass $M(\xi)$ positiv definit ist (d.h. $\xi \in \Xi^+$), dann erhalten wir im Spezialfall $\mathbf{c} = \mathbf{e}_j$ aus Satz 2.34:

Satz 2.36 Sei $\xi \in \Xi^+$, $j \in \{1, \dots, k\}$. Der Versuchsplan ξ ist optimal für θ_j in Ξ genau dann, wenn gilt:

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : \left| \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)} f_j \right) (y) \right| \leq \left| \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)} f_j \right) (z) \right|, \quad (2.28)$$

wobei $\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)}$ der Orthogonalprojektor auf $[f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k]^\perp$ in $L^2(\xi)$ ist.

Beweis: Für $\mathbf{c} = \mathbf{e}_j$ gilt für g_ξ aus Satz 2.34

$$\langle g_\xi, f_i \rangle_\xi = 0, \quad i = 1, \dots, j-1, j+1, \dots, k,$$

d.h. $g_\xi \perp_\xi f_i$, $i = 1, \dots, j-1, j+1, \dots, k$. Da f_1, \dots, f_k eine Basis des Unterraumes $[f_1, \dots, f_k]$ von $L^2(\xi)$ bilden, gilt $g_\xi = \text{const} \cdot \text{pr}_{[f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)} f_j$ und wegen $\langle g_\xi, f_j \rangle_\xi = 1 \neq 0$ ist $\text{const} \neq 0$. Daher ist (2.25) äquivalent zu (2.28). \square

Bemerkung 2.37 Der in Satz 2.36 verwendete Orthogonalprojektor in $L^2(\xi)$ lässt sich mit Matrizen $M_{11} = \int_{\mathcal{E}} \tilde{f} \tilde{f}^\top d\xi$ und $M_{12} = \int_{\mathcal{E}} \tilde{f} f_j d\xi$ (wobei $\tilde{f} := (f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k)^\top$) darstellen: Mit $\mathbf{v} := (v_1, \dots, v_{k-1})^\top := -M_{11}^{-1} M_{12} \in \mathbb{R}^{k-1}$ gilt

$$\left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)} f_j \right) (y) = (v_1, \dots, v_{j-1}, 1, v_j, \dots, v_{k-1}) f(y).$$

Wir werden im nächsten Beispiel die geometrische Bedeutung von Satz 2.36 mit einem Beispiel erläutern. Für dieses Beispiel (und sogar für einen wesentlich allgemeineren Fall) ist der optimale Versuchsplan bereits seit Langem bekannt, siehe Satz 2.40. Das Beispiel dient also ausschließlich der geometrischen Interpretation von Satz 2.36.

Beispiel 2.38 Wir betrachten die Regressionsfunktion $f(x) = (f_1(x), \dots, f_4(x))^\top = (1, x, x^2, x^3)^\top$ (kubische Regression, $k = 4$) und suchen einen optimalen Versuchsplan für θ_4 in Ξ .

Ein einfaches Symmetrie-Argument, das die Konkavität von $\xi \mapsto (\mathbf{e}_4^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{e}_4)^{-1}$ ausnutzt, zeigt, dass man sich auf um 0 symmetrische Versuchspläne einschränken kann². Da mit einem Versuchsplan mit höchstens drei Massepunkten keine Aussage über den Parameter θ_4 gemacht werden kann³, benötigen wir wenigstens vier Massepunkte. Wir können also im Folgenden nur noch symmetrische Versuchspläne mit wenigstens vier Massepunkten betrachten.

Zunächst betrachten wir den Versuchsplan

$$\xi_1 := \frac{1}{4} \delta_{-1} + \frac{1}{4} \delta_{-1/3} + \frac{1}{4} \delta_{1/3} + \frac{1}{4} \delta_1$$

(äquidistante Versuchspunkte mit gleichen Massen). Es gilt

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{E}} f_4 \cdot (f_1, f_2, f_3) d\xi_1 &= \int_{\mathcal{E}} (x^3, x^4, x^5) d\xi_1 = (0, 41/81, 0), \\ \int_{\mathcal{E}} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} \cdot (f_1, f_2, f_3) d\xi_1 &= \int_{\mathcal{E}} \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 \\ x & x^2 & x^3 \\ x^2 & x^3 & x^4 \end{pmatrix} d\xi_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 5/9 \\ 0 & 5/9 & 0 \\ 5/9 & 0 & 41/81 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

²Formal wird dieses Symmetrie-Argument in Bemerkung 3.11 angegeben.

³Durch die Beobachtungsmittelwerte an drei Massepunkten kann man ein quadratisches Polynom exakt legen.

womit man die Projektion von f_4 auf $[f_1, f_2, f_3]$ in $L^2(\xi_1)$ erhält:

$$\begin{aligned} \text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi_1)} f_4(x) &= \int_{\mathcal{E}} f_4 \cdot (f_1, f_2, f_3) \, d\xi_1 \cdot \left(\int_{\mathcal{E}} (f_1, f_2, f_3)^\top \cdot (f_1, f_2, f_3) \, d\xi_1 \right)^{-1} \cdot (f_1, f_2, f_3)^\top \\ &= (0, 41/81, 0) \cdot \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & 9/5 & 0 \\ * & * & * \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} = \frac{41}{45}x. \end{aligned}$$

Die Funktionen $f_4(x) = x^3$ und $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi_1)} f_4(x) = 41/45 \cdot x$ sind in Abbildung 2.1 zu sehen. Für $x = -1, -1/3, 1/3$ bzw. 1 ist $|f_4(x) - \text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi_1)} f_4(x)| = |\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]^\perp}^{L^2(\xi_1)} f_4(x)|$ gegeben durch

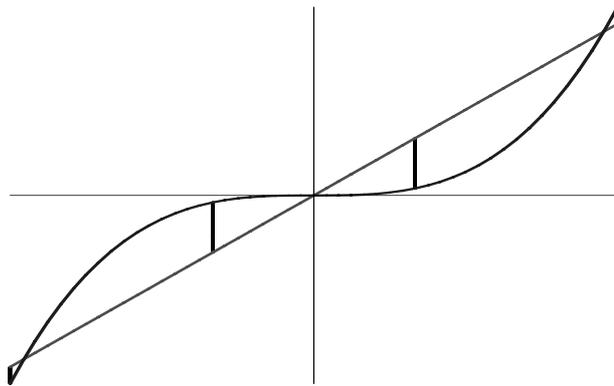


Abbildung 2.1: DIE FUNKTIONEN $f_4(x) = x^3$ UND $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi_1)} f_4(x) = 41/45 \cdot x$

$4/45, 12/45, 12/45$ bzw. $4/45$. Nach Satz 2.36 ist ξ_1 daher nicht optimal für θ_4 in Ξ .

Man kann auch mit Satz 2.36 und rein geometrischen Argumenten nachweisen (ohne Rechnung wie oben), dass ein Versuchsplan der Gestalt

$$\xi_2 := p\delta_{-1} + \left(\frac{1}{2} - p\right)\delta_{-1/3} + \left(\frac{1}{2} - p\right)\delta_{1/3} + p\delta_1, \quad p \in (0, 1/2)$$

nicht optimal für θ_4 in Ξ sein kann. Zunächst erkennen wir, dass $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi_1)} f_4(x)$ eine Ursprungsgerade sein muss, da ξ_2 um 0 symmetrisch und f_4 eine ungerade Funktion ist. Wäre ξ_2 ein optimaler Versuchsplan für θ_4 , müssten die Punkte $(-1, -1), (-1/3, -1/27), (1/3, 1/27)$ und $(1, 1)$ alle denselben Abstand zu dieser Ursprungsgerade haben. Es müsste also zwei parallele Geraden geben, auf denen diese vier Punkte liegen. Es gibt zwei Paare solcher Geraden (vgl. Abbildung 2.2). Nach Satz 2.36 müssen alle anderen Punkte $(x, x^3), x \in [-1, 1]$, zwischen den beiden Geraden liegen. Dies ist jedoch für keine der beiden Geradenpaare der Fall.

Wir können mit Satz 2.36 nicht nur zeigen, dass ein Versuchsplan wie ξ_2 nicht optimal ist. Wir können mit geometrischen Argumenten und zusätzlicher Rechnung den optimalen Versuchsplan ξ

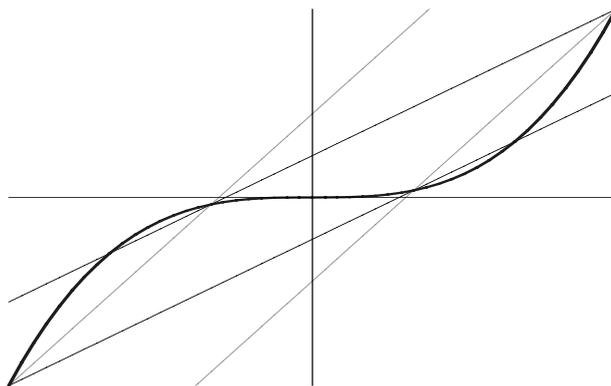


Abbildung 2.2: EIN VERSUCHSPLAN MIT MASSEPUNKTEN $-1, -1/3, 1/3$ UND 1 KANN NICHT OPTIMAL FÜR θ_4 IN Ξ SEIN

bestimmen. Zunächst ermitteln wir, auf welchen Punkten ξ Masse hat. Die einzige Möglichkeit, dass zwei parallele Geraden die Funktion $x \mapsto x^3$ in vier Punkten berührt und alle anderen Punkte $(x, x^3), x \in [-1, 1]$, zwischen den beiden Geraden liegen, ist die in Abbildung 2.3 gezeigte.

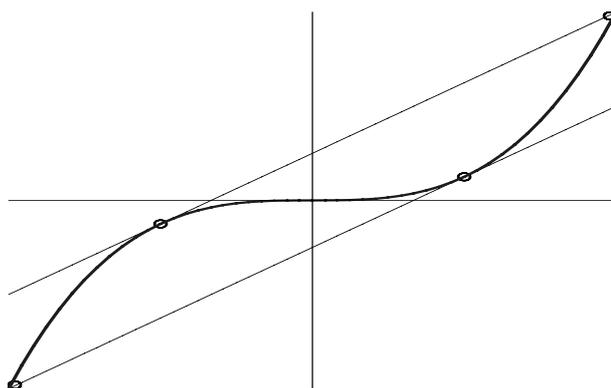


Abbildung 2.3: EINHÜLLENDES GERADENPAAR

Der optimale Versuchsplang hat also die Gestalt

$$\xi := p\delta_{-1} + \left(\frac{1}{2} - p\right)\delta_{-d} + \left(\frac{1}{2} - p\right)\delta_d + p\delta_1, \quad p \in (0, 1/2), \quad d \in (0, 1).$$

Wir bestimmen $d \in (0, 1)$ durch folgende Bedingungen: Die Punkte $(-1, -1)$ und (d, d^3) müssen auf einer Geraden liegen (die parallel zu $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi)} f_4(x)$ ist). Außerdem muss die Ableitung von $x \mapsto x^3$ in $x = d$ mit der Geradensteigung übereinstimmen (sonst würde die Gerade die Funktion $x \mapsto x^3$ in $x = d$ schneiden). Also hat man die Bedingungen (Gerade = $\gamma_0 + x \cdot \gamma_1$)

$$-1 = \gamma_0 - \gamma_1, \quad d^3 = \gamma_0 + d\gamma_1, \quad \gamma_1 = 3d^2.$$

Aus den drei Bedingungen folgt $2d^3 + 3d^2 - 1 = 0$ und daraus $d = 1/2$. Wegen $\gamma_1 = 3d^2 = 3/4$ ist die Projektion von f_4 auf $[f_1, f_2, f_3]$ in $L^2(\xi)$ (mit ξ optimal) die Ursprungsgerade mit Steigung $3/4$.

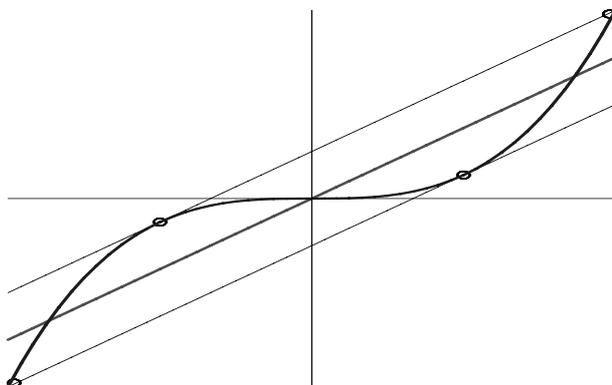


Abbildung 2.4: DIE FUNKTIONEN $f_4(x) = x^3$ UND $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi)} f_4(x) = 3/4 \cdot x$ UND EINHÜLLENDES GERADENPAAR

Der optimale Versuchsplan ist also

$$\xi := p\delta_{-1} + \left(\frac{1}{2} - p\right) \delta_{-1/2} + \left(\frac{1}{2} - p\right) \delta_{1/2} + p\delta_1$$

mit einem $p \in (0, 1/2)$. Das Gewicht p erhält man aus der Gleichung

$$\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi)} f_4(x) = 3/4 \cdot x.$$

Es ergibt sich nach einigen Rechenschritten $p = 1/6$.

2.6 Optimale Versuchspläne für die c- und D-Optimalität

In diesem Abschnitt werden wir für Spezialfälle optimale Versuchspläne in Ξ angeben. Der nachfolgende Satz sagt, dass wenn in $\tilde{\Xi}$ genau ein optimaler Versuchsplan existiert, dass dann in $\Xi \setminus \tilde{\Xi}$ keine weiteren optimalen Versuchspläne gefunden werden können⁴. Wenn dagegen bereits in $\tilde{\Xi}$ mehrere optimale Versuchspläne existieren, so kann es auch in $\Xi \setminus \tilde{\Xi}$ weitere Lösungen geben, wie die trigonometrische Regression in Abschnitt 2.6.3 zeigt.

Satz 2.39 Sei $\xi \in \tilde{\Xi}$ der einzige optimale Versuchsplan in $\tilde{\Xi}$. Dann ist ξ auch der einzige optimale Versuchsplan in Ξ .

⁴Es sei daran erinnert, dass wegen Lemma 2.6 jeder in $\tilde{\Xi}$ optimale Versuchsplan auch optimal in Ξ ist.

Beweis: Sei $n \in \mathbb{N}$ die Zahl der Trägerpunkte von ξ und $m := 2n + 1$. Nehmen wir an, dass ein Versuchsplan $\xi_0 \in \Xi \setminus \tilde{\Xi}$ existiert, der ebenfalls optimal ist. Da $|\text{Supp}(\xi_0)| = \infty$, existieren auf $\mathcal{E} = [a, b]$ Intervalle $J_i = [a_i, a_{i+1})$, $i = 1, \dots, m-1$, $J_m = [a_m, a_{m+1}]$ mit $a = a_1 < a_2 < \dots < a_{m+1} = b$ für die gilt:

$$J_i \cap \text{Supp}(\xi_0) \neq \emptyset, \quad i = 1, \dots, m.$$

Wir definieren $\xi_i := \frac{1}{\xi_0(J_i)} \cdot \xi_0|_{J_i}$. Es gilt $\text{Supp}(\xi_i) \subseteq [a_i, a_{i+1}]$. Nach dem Korollar aus dem Satz von Carathéodory (Korollar 2.10) gibt es Maße η_i mit Masse auf $[a_i, a_{i+1}]$ mit höchstens $\frac{k(k+1)}{2} + 1$ Massepunkten und mit $M(\xi_i) = M(\eta_i)$. Wir definieren $\eta_0 := \sum_{i=1}^m \xi_0(J_i) \cdot \eta_i$ und es gilt $M(\eta_0) = M(\xi_0)$. Der Versuchsplan η_0 hat mindestens $n + 1$ und höchstens $(\frac{k(k+1)}{2} + 1)(2n + 1)$ Massepunkte, insbesondere ist $\eta_0 \in \tilde{\Xi}$. Wegen $M(\eta_0) = M(\xi_0)$ ist η_0 optimal, aber wegen $|\text{Supp}(\eta_0)| > n$ gilt $\eta_0 \neq \xi$. Widerspruch. \square

Im vorangehenden Satz kann jedes Optimalitätskriterium verwendet werden. Wir haben im Beweis lediglich verwendet, dass das Kriterium nur über $M(\xi)$ von ξ abhängt.

2.6.1 Polynomregression

Die explizite Bestimmung der D -optimalen Versuchspläne für Polynomregression vom Grad $d = k - 1 \in \mathbb{N}$ gehört zu den ältesten expliziten Lösungen des Optimierungsproblems (2.6). Smith (1918) bestimmte die optimalen Versuchspläne⁵ für $d \leq 6$ durch individuelle Rechnung für jedes d einzeln. Mit dieser (aus heutiger Sicht komplizierten) Rechnung war es nicht möglich eine allgemeine Aussage für alle $d \in \mathbb{N}$ zu erhalten. Allerdings merkte sie an, dass Polynomregression von höherem als sechstem Grad wohl kaum von praktischer Bedeutung ist. Dem kann auch heute noch nicht widersprochen werden...

Nichtsdestotrotz war aus mathematischer Sicht eine Rechnung für allgemeines $d \in \mathbb{N}$ interessant. Dies führte Guest (1958) für die G - und Hoel (1958) für die D -Optimalität durch. Die Übereinstimmung der optimalen Versuchspläne motivierte dann den generellen Beweis der Übereinstimmung von Kiefer und Wolfowitz (1960).

Im folgenden Satz geben wir den \mathbf{c} -optimalen (mit $\mathbf{c} = \mathbf{e}_k$) und D -optimalen Versuchsplan für Polynomregression an.

⁵Genaugenommen bestimmte sie die G -optimalen Versuchspläne, die erst mit dem Satz von Kiefer und Wolfowitz im Jahr 1960 auch D -optimal genannt werden dürfen.

Satz 2.40 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \in \mathbb{N}$.

a) Der \mathbf{e}_k -optimale Versuchsplan hat jeweils Masse $1/(2(k-1))$ in den Punkten $-1, 1$ und jeweils Masse $1/(k-1)$ in den Punkten $\cos(\pi j/(k-1))$, $j = 1, \dots, k-2$.

b) Der D -optimale Versuchsplan hat jeweils Masse $1/k$ auf den k Nullstellen des Polynoms

$$(1-x^2) \cdot P'_{k-1}(x),$$

wobei P_{k-1} das Legendre-Polynom vom Grad $k-1$ ist.

Beweis: a) Siehe Kiefer und Wolfowitz (1959), Dette und Studden (1997), Seite 151 oder Pukelsheim (1993), Seite 230-231.

b) Siehe z.B. Dette und Studden (1997), Seite 149, oder Pukelsheim (1993), Seite 214-216.

Bemerkung 2.41 (Invarianz der \mathbf{e}_k -Optimalität für Polynomregression) Im Falle der Polynomregression lassen sich \mathbf{e}_k -optimale Versuchspläne auf einem beliebigen Versuchsbereich $\mathcal{E} = [w-v, w+v]$, $v > 0, w \in \mathbb{R}$, dadurch gewinnen, dass man das Problem auf $\tilde{\mathcal{E}} = [-1, 1]$ mit einer linearen Transformation überführt. Es ist also gerechtfertigt, wie bei der D -Optimalität auch bei der \mathbf{e}_k -Optimalität ohne Beschränkung der Allgemeinheit den Versuchsbereich $[-1, 1]$ zu betrachten. Dass dieser Sachverhalt gilt, wurde bereits von Studden (1980) angemerkt, siehe auch Dette und Studden (1997), Seite 151, wo der Sachverhalt mit Hilfe von kanonischen Momenten bewiesen wird. Wir beweisen den Sachverhalt nachfolgend mit Satz 2.36.

Man betrachte die bijektive Transformation

$$V : [w-v, w+v] \rightarrow [-1, 1], \quad t \mapsto \frac{t-w}{v}, \quad (2.29)$$

womit \mathcal{E} auf $\tilde{\mathcal{E}} = [-1, 1]$ abgebildet wird. Nach Satz 2.36 ist $\xi \in \Xi$ genau dann \mathbf{e}_k -optimal in Ξ , wenn

$$\forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : \left| \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k \right) (y) \right| \leq \left| \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k \right) (z) \right|. \quad (2.30)$$

Auf \mathcal{E} betrachten wir die Regressionsfunktion $f : [w-v, w+v] \rightarrow \mathbb{R}^k$, $t \mapsto (1, t, \dots, t^{k-1})^\top$ und auf $\tilde{\mathcal{E}}$ die Funktion $\tilde{f} : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}^k$, $x \mapsto (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$ (d.h. f und \tilde{f} unterscheiden sich lediglich durch den unterschiedlichen Definitionsbereich). Weiter sei $\tilde{\xi}$ der Versuchsplan auf $[-1, 1]$, der dem Bildmaß von ξ (Versuchsplan auf $[w-v, w+v]$) unter V entspricht, d.h. $\tilde{\xi}(A) = \xi(vA + w)$, $A \in$

$\mathcal{B}|_{[-1,1]}$. Es gilt für $x \in \tilde{\mathcal{E}} = [-1, 1]$ und $t = V^{-1}(x) \in \mathcal{E} = [w - v, w + v]$:

$$\begin{aligned} \text{pr}_{[\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_{k-1}]^\perp}^{L^2(\tilde{\xi})} \tilde{f}_k(x) &= \text{pr}_{[\tilde{f}_1 \circ V, \dots, \tilde{f}_{k-1} \circ V]^\perp}^{L^2(\xi)} \tilde{f}_k(V(t)) \\ &= \text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} \left(\frac{t - w}{v} \right)^{k-1} \\ &= v^{-(k-1)} \text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} \left(t^{k-1} - (k-1)wt^{k-2} + \dots \right) \\ &= v^{-(k-1)} \text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k(t). \end{aligned}$$

Da es auf den Faktor $v^{-(k-1)}$ in (2.30) nicht ankommt, ist also ξ genau dann \mathbf{e}_k -optimal auf $[w - v, w + v]$, wenn $\tilde{\xi}$ \mathbf{e}_k -optimal auf $[-1, 1]$ ist.

2.6.2 Change-Point-Regression

Change-Point-Regressionsmodelle sind Modelle, bei denen eine bestimmte Regressionsart nur bis zu einem (bekannten oder unbekanntem) Punkt $\tau \in \mathcal{E}$ vorliegt. Nach diesem Punkt (dies kann z.B. der Zeitpunkt sein, bei dem ein Teil in einer Produktionsmaschine bricht, wenn \mathcal{E} das Produktionszeitintervall ist) liegt ein anderes Regressionsmodell vor. Diese Modelle treten häufig in praktischen Problemstellungen auf, siehe Bischoff und Miller (2000) und in der dort zitierten Literatur oder auch Friede, Miller, Bischoff und Kieser (2001).

Satz 2.42 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, ((x - \tau)^+)^{\kappa})^\top$, $\kappa = 1$, $\tau \in (-1, 1)$ oder $\kappa > 1$, $\tau \in [-1, 1]$ und sei

$$\varrho := \begin{cases} \tau, & \text{für } \kappa = 1, \\ \tau + (1 - \tau)^{\kappa/(\kappa-1)} (2\kappa)^{-1/(\kappa-1)}, & \text{für } \kappa > 1. \end{cases}$$

- Der \mathbf{e}_3 -optimale Versuchsplan hat die Massen $(1 - \varrho)/4, 1/2, (1 + \varrho)/4$, in den Punkten $-1, \varrho, 1$.
- Für $\kappa \in \{1, 2\}$ hat der D -optimale Versuchsplan jeweils Masse $1/3$ in den Punkten $-1, \varrho, 1$.

Hierbei bezeichnet $(y)^+ := \max\{0, y\}$.

Bemerkung 2.43 (Invarianz der \mathbf{e}_k -Optimalität für Change-Point-Regression)

Wie bei der Polynomregression kann man auch bei der hier betrachteten Change-Point-Regression ohne Beschränkung der Allgemeinheit den Versuchsbereich $\tilde{\mathcal{E}} = [-1, 1]$ statt $\mathcal{E} = [w - v, w + v]$, $v > 0$, $w \in \mathbb{R}$, betrachten. Seien $\xi, \tilde{\xi}$ wie in Bemerkung 2.41. Im Unterschied zur Polynomregression ist jedoch hier zu beachten, dass auch der Change-Point $\tau \in [w - v, w + v]$ gemäß der bijektiven

Transformation $V : [w - v, w + v] \rightarrow [-1, 1], t \mapsto \frac{t-w}{v}$ transformiert wird, also $\tilde{\tau} = \frac{\tau-w}{v}$. Daher betrachten wir $f : [w - v, w + v] \rightarrow \mathbb{R}^k, t \mapsto (1, t, ((t - \tau)^+)^{\kappa})^{\top}$ und $\tilde{f} : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}^k, x \mapsto (1, x, ((x - \tilde{\tau})^+)^{\kappa})^{\top}$. Es gilt für $x \in \tilde{\mathcal{E}} = [-1, 1]$ und $t = V^{-1}(x) \in \mathcal{E} = [w - v, w + v]$:

$$\begin{aligned} \text{pr}_{[\tilde{f}_1, \tilde{f}_2]^{\perp}}^{L^2(\tilde{\xi})} \tilde{f}_3(x) &= \text{pr}_{[\tilde{f}_1 \circ V, \tilde{f}_2 \circ V]^{\perp}}^{L^2(\xi)} \tilde{f}_3(V(t)) \\ &= \text{pr}_{[f_1, f_2]^{\perp}}^{L^2(\xi)} \left(\left(\left(\frac{t - \tau}{v} \right)^+ \right)^{\kappa} \right) \\ &= v^{-\kappa} \text{pr}_{[f_1, f_2]^{\perp}}^{L^2(\xi)} f_3(t). \end{aligned}$$

Da es auf den Faktor $v^{-\kappa}$ nicht ankommt, ist also auch bei der Change-Point-Regression ξ genau dann \mathbf{e}_k -optimal auf $[w - v, w + v]$, wenn $\tilde{\xi}$ \mathbf{e}_k -optimal auf $[-1, 1]$ ist.

Beweis von Satz 2.42: a) Siehe Bischoff und Miller (2000), Beispiel 7.2. Dort wurde der \mathbf{e}_3 -optimale Versuchsplan auf $[0, 1]$ berechnet. Mit einer Transformation auf $[-1, 1]$ (vgl. Bemerkung 2.43) erhält man sofort die Behauptung.

b) Der D -optimale Versuchsplan muss aus Ξ^+ sein also insbesondere mindestens $k = 3$ Versuchspunkte haben. Wir betrachten Korollar 2.18 für $K = I$, also $N = M(\xi)^{-1}$. Danach liegen die Punkte aus $\{f(z) \mid z \in \text{eSupp}(\xi)\}$ auf einer Ellipse um $\mathbf{0}_k$ und die Punkte aus $\{f(y) \mid y \in \mathcal{E}\}$ nicht außerhalb dieser Ellipse. Betrachtet man den Schnitt der Ellipse mit der $(x_1 = 1)$ -Ebene, so hat man eine Ellipse im \mathbb{R}^2 (wobei über den Mittelpunkt nichts gesagt werden kann).

Im Falle von $\kappa = 1$ erhält man daher, dass die Trägerpunkte $-1, \tau$ und 1 sein müssen. Da es sich nur um $k = 3$ Trägerpunkte handelt, erhält man mit Lemma 2.20, dass auf diesen jeweils die Masse $1/3$ liegen muss.

Sei nun $\kappa = 2$. Als Trägerpunkte kommen höchstens $\{-1\} \cup [\tau, 1]$ in Frage. Die Funktion $f(x)$ kann nicht in zwei Punkte $\varrho_1, \varrho_2 \in [\tau, 1), \varrho_1 \neq \varrho_2$, mit der Ellipse übereinstimmen, ohne sie zu schneiden. Wir beweisen dies mit einem Widerspruchsbeweis. Dazu betrachten wir die $(x_1 = 1)$ -Ebene, wobei wir die x_3 -Koordinate als Funktion von der x_2 -Koordinate betrachten, d.h. die Funktion $f(x)$ wird wegen $f_2(x) = x$ in der $(x_1 = 1)$ -Ebene durch $f_3(x)$ beschrieben. Sei $g(x), x \in [y_1, y_2]$, der untere Rand der Ellipse. Wir nehmen an, dass $\varrho_1, \varrho_2 \in [y_1, y_2] \cap [-1, 1]$ existieren mit $\varrho_1 < \varrho_2$, so dass

$$f_3(\varrho_i) = g(\varrho_i), \quad i = 1, 2, \quad (2.31)$$

$$f_3'(\varrho_i) = g'(\varrho_i), \quad i = 1, 2 \quad (2.32)$$

und dass

$$\forall x \in [\varrho_1, \varrho_2]: \quad f_3(x) \geq g(x). \quad (2.33)$$

Da g der Rand einer Ellipse ist, kann man zeigen, dass für die Funktion $x \mapsto g'(x)$ gilt:

$$g'(x) \text{ ist auf } [y_1, (y_1 + y_2)/2] \text{ strikt konkav und auf } [(y_1 + y_2)/2, y_2] \text{ strikt konvex.} \quad (2.34)$$

Auf $[\varrho_1, \varrho_2]$ gilt $f_3(x) = (x - \tau)^2$, also ist f_3' linear auf $[\varrho_1, \varrho_2]$. Betrachten wir die Funktionen f_3' und g' , so folgt aus $f_3(\varrho_1) = g(\varrho_1)$, (2.32), (2.33) und (2.34), dass

$$\forall x \in (\varrho_1, \varrho_2) : f_3'(x) > g'(x).$$

Dies steht im Widerspruch zu $f_3(\varrho_2) = g(\varrho_2)$.

Also kommen nur drei Trägerpunkte $-1, \varrho, 1$ mit $\varrho \in [\tau, 1)$ in Frage. Die Masse auf den Trägerpunkten ist also wieder $1/3$ nach Lemma 2.20.

Es bleibt also noch die Berechnung von $\varrho \in [\tau, 1)$. Diese führen wir durch Maximierung der Determinante von $M(\xi) = M(\xi_\varrho)$ durch (also über die Definition der D -Optimalität), was in diesem Falle einfacher als die Verwendung von Korollar 2.18 ist. Die Informationsmatrix ist

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\varrho}{3} & \frac{1}{3}((\varrho - \tau)^2 + (1 - \tau)^2) \\ \frac{\varrho}{3} & \frac{\varrho^2 + 2}{3} & \frac{1}{3}(\varrho(\varrho - \tau)^2 + (1 - \tau)^2) \\ \frac{1}{3}((\varrho - \tau)^2 + (1 - \tau)^2) & \frac{1}{3}(\varrho(\varrho - \tau)^2 + (1 - \tau)^2) & \frac{1}{3}((\varrho - \tau)^4 + (1 - \tau)^4) \end{pmatrix}.$$

Die Determinante dieser Matrix ist

$$\frac{1}{27}((\varrho + 1)(1 - \tau)^2 - 2(\varrho - \tau)^2)^2.$$

Die Funktion $\varrho \mapsto \frac{1}{27}((\varrho + 1)(1 - \tau)^2 - 2(\varrho - \tau)^2)^2$ ist stetig auf $[\tau, 1]$ und differenzierbar auf $(\tau, 1)$. Daher muss das Maximum der Funktion entweder in $\varrho = \tau$, in $\varrho = 1$ oder in einer Stelle $\varrho \in (\tau, 1)$ liegen, in der die Ableitung von $\varrho \mapsto (\varrho + 1)(1 - \tau)^2 - 2(\varrho - \tau)^2$ verschwindet. Die Ableitung ist:

$$(1 - \tau)^2 - 4(\varrho - \tau)$$

und durch Nullsetzen erhält man

$$(1 - \tau)^2 - 4(\varrho - \tau) = 0 \iff 4^{-1}(1 - \tau)^2 = (\varrho - \tau) \iff \varrho = 4^{-1}(1 + \tau)^2.$$

Da die Ableitung in $\varrho = \tau$ positiv und in $\varrho = 1$ negativ ist, wird das Maximum für

$$\varrho = 4^{-1}(1 + \tau)^2 = \tau + (2\kappa)^{-1/(\kappa-1)}(1 - \tau)^{\kappa/(\kappa-1)}$$

angenommen. □

Bei Change-Point-Problemen spielen auch unstetige Regressionsfunktionen eine wichtige Rolle. Nachfolgend betrachten wir einen solchen Fall. In diesem Fall existiert kein optimaler Versuchsplan.

Satz 2.44 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \mathbf{1}_{[\tau, 1]}(x))^\top$, $\tau \in (-1, 1]$. Dann gibt es keinen \mathbf{e}_3 -optimalen und keinen D -optimalen Versuchsplan in Ξ .

Beweis: Nichtexistenz des \mathbf{e}_3 -optimalen Versuchsplans: Angenommen $\xi^* \in \Xi$ wäre \mathbf{e}_3 -optimal. ξ^* muss mindestens drei Massepunkte haben. Wir verwenden nun Satz 2.36.

Da $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3$ eine Gerade ist, muss es zu $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3$ zwei parallele Geraden mit demselben Abstand von $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3$ geben, so dass f_3 in den Massepunkten von ξ^* mit einer dieser Geraden übereinstimmt und alle anderen Punkte von der Funktion f_3 zwischen diesen Geraden liegen. Die beiden parallelen Geraden müssen durch $(-1, 0)$, $(\tau, 1)$ und $(1, 1)$ gehen.

1. Möglichkeit: Die beiden parallelen Geraden sind die Konstanten 0 und 1, also müsste $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3 = \frac{1}{2}$ sein. Es gibt aber kein $\xi \in \Xi$, für das $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi)} f_3 = \frac{1}{2}$ gilt, denn

$$\forall \xi \in \Xi \setminus \{\delta_\tau\} : \int_{\mathcal{E}} \left(f_3(x) - \left(\frac{1}{2} + \frac{x - \tau}{4} \right) \right)^2 \xi(dx) < \int_{\mathcal{E}} \left(f_3(x) - \frac{1}{2} \right)^2 \xi(dx)$$

und

$$\int_{\mathcal{E}} (f_3(x) - 1)^2 \delta_\tau(dx) = 0 < \frac{1}{4} = \int_{\mathcal{E}} \left(f_3(x) - \frac{1}{2} \right)^2 \delta_\tau(dx).$$

Widerspruch zu $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3 = \frac{1}{2}$.

2. Möglichkeit (falls $\tau \leq 0$, denn $\tau < 0$ geht nicht): Die beiden parallelen Geraden sind die Gerade durch $(-1, 0)$, $(\tau, 1)$ und die Gerade durch $(-\tau, 0)$, $(1, 1)$, also $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3 = \frac{1}{2} + \frac{x}{\tau+1} =: g_1(x)$. Der optimale Versuchsplan ξ^* kann nur Masse in $-1, \tau, 1$ haben, andererseits muss Masse auf allen drei Punkten liegen. Sei $g_2(x)$ die Gerade durch $(\tau, g_1(\tau))$ und $(1, 1)$ (also $g_2(\tau) = g_1(\tau)$). Es gilt für alle ξ , die Masse in den Punkten $-1, \tau, 1$ haben:

$$\int_{\mathcal{E}} (f_3(x) - g_2(x))^2 \xi(dx) < \int_{\mathcal{E}} (f_3(x) - g_1(x))^2 \xi(dx).$$

Widerspruch zu $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3 = g_1(x)$.

Nichtexistenz des D -optimalen Versuchsplans: Angenommen, ξ wäre ein D -optimaler Versuchsplan in Ξ . Nach Korollar 2.18 für $K = I$, also $N = M(\xi)^{-1}$ liegen die Punkte aus $\{f(z) \mid z \in \text{eSupp}(\xi)\}$ auf einer Ellipse um $\mathbf{0}_k$ und die Punkte aus $\{f(y) \mid y \in \mathcal{E}\}$ nicht außerhalb dieser Ellipse. Betrachtet man den Schnitt der Ellipse mit der $(x_1 = 1)$ -Ebene, so hat man eine Ellipse im \mathbb{R}^2 (wobei über den Mittelpunkt nichts gesagt werden kann). Man erhält daher, dass die Trägerpunkte $-1, \tau$ und 1 sein müssen. Da es sich nur um $k = 3$ Trägerpunkte handelt, erhält man mit Lemma 2.20, dass auf diesen jeweils die Masse $1/3$ liegen muss. Es müsste also

$$\xi = \frac{1}{3} \cdot \delta_{-1} + \frac{1}{3} \cdot \delta_\tau + \frac{1}{3} \cdot \delta_1$$

gelten. Wir definieren nun für $a \in (-1, \tau)$:

$$\xi_a = \frac{1}{3} \cdot \delta_a + \frac{1}{3} \cdot \delta_\tau + \frac{1}{3} \cdot \delta_1.$$

Man kann nachrechnen, dass

$$\forall a \in (-1, \tau) : \det(M(\xi)) = \frac{1}{27}(\tau - 1)^2 = \det(M(\xi_a))$$

gilt. Folglich ist auch ξ_a D -optimal in Ξ . Dies kann aber nach Korollar 2.18 nicht der Fall sein. Widerspruch. \square

Aus dem Satz von Kiefer und Wolfowitz (Satz 2.23) folgt, dass für das vorangehende Beispiel auch kein G -optimaler Versuchsplan existiert.

2.6.3 Trigonometrische Regression

Sei

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi}_{\text{Trig}} := \{ \xi \in \tilde{\Xi} \mid & \xi \text{ hat jeweils Masse } 1/m \text{ auf } m \geq 2d + 1, m \in \mathbb{N} \text{ Trägerpunkten } x_i, \\ & \text{für die gilt } x_2 - x_1 = x_3 - x_2 = \dots = x_m - x_{m-1} = x_1 - x_m + 2 = 2/m \} \end{aligned}$$

und sei $\Xi_{\text{Trig}} := \overline{\text{Konv}(\tilde{\Xi}_{\text{Trig}})}$ die Menge aller Konvexkombinationen von Elementen aus $\tilde{\Xi}_{\text{Trig}}$ und aller Grenzwerte von Folgen solcher Konvexkombinationen.

Satz 2.45 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, \sin(\pi x), \cos(\pi x), \dots, \sin(\pi x d), \cos(\pi x d))^T$, $d \in \mathbb{N}$, $k = 2d + 1$.

- Der \mathbf{e}_k -optimale Versuchsplan hat Masse $\frac{1}{k-1}$ in den Punkten $-1 + \frac{1}{d}, -1 + \frac{2}{d}, \dots, 1 - \frac{1}{d}$ und Masse $\frac{1}{k-1}$ beliebig auf den Punkten -1 und 1 verteilt.
- Der \mathbf{e}_{k-1} -optimale Versuchsplan hat Masse $\frac{1}{k-1}$ in den Punkten $-1 + \frac{1}{k-1}, -1 + \frac{3}{k-1}, -1 + \frac{5}{k-1}, \dots, 1 - \frac{1}{k-1}$.
- $\xi \in \Xi$ ist D -optimal, wenn $\xi \in \Xi_{\text{Trig}}$. Insbesondere ist die Gleichverteilung auf $[-1, 1]$ D -optimal.

Beweis: a), b) Siehe Dette und Melas (2001).

c) Siehe z.B. Pukelsheim (1993), Seite 241-243, für $\xi \in \tilde{\Xi}_{\text{Trig}}$. Dort wird gezeigt, dass ξ genau dann

D -optimal ist, wenn $M(\xi) = \text{diag}(1, 1/2, 1/2, \dots, 1/2, 1/2)$ und dass für $\xi \in \tilde{\Xi}_{\text{Trig}}$ die Momentenmatrix diese Gestalt hat. Dass $M(\xi) = \text{diag}(1, 1/2, 1/2, \dots, 1/2, 1/2)$ auch für $\xi \in \Xi_{\text{Trig}}$ gilt, ist eine unmittelbare Konsequenz.

Spezialfälle des Satzes sind bereits in Hoel (1965), Seite 1100, Karlin und Studden (1966), Seite 347, und Federov (1972), Kapitel 2.4, bewiesen worden. In Karlin und Studden (1966) findet dabei auch die Optimalität der Gleichverteilung Erwähnung. \square

Es ist anzumerken, dass Dette und Melas (2001) auch \mathbf{e}_i -optimale Versuchspläne für etliche $i < k - 1$ angeben und dass sie für bestimmte Fälle \mathbf{e}_i -optimale Versuchspläne für f auf Intervallen $[-c, c]$, $c \in (0, 1)$, bestimmen. Weiter sei für D -optimale Versuchsplänen auf Intervallen $[c_1, c_2]$ auf Dette, Melas und Biedermann (2002) verwiesen. Wu (2002) betrachtet trigonometrische Regression zum Grad $d = 1$ für D -, A - und E -optimale Versuchspläne auf einem Versuchsbereich $[c_1, c_2]$.

2.7 Gleichzeitige Betrachtung mehrerer Optimalitätskriterien

Bisher haben wir, z.B. in (2.6), Probleme der Gestalt behandelt, dass ein bestimmtes Kriterium Ψ in einer Menge (Ξ oder Υ) maximiert werden soll. In praktischen Problemstellungen hat man aber oft den Wunsch, einen Versuchsplan zu finden, der bezüglich mehrerer Kriterien Ψ_1, \dots, Ψ_l ($l \in \mathbb{N}$) „gut“ abschneidet.

Beispielsweise könnte gefordert werden, dass die Optimalitätskriterien bezüglich mehrerer in Abschnitt 2.1 vorgestellten Kriterienfunktionen gute Ergebnisse liefern, z.B. $\Psi_1(M) = \det(M)$ und $\Psi_2(M) = 1/\text{Spur}(M^{-1})$, also das D - und das A -Kriterium.

Ein wichtiger in der Praxis auftretender Fall ist, dass man nicht von vorneherein sagen kann, welches Regressionsmodell (1.1) vorliegt (d.h. wie die Regressionsfunktion f aussieht). Es kommen unter Umständen mehrere Modelle in Frage und man will einerseits mit den Daten Aussagen darüber treffen, welches der Modelle vorliegt, andererseits aber auch über die unbekannt Parameter in den Modellen Aussagen machen. Es ergeben sich damit mehrere verschiedene Optimalitätskriterien und man will versuchen, mit einem Versuchsplan alle Kriterien möglichst groß zu machen. Wir werden in Abschnitt 3.1 eine Problemstellung motivieren, bei der zwei unterschiedliche Optimalitätskriterien für zwei verschiedene Modelle betrachtet werden.

Es ist anzumerken, dass Optimierungsprobleme in multivariaten Regressionsmodellen (mit korrelierten Fehlern) ebenso auf Problemstellungen führen, in denen Optimalitätskriterien für unterschied-

liche Regressionsmodelle zu betrachten sind. Dies wird in Krafft und Schäfer (1992) und in Bischoff (1993, 1995) beschrieben.

Da wir in dieser Arbeit nur den Fall von zwei Optimalitätskriterien Ψ_1, Ψ_2 betrachten, schränken wir uns im Folgenden auf diesen Fall ein, obwohl eine Verallgemeinerung auf $\Psi_1, \dots, \Psi_l, l > 2$, möglich wäre.

In der Regel wird der Ψ_1 -optimale und der Ψ_2 -optimale Versuchsplan nicht identisch sein. Es stellt sich dann die Frage, was ein „optimaler“ Versuchsplan für beide Kriterien ist. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die Kriterien zu verknüpfen. Wir stellen die drei wichtigsten in den Abschnitten 2.7.1 bis 2.7.3 vor und formulieren dabei jeweils eine entsprechende Maximierungsaufgabe in einer geeignet gewählten Menge Υ . Eine Diskussion über die Verknüpfung von verschiedenen Kriterien findet sich zum Beispiel in Pukelsheim (1993), Kap. 11 und in Dette und Franke (2000).

2.7.1 Sequentielles Optimieren von zwei Optimalitätskriterien

Eine naheliegende Vorgehensweise ist Folgende: Ein gewisser Anteil $r \in [0, 1]$ aller Beobachtungen wird als approximativ Ψ_2 -optimaler Versuchsplan in Ξ gewählt. Der restliche Anteil der Beobachtungen soll dann so gewählt werden, dass für den Gesamtversuchsplan $\xi \in \Xi$ gilt: ξ ist Lösung von

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi_1(M(\xi)) \text{ in } \Upsilon \cap \mathcal{S}(K) \text{ mit } \Upsilon = \{(1-r)\xi_1 + r\xi_2 \mid \xi_1 \in \Xi, \xi_2 = \operatorname{argmax} \Psi_2(\cdot)\}.$$

Eine Anwendung dieser Vorgehensweise wird in Abschnitt 3.1.2 beschrieben.

In manchen praktischen Problemen kann man die beiden Teilerperimente sequentiell durchführen. Dazu wählt man in einem ersten Teilerperiment die Versuchspunkte Ψ_2 -optimal und wählt nach Beendigung des ersten Teilerperiments den restlichen Anteil der Beobachtungen so, dass der Gesamtversuchsplan Ψ_1 -optimal wird. Es ist dabei möglich, gegebenenfalls das Experiment nach der ersten Stufe abubrechen, wenn die Ergebnisse eine Fortsetzung nicht mehr sinnvoll erscheinen lassen.

Das beschriebene Optimierungsproblem ist verwandt mit der Bestimmung sogenannter Bayesschen Versuchsplänen. Sei M_0 die Inverse der Kovarianzmatrix der a priori Verteilung von θ . Dann ist nach Pukelsheim (1993), Kap. 11, das Bayes-Optimierungsproblem (formuliert mit Momentenmatrizen):

$$\text{Maximiere } M \mapsto \Psi_1(M) \text{ in } \{(1-r)M_1 + rM_0 \mid M_1 \in M(\Xi)\} \cap M(\mathcal{S}(K)),$$

wobei $1 - r$ als „Stichproben-Gewicht“ (Gewicht der neuen Stichprobe im Verhältnis zur Gesamtinformation aus neuer Stichprobe und Vorbewertung) bezeichnet wird.

Für Vorbewertungen, bei denen M_0 die spezielle Gestalt

$$M_0 = \int_{\mathcal{E}} ff^\top d\xi_0, \quad \xi_0 \in \Xi, \quad (2.35)$$

hat⁶, ist der Bayes-optimale Versuchsplan die Lösung von

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi_1(M(\xi)) \text{ in } \Upsilon \cap \mathcal{S}(K) \text{ mit } \Upsilon = \{(1 - r)\xi_1 + r\xi_0 \mid \xi_1 \in \Xi\}.$$

Man hat also das gleiche Optimierungsproblem, wie beim sequentiellen Optimieren zweier Kriterien mit dem Unterschied, dass die Bestimmung von $\xi_2 = \operatorname{argmax} \Psi_2(\cdot)$ entfällt und man stattdessen den Versuchsplan ξ_0 aus der Vorbewertung (2.35) einsetzt. Wir werden diese Parallelität später ausnutzen, da wir so für unser eigentlich interessierendes (nicht-Bayessches) Optimierungsproblem zum Teil auf Lösungen zurückgreifen können, die im Rahmen von Bayes-optimalen Versuchsplänen in der Literatur schon bekannt sind.

2.7.2 Optimieren mit Minimum-Effizienz-Forderung bezüglich eines anderen Kriteriums

Zunächst definieren wir die Ψ_i -Effizienz eines Versuchsplans $\xi \in \Xi$ durch

$$\operatorname{Eff}_{\Psi_i}(\xi) := \Psi_i(M(\xi)) / \max_{\tilde{\xi} \in \Xi} \Psi_i(M(\tilde{\xi})), \quad i = 1, 2.$$

Eine mögliche Forderung an den zu wählenden Versuchsplan ξ ist:

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi_1(M(\xi)) \text{ in der Menge } \Upsilon \cap \mathcal{S}(K) \text{ mit } \Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \operatorname{Eff}_{\Psi_2}(\xi) \geq c\} \quad (2.36)$$

für ein fest vorgegebenes $c \in [0, 1]$. Dieser Zugang wurde wohl zuerst von Stigler (1971) verwendet. Er definierte die „ c -eingeschränkte D -Optimalität“, für die der D -optimale Versuchsplan in der Menge der Versuchspläne mit \mathbf{e}_k -Effizienz $\geq c$ gesucht wird. Wir werden in Abschnitt 3.1.3 eine Anwendung für diesen Zugang betrachten.

⁶Diese Gestalt wird man erhalten, wenn die Vorinformation durch ein Experiment auf \mathcal{E} mit Versuchsplan ξ_0 zustande gekommen ist.

2.7.3 Optimieren von gewichteten Mitteln zweier Kriterien

Eine Alternative zu den oben beschriebenen Vorgehensweisen ist, das gewichtete Mittel

$$\Psi(\cdot) = w\Psi_1(\cdot) + (1 - w)\Psi_2(\cdot), \quad w \in [0, 1],$$

der Kriterien Ψ_1 und Ψ_2 zu bilden und dann den Ψ -optimalen Versuchsplan zu suchen:

$$\text{Maximiere } \xi \mapsto \Psi(M(\xi)) \text{ in der Menge } \Upsilon \cap \mathcal{S}(K). \quad (2.37)$$

Die Idee, gewichtete Mittel mehrerer (auch unendlich vieler) Kriterien zu optimieren, wird Lauter (1974, 1976) zugeschrieben. Als Kriterien betrachtet sie (unter anderem) $\det(M_i)$ und $\log \det(M_i)$, wobei M_i die Momentenmatrizen verschiedener in Frage kommender Modelle sind.

Cook und Wong (1994) zeigen unter sehr milden Voraussetzungen, dass die Optimalitatsprobleme (2.36) und (2.37) aquivalent sind. Genauer gesagt, zeigten sie, dass zu einem vorgegebenen $c \in [0, 1]$ ein $w \in [0, 1]$ existiert und umgekehrt zu einem vorgegebenen $w \in [0, 1]$ ein $c \in [0, 1]$ existiert, so dass die optimalen Versuchsplane ubereinstimmen.

Kapitel 3

Einschränkungen aus der Praxis an den Versuchsplan

3.1 Versuchspunktwahl mit Kontrolle des vermuteten Regressionsmodells

In diesem Abschnitt betrachten wir ein Problem, das bei der praktischen Anwendung der Theorie der Versuchsplanung auftritt. Man nimmt zwar in der Praxis oft an, dass ein Regressionsmodell wie (1.1) vorliegt, man wird sich aber so gut wie nie sicher sein, ob diese Modellvoraussetzung auch tatsächlich erfüllt ist. Unvohergesehenen Einflüsse - kein Praktiker wird sie ausschließen - beeinflussen das Modell und es ist wünschenswert, dass man mit Hilfe der Beobachtungen eine solche Abweichung vom vermeintlich zugrundeliegenden Modell möglichst gut erkennt.

Die traditionelle Versuchsplanung für Regressionsmodelle, von der einige Ergebnisse in Kapitel 2 vorgestellt wurden, findet bei Praktikern wenig Anklang. Ein Hauptgrund dafür ist, dass bei optimalen Versuchsplänen meist eine solche Modellüberprüfung nur eingeschränkt oder gar nicht möglich ist. In der traditionellen Versuchsplanung werden meist optimale Versuchspläne bezüglich eines festen Modells berechnet. Die Form des Modells beeinflusst dabei entscheidend, welcher Versuchsplan als optimal ermittelt wird. Betrachten wir folgendes Beispiel.

Beispiel 3.1 *Ein Produktionsprozess wird beobachtet und man geht davon aus, dass die beobachtete*

Größe linear von der Zeit $x \in \mathcal{E}$ abhängt, d.h.

$$Y_i = \theta_1 + \theta_2 x_i + \varepsilon_i, \quad x_i \in \mathcal{E}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.1)$$

Will man über den Parameter $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2)^\top$ Aussagen treffen, so sagt die traditionelle Versuchsplanung, dass der D-, G-, E-, A- oder \mathbf{e}_2 -optimale Versuchsplan in Ξ die Hälfte der Versuchspunkte in den linken, die andere Hälfte in den rechten Randpunkt des Intervalls \mathcal{E} legt (für die D-, G- und \mathbf{e}_2 -Optimalität sieht man dies mit Satz 2.40). Bei dieser Wahl sind Abweichungen vom Modell nicht zu erkennen. Ein Praktiker wird einen solchen Versuchsplan nicht verwenden. Er will den Produktionsprozess zumindest mit einem Teil der Beobachtungen fortwährend unter Kontrolle haben, da nie ausgeschlossen werden kann, ob z.B. durch ein Bruch eines Teils in der Produktionsmaschine das lineare Modell (3.1) ab einem bestimmten Zeitpunkt nicht mehr vorliegt.

Wir entwickeln in diesem Abschnitt eine Teilmenge Υ von Ξ mit Versuchsplänen, die eine Modellkontrolle möglich machen. In späteren Kapiteln wird es dann das Ziel sein, die traditionellen Optimalitätskriterien auf diese Menge anzuwenden.

3.1.1 Die LOF-Optimalität

Wir stellen nun ein statistisches Modell auf, in dem ein Test auf Korrektheit des Modells durchgeführt werden kann.

Dazu betrachten wir als umfassendes Modell

$$Y_i = g(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

wobei $g : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ eine beliebige Funktion sei. Die Hypothese H_0 ist nun, dass das spezielle Modell (1.1) vorliegt, d.h. $g(x_i) = f(x_i)^\top \boldsymbol{\theta}$, $i = 1, \dots, n$, oder

$$H_0 : Y_i = f(x_i)^\top \boldsymbol{\theta} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

wobei $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_k)^\top \in \mathbb{R}^k$ unbekannt. Einen Test auf das Vorliegen von H_0 nennt man „lack of fit“-Test (LOF-Test). Als Teststatistik für dieses Testproblem kommen verschiedene Statistiken in Frage. Wir unterscheiden nachfolgend drei Fälle. Sei dazu U_0 der von den Vektoren $(f_j(x_i))_{i=1, \dots, n}$, $j = 1, \dots, k$ und U der von den Vektoren $(\mathbf{1}_{\{x_i\}}(x))_{i=1, \dots, n}$, $x \in \mathcal{E}$, erzeugte Unterraum von \mathbb{R}^n . Weiter sei $d = \dim(U)$. U_0 ist der Unterraum für das H_0 -Modell und U der Unterraum für das umfassende Modell (3.2).

1. Die Varianz σ^2 ist bekannt.

Wir können die Statistik

$$LT_1 = \frac{1}{\sigma^2} \|\text{pr}_{U_0^\perp \cap U} Y\|^2$$

für den LOF-Test benutzen, wobei pr_V der Orthogonalprojektor in \mathbb{R}^n auf den Unterraum V von \mathbb{R}^n bezüglich dem euklidischen Skalarprodukt ist. Ein großer Wert von LT_1 spricht gegen die Hypothese H_0 . Daher lehnt der Test die Hypothese ab, wenn LT_1 größer als ein kritischer Wert ist. LT_1 besitzt unter Normalverteilungsannahme (d.h. $\varepsilon_i \sim N(0, 1)$, unabhängig) eine nichtzentrale χ^2 -Verteilung mit $d - k$ Freiheitsgraden. Dabei muss man voraussetzen, dass $d > k$ ist.

2. Die Varianz σ^2 ist unbekannt, mehrere Beobachtungen werden an derselben Stelle gemacht.

In diesem Falle können wir σ^2 in der Teststatistik LT_1 durch einen Schätzer für die Varianz ersetzen. Wir verwenden $\|\text{pr}_{U^\perp} Y\|^2$ als Schätzer für σ^2 und die Statistik

$$LT_2 = \frac{n - d}{d - k} \frac{\|\text{pr}_{U_0^\perp \cap U} Y\|^2}{\|\text{pr}_{U^\perp} Y\|^2}.$$

Hierbei sollte $n - d$ für wachsendes n gegen ∞ streben, um die Konsistenz des Varianzschätzers zu gewährleisten. Ein großer Wert von LT_2 spricht gegen die Hypothese H_0 . Daher lehnt der Test die Hypothese ab, wenn LT_2 größer als ein kritischer Wert ist. LT_2 besitzt unter Normalverteilungsannahme eine nichtzentrale F -Verteilung mit $d - k$ und $n - d$ Freiheitsgraden. Diesen weitverbreiteten F -Test verwendet Wiens (1991) als LOF-Test.

3. Die Varianz σ^2 ist unbekannt, alle Beobachtungen können an verschiedenen Stellen sein.

An die Regressionsfunktion werden aber geeignete Glattheitsforderungen gestellt. In diesem Falle bieten sich Tests an, die nichtparametrische Schätzer für die Regressionsfunktion (nichtparametrische Kurven-Schätzer) verwenden. Biedermann und Dette (2001) geben drei solche Teststatistiken an.

Es ergibt sich eine bemerkenswerte Aussage: Sowohl die Tests, die auf LT_1 und LT_2 basieren, als auch die drei auf nichtparametrischen Kurven-Schätzern beruhenden Tests haben asymptotisch (für $\xi_n \xrightarrow{st} \xi$, $n \rightarrow \infty$) eine Güte, die durch

$$B(g, \xi) := \frac{1}{\sigma^2} \int_{\mathcal{E}} \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)} g \right) (x)^2 \xi(dx)$$

charakterisiert ist, wobei $\text{pr}_{[f_1, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)}$ der Orthogonalprojektor auf $[f_1, \dots, f_k]^\perp$ in $L^2(\xi)$ ist (man vergleiche dazu Bischoff und Miller (2000), Wiens (1991) für LT_1 und LT_2 und Biedermann und Dette

(2001) für die Tests, die auf nichtparametrischen Kurven-Schätzern beruhen). Je größer $B(g, \xi)$ ist, desto größer ist asymptotisch die Güte. Die Idee ist nun ein Minimax-Prinzip: Maximiere über Ξ die schlechtmöglichste Güte, d.h. das Minimum von $B(g, \xi)$ über g aus der Alternative. Hierzu können wir das Minimum nicht über die gesamte Alternative bilden, sondern nur über eine Teilmenge, die besser von der Hypothese getrennt ist. Wir betrachten daher für eine feste Gewichtsfunktion $v : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$ und festes $c > 0$ die Menge

$$\mathcal{F}_{v,c} := \left\{ g \in L^2(v \cdot \lambda|_{\mathcal{E}}) \mid \int_{\mathcal{E}} g^2 v \, d\lambda \geq c, \int_{\mathcal{E}} f \cdot g \cdot v \, d\lambda = \mathbf{0}_k \right\}.$$

Hierbei haben wir die folgende Schreibweise verwendet: Für ein Maß ξ und eine Borel-messbare Funktion $w : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$ sei $w \cdot \xi$ das durch

$$(w \cdot \xi)(A) := \int_A w \, d\xi, \quad A \in \mathcal{B}|_{\mathcal{E}},$$

definierte Maß. Wir setzen im Nachfolgenden voraus, dass $\int_{\mathcal{E}} v \, d\lambda = 1$ ist, also ist $v \cdot \lambda$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß. Dadurch wird einerseits die Notation vereinfacht, andererseits stellt dies keine Einschränkung dar, da $\mathcal{F}_{v,c} = \mathcal{F}_{v/\rho, c/\rho}$ für jedes $\rho > 0$.

Wir definieren

Definition 3.2 *Ein Versuchsplan $\xi_0 \in \Xi$ heißt LOF-optimal, wenn gilt*

$$\max_{\xi \in \Xi} \min_{g \in \mathcal{F}_{v,c}} B(g, \xi) = \min_{g \in \mathcal{F}_{v,c}} B(g, \xi_0).$$

Die relative LOF-Effizienz eines Versuchsplans $\xi_1 \in \Xi$ ist gegeben durch

$$\text{Eff}_{LOF}(\xi_1) = \min_{g \in \mathcal{F}_{v,c}} B(g, \xi_1) / \min_{g \in \mathcal{F}_{v,c}} B(g, \xi_0) \in [0, 1],$$

wobei ξ_0 ein LOF-optimaler Versuchsplan ist.

Im Folgenden sei $\mathcal{F}_{v,c}$ fest.

3.1.2 Sequentielles Optimieren

In Wiens (1991) wird der LOF-optimale Versuchsplan für $v \equiv \text{const}$ berechnet. Biedermann und Dette (2001) verallgemeinern dieses Resultat für beliebige v . Sie betrachten außerdem heteroskedastische Fehler, die wir in dieser Arbeit allerdings nicht betrachten. Es gilt nach den beiden zitierten Arbeiten:

Satz 3.3 *Der LOF-optimale Versuchsplan ist das Wahrscheinlichkeitsmaß $v \cdot \lambda$ (λ Lebesgue-Maß auf \mathcal{E}).*

Wir gehen wie in Abschnitt 2.7.1 vor: Ein gewisser Anteil $r \in [0, 1]$ aller Beobachtungen soll approximativ wie der LOF-optimale Versuchsplan in Ξ gewählt werden. Der restliche Anteil der Beobachtungen soll dann so gewählt werden, dass der Gesamtversuchsplan $\xi \in \Xi$ unter Annahme von (1.1) gute Aussagen für den unbekannt Parameter θ liefert, d.h. ein Optimalitätskriterium erfüllt. Umformuliert unter Ausnutzung von Satz 3.3 bedeutet dies: Wir haben als Menge der asymptotisch durchführbaren Versuchspläne die Menge

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \xi \geq rv \cdot \lambda\},$$

wobei wir hierzu die allgemein übliche Schreibweise

$$\mu \leq \tilde{\mu} \quad : \iff \quad \forall A \in \mathcal{B}|\mathcal{E} : \mu(A) \leq \tilde{\mu}(A)$$

für zwei Maße $\mu, \tilde{\mu}$ verwenden.

In manchen praktischen Problemen lässt sich ein Versuchsplan aus Υ sequentiell anwenden: In einer ersten Stufe werden $r \cdot n$ Versuchspunkte LOF-optimal gewählt. Wenn der LOF-Test die Hypothese nicht ablehnt, geht man von der Richtigkeit des Modells (1.1) aus. Man will dann gute Aussagen für θ und führt daher in einer zweiten Stufe mit den restlichen $(1 - r) \cdot n$ Versuchspunkten einen Versuchsplan durch, so dass der Gesamtversuchsplan z.B. D -optimal in Υ wird. Lehnt der Test dagegen die Hypothese ab, so kann man das Experiment abbrechen. Ein ganz neues Experiment sollte dann geplant werden, nachdem man sich klargeworden ist, was die Ursachen für die Abweichung von der Modellvorstellung waren.

In der Mehrzahl der praktischen Problemstellungen wird aber eine sequentielle Durchführung wie sie eben beschrieben wurde nicht möglich sein. Dennoch ist auch dann die obige Menge Υ durch den Wunsch gerechtfertigt, wenigstens einen Anteil r der Versuchspunkte so zu wählen, dass ein LOF-Test durchgeführt werden kann.

3.1.3 Optimieren mit minimaler Effizienz des LOF-Tests

Interessanterweise lässt sich die Menge Υ aus dem vorherigen Abschnitt auch mit der folgenden Aussage motivieren.

Satz 3.4 Die Menge der Versuchspläne mit relativer LOF-Effizienz größer oder gleich $r \in [0, 1]$ ist gegeben durch

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \xi \geq rv \cdot \lambda\}.$$

Beweis: Der Projektor $\text{pr}_{[f_1, \dots, f_k]^\perp}^{L^2(\xi)}$ in der Definition von $B(g, \xi)$ ändert sich nicht, wenn ξ mit einem positiven Faktor skaliert wird. Für jedes feste $g : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ gilt daher allgemein $B(g, \text{const} \cdot \xi) = \text{const} \cdot B(g, \xi)$ für $\xi \in \Xi, \text{const} > 0$ und speziell $B(g, rv \cdot \lambda) = rB(g, v \cdot \lambda)$ für v wie oben, $r \in [0, 1]$.

Zu zeigen ist nun:

- a) Jeder Versuchsplan $\xi \in \Upsilon$ hat eine LOF-Effizienz größer oder gleich r .
- b) Jeder Versuchsplan $\xi \in \Xi \setminus \Upsilon$ hat eine LOF-Effizienz kleiner als r .

a) Mit $B(g, rv \cdot \lambda) = rB(g, v \cdot \lambda)$ und der Monotonie von $B(g, \cdot)$ folgt diese Behauptung.

b) Wir modifizieren den Beweis von Wiens (1991) bzw. von Biedermann und Dette (2001) für unseren Fall. Sei $\xi \in \Xi \setminus \Upsilon$ beliebig und das signierte Maß ν sei durch $\nu := \xi - rv \cdot \lambda$ definiert. Es gilt also $\nu(\mathcal{E}) = \xi(\mathcal{E}) - rv \cdot \lambda(\mathcal{E}) = 1 - r$. Nach dem Hahnschen Zerlegungssatz existiert eine Menge $A_1 \in \mathcal{B}|_{\mathcal{E}}$, so dass für alle Mengen $B_1 \in \mathcal{B} \cap A_1, B_2 \in \mathcal{B} \cap \mathcal{E} \setminus A_1$ gilt: $\nu(B_1) \geq 0, \nu(B_2) \leq 0$. Wegen $\xi \in \Xi \setminus \Upsilon$ gilt

$$\nu(A_1) > 1 - r, \quad \nu(\mathcal{E} \setminus A_1) = 1 - r - \nu(A_1) < 0.$$

Wir können eine (disjunkte) Zerlegung $\sum_{j=2}^{k+2} A_j$ von $\mathcal{E} \setminus A_1$ finden, so dass $\nu(A_j) < 0, j = 2, \dots, k+2$.

Weiter gilt

$$rv \cdot \lambda(A_j) = \xi(A_j) - \nu(A_j) \geq -\nu(A_j) > 0, \quad j = 2, \dots, k+2.$$

Sei $\gamma_j := \nu(A_j)$, also $\gamma_1 > 1 - r \geq 0 > \gamma_2, \dots, \gamma_{k+2}, \sum_{j=1}^{k+2} \gamma_j = 1 - r$. Sei $\mathbf{w} = (w_2, \dots, w_{k+2})^\top \neq \mathbf{0}_{k+1}$ eine Lösung der folgenden k Gleichungen mit $k+1$ Unbekannten:

$$\sum_{j=2}^{k+2} w_j \int_{A_j} f(x) v \cdot \lambda(dx) = \mathbf{0}_k.$$

Wir definieren die Regressionsfunktion

$$g_{\mathbf{w}}(x) := \sqrt{c} \cdot \frac{\sum_{j=2}^{k+2} w_j \cdot \mathbf{1}_{A_j}(x)}{\sqrt{\sum_{j=2}^{k+2} w_j^2 v \cdot \lambda(A_j)}},$$

für die

$$\int_{\mathcal{E}} g_{\mathbf{w}}^2(x) v \cdot \lambda(dx) = c, \quad \int_{\mathcal{E}} f(x) g_{\mathbf{w}}(x) v \cdot \lambda(dx) = \mathbf{0}_k,$$

gilt, also $g_{\mathbf{w}} \in \mathcal{F}_{v,c}$. Für $g_{\mathbf{w}}$ gilt

$$\int_{\mathcal{E}} g_{\mathbf{w}}^2(x) \xi(dx) - \int_{\mathcal{E}} g_{\mathbf{w}}^2(x) rv \cdot \lambda(dx) = c \frac{\sum_{j=2}^{k+2} w_j^2 \nu(A_j)}{\sum_{j=2}^{k+2} w_j^2 v \cdot \lambda(A_j)} < 0,$$

also $B(g_{\mathbf{w}}, \xi) < B(g_{\mathbf{w}}, rv \cdot \lambda)$. Mit der Vorbemerkung hat man $B(g_{\mathbf{w}}, \xi) < rB(g_{\mathbf{w}}, v \cdot \lambda) = rc = r \min_{g \in \mathcal{F}_{v,c}} B(g, v \cdot \lambda)$ und ξ hat LOF-Effizienz kleiner r . \square

Unmittelbar aus Satz 3.4 folgt eine interessante Aussage über die LOF-Effizienz eines speziellen Versuchsplans:

Korollar 3.5 Sei $\xi \in \Xi$ und

$$r = \sup\{t \mid \xi \geq tv \cdot \lambda\} \in [0, 1].$$

Dann ist die LOF-Effizienz von ξ gleich r .

3.2 Beschränkung der Lebesgue-Dichte des Versuchsplans

In Abschnitt 3.1 haben wir gesehen, dass aufgrund von Erfordernissen aus der Praxis, manche (theoretisch möglichen) Versuchspläne nicht verwendet werden sollten. Man erhielt eine Untermenge aller Versuchspläne als Menge von durchführbaren Versuchsplänen. In diesem Abschnitt betrachten wir wiederum eine Fragestellung, die durch die Praxis motiviert ist.

3.2.1 Beobachtungen mit fortschreitender Zeit

Nehmen wir an, dass der Versuchsbereich \mathcal{E} ein Zeitintervall ist. In der Praxis treten oft Fälle auf, bei denen höchstens ein Versuch oder höchstens $m \in \mathbb{N}$, m klein, Versuche zu jedem Zeitpunkt durchgeführt werden können. Weiter kann oft aus technischen Gründen die Beobachtungsfrequenz beschränkt sein, z.B. wenn ein Mindestabstand zwischen den Beobachtungen eingehalten werden muss.

Beispiel 3.6 Wir betrachten einen Produktionsprozess in einer Firma, in dem fortlaufend ein bestimmtes Produkt hergestellt wird. Um zu kontrollieren, wie sich die Eigenschaften des Produkts in Abhängigkeit vom Produktionszeitpunkt verhalten, können zu bestimmten Zeitpunkten mit einer Messeinrichtung m Proben aus dem Produktionsprozess entnommen werden. Anschließend werden

sie mit dieser Messeinrichtung untersucht. Während der Zeitdauer der Untersuchung ist die Messeinrichtung blockiert. Sie kann erst wieder für das Ziehen neuer Proben eingesetzt werden, wenn die Untersuchung für die vorher gezogenen Proben abgeschlossen ist. Für das Untersuchen der Proben benötigt man eine feste, bekannte Zeitdauer. Diese Zeitdauer ist also der Mindestabstand zwischen den Beobachtungszeitpunkten.

Wie bisher sei $n \in \mathbb{N}$ die Gesamtzahl der durchzuführenden Beobachtungen. Sei $m \in \mathbb{N}$ die Maximalzahl der möglichen Beobachtungen zu einem Zeitpunkt und sei δ/n für $\delta > 0$ der geforderte Mindestabstand zwischen den verschiedenen Beobachtungszeitpunkten.¹ Die Menge Υ_n der Versuchspläne, die diese Eigenschaften besitzen, ist formal gegeben durch

$$\Upsilon_n = \{\xi_n \in \Xi_n \mid \forall x, y \in \mathcal{E} \text{ mit } x \neq y, \xi_n(x), \xi_n(y) > 0 : \xi_n(x), \xi_n(y) \leq m/n, |x - y| \geq \delta/n\}.$$

Wir berechnen nun die Menge Υ der asymptotisch durchführbaren Versuchspläne.

Lemma 3.7 *Seien $m \in \mathbb{N}$, $\delta > 0$. Die Menge aller Grenzwerte in Ξ von Folgen $(\xi_n)_n$ mit $\xi_n \in \Upsilon_n$ ist gegeben durch*

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \xi \leq (m/\delta)\lambda\} \quad (3.3)$$

(Grenzwerte bezüglich der starken Konvergenz). Insbesondere gilt für alle $\xi \in \Upsilon$: ξ wird dominiert durch λ .

Beweis: Sei $\xi \in \Upsilon$ und F_0 die von ξ induzierte Verteilungsfunktion, Q_0 die rechtsseitig stetige Umkehrfunktion von F_0 . Seien $q(i) := Q_0((im)/n)$, $i = 0, \dots, \lfloor n/m \rfloor$, wobei $\lfloor y \rfloor = \max\{z \in \mathbb{N} \mid z \leq y\}$, und definiere für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$\xi_n = \frac{m}{n} \sum_{i=0}^{\lfloor n/m \rfloor - 1} \delta_{q(i)} + \frac{n - \lfloor n/m \rfloor \cdot m}{n} \delta_{q(\lfloor n/m \rfloor)}.$$

Offensichtlich gilt $\xi_n \in \Xi_n$. Die von ξ_n induzierte Verteilungsfunktion ist gegeben durch

$$\begin{aligned} F_n(x) &= 0, & x < q(0), \\ F_n(x) &= \frac{im}{n}, & x \in [q(i-1), q(i)), \quad i = 1, \dots, \lfloor n/m \rfloor, \\ F_n(x) &= 1, & x \geq q(\lfloor n/m \rfloor). \end{aligned}$$

¹Wir müssen den Mindestabstand mit wachsendem $n \in \mathbb{N}$ kleiner werden lassen, da sonst für hinreichend große n der „Platz“ für die Versuchspunkte aufgebraucht ist.

Es gilt $|F_0(x) - F_n(x)| \leq m/n$ und damit insbesondere $\xi_n \xrightarrow{st} \xi, n \rightarrow \infty$. Weiter ist $q(i) - q(i-1) \geq \delta/n$, denn

$$\frac{m}{\delta} \cdot (q(i) - q(i-1)) = \frac{m}{\delta} \lambda((q(i-1), q(i)]) \geq \xi((q(i-1), q(i))) = F_0(q(i)) - F_0(q(i-1)) = \frac{m}{n},$$

wobei die letzte Gleichheit folgt, da F_0 stetig ist. Also $\xi_n \in \Upsilon_n, n \in \mathbb{N}$.

Sei nun $(\xi_n)_n$ mit $\xi_n \in \Upsilon_n$ eine beliebige Folge mit Grenzwert $\xi \in \Xi$ bezüglich der starken Konvergenz. Sei F_n die von ξ_n induzierte Verteilungsfunktion. Für festes $n \in \mathbb{N}$ sei zu jedem $x \in \text{Supp}(\xi_n)$ ein Teilintervall A_{nx} von \mathcal{E} mit $x \in A_{nx}$ und mit Länge δ/n so gewählt, dass für alle $x, y \in \text{Supp}(\xi_n)$ mit $x \neq y$ gilt $A_{nx} \cap A_{ny} = \emptyset$. Sei die Verteilungsfunktion \tilde{F}_n (und damit auch das zugehörige Maß $\tilde{\xi}_n$) definiert als das Lebesgue-stetige Maß mit Lebesgue-Dichte

$$\tilde{f}_n(x) = \sum_{t \in \text{Supp}(\xi_n)} \frac{n}{\delta} \cdot \xi_n(\{t\}) \cdot \mathbf{1}_{A_{nt}}(x).$$

Wegen $\tilde{f}_n(x) \leq \frac{n}{\delta} \cdot \max_{t \in \text{Supp}(\xi_n)} \xi_n(t) \leq \frac{n}{\delta} \cdot \frac{m}{n} = \frac{m}{\delta}$ gilt dann $\tilde{\xi}_n \in \Upsilon$. Weiter folgt nach Konstruktion $|\tilde{F}_n(x) - F_n(x)| \leq m/n$, also $\tilde{\xi}_n \xrightarrow{st} \xi, n \rightarrow \infty$. Also folgt aus $\tilde{\xi}_n(A) \leq \frac{m}{\delta} \lambda(A)$ für alle $n \in \mathbb{N}$ auch $\xi(A) \leq \frac{m}{\delta} \lambda(A)$ für alle $A \in \mathcal{B}$ und $\xi \in \Upsilon$. \square

Bemerkung 3.8 *Hängt die Anzahl maximal möglicher Beobachtungen von $x \in \mathcal{E}$ ab, d.h. hat man statt $m \in \mathbb{N}$ eine beschränkte Funktion $m : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{N}$, oder hängt der geforderte Mindestabstand δ/n von $x \in \mathcal{E}$ ab ($\delta : \mathcal{E} \rightarrow (c, \infty)$ mit $c > 0$), so erhält man als Menge aller asymptotisch durchführbaren Versuchspläne die Menge*

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \xi \leq b \cdot \lambda\} \tag{3.4}$$

mit einer beschränkten Funktion $b : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$.

3.2.2 Beobachtungen auf räumlichem Versuchsbereich

Denken wir nun bei dem Beobachtungsbereich an eine Strecke, ein Flächenstück oder einen (kompakten) Raumbereich. Nehmen wir weiter an, dass, bevor die Versuche durchgeführt werden, an den Versuchspunkten noch Messstationen errichtet werden müssen. Dann kann es (z.B. aus technischen Gründen) notwendig sein, dass diese Messstationen einen bestimmten Mindestabstand einhalten müssen. An den Messstationen können jeweils nur m Versuche (oft $m = 1$) durchgeführt werden (vgl. zu diesem Beispiel Federov (1989), Cook und Federov (1995)).

Ist der Mindestabstand zwischen den Messstationen δ/n , so erhält man (im eindimensionalen Fall) dieselbe Menge Υ_n als Menge von durchführbaren Versuchsplänen, wie im vorherigen Abschnitt 3.2.1. Damit erhält man auch dieselbe Menge Υ in (3.3) von asymptotischen Versuchsplänen. Wenn m oder δ von $x \in \mathcal{E}$ abhängen, so erhält man entsprechend Υ aus (3.4).

Im zwei- und dreidimensionalen Fall ergeben sich in analoger Weise asymptotische Versuchspläne, und zwar Lebesgue-stetige Maße mit beschränkter (zwei- oder dreidimensionaler) Lebesgue-Dichte. Da wir den mehrdimensionalen Fall in dieser Arbeit nicht weiter betrachten, gehen wir darauf nicht weiter ein.

3.2.3 Beobachtung einer Stichprobe der Grundgesamtheit

Gehen wir davon aus, dass wir über eine Menge von $N \in \mathbb{N}$ Individuen, einer sogenannten Grundgesamtheit, eine Aussage über ein Merkmal machen wollen. Dazu beobachten wir nicht die Merkmale aller Individuen sondern wählen eine Teilmenge dieser Grundgesamtheit, eine sogenannte Stichprobe, aus und beobachten nur bei dieser Stichprobe das interessierende Merkmal.

Sei $n \leq N$ die Zahl der Individuen in der zu beobachtenden Stichprobe. Die Modellannahme ist, dass das beobachtete Merkmal von einer für die einzelnen Individuen bekannten Kovariablen $x \in \mathcal{E}$ (z.B. Alter) abhängt. Weiter nehmen wir wie immer das Regressionsmodell (1.1) an:

$$Y_i = f(x_i)^\top \boldsymbol{\theta} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

In der Sprechweise dieses Abschnittes ist Y_i die Beobachtung des Merkmals und x_i die Kovariable beim i -ten Individuum der Stichprobe.

Bei der Auswahl der Individuen ist zu beachten, dass zu einem bestimmten Wert der Kovariablen nur eine begrenzte Zahl von Individuen in der Grundgesamtheit zur Verfügung steht. Sei dazu $\eta_N \in \Xi_N$ die Verteilung, die angibt, wie groß der Anteil der Individuen mit einer bestimmten Kovariablen zur Anzahl N aller Individuen ist. Für eine (messbare) Menge $A \subseteq \mathcal{E}$ bedeutet $\eta_N(A) = m/N$, dass genau m Individuen eine Kovariable in der Menge A haben. Die Menge der Versuchspläne, die durchführbar sind, ist damit formal

$$\Upsilon_n = \{\xi_n \in \Xi_n \mid \forall x \in \mathcal{E} : n \cdot \xi_n(x) \leq N \cdot \eta_N(x)\}.$$

Zur asymptotischen Betrachtung nehmen wir an, dass

$$\frac{n}{N} \rightarrow \gamma \in (0, 1] \quad (n, N \rightarrow \infty).$$

Die Größe γ wird als Auswahlssatz bezeichnet. Weiter setzen wir voraus, dass

$$\eta_N \xrightarrow{st} \eta \in \Xi \quad (N \rightarrow \infty),$$

wobei daran erinnert sei, dass wir in Ξ die starke Konvergenz betrachten (siehe Abschnitt 2.2.2).

Υ_n lässt sich in der Form $\Upsilon_n = \{\xi_n \in \Xi_n \mid n/N \cdot \xi_n \leq \eta_N\}$ schreiben. Betrachtet man eine gegen ein $\xi \in \Xi$ konvergente Folge $(\xi_n)_n$ mit $\xi_n \in \Upsilon_n$, so erhält man die Menge

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \gamma \cdot \xi \leq \eta\}$$

von asymptotisch durchführbaren Versuchsplänen. Wir nehmen nun noch an, dass es sich bei der Kovariablen um eine stetige Variable handelt (der Versuchsbereich \mathcal{E} kann also als reelles Intervall angenommen werden) und dass die asymptotische Verteilung η Lebesgue-stetig ist. Dann ist

$$\Upsilon = \left\{ \xi \in \Xi \mid \xi \leq \left(\frac{1}{\gamma} \frac{d\eta}{d\lambda} \right) \cdot \lambda \right\},$$

wobei $d\eta/d\lambda$ eine Dichte von η bezüglich λ ist. Man erhält also wieder, wie in den beiden vorangegangenen Abschnitten als Menge asymptotischer Versuchspläne eine Menge von Lebesgue-stetigen Maßen, deren Lebesgue-Dichte durch eine Funktion nach oben beschränkt ist.

Dieses Beispiel aus der Stichprobentheorie war für Wynn (1982) der Anlass, sich mit der Suche nach optimalen Versuchsplänen in dieser Menge Υ zu beschäftigen.

3.3 Definition der Teilmenge $\Upsilon[a, b]$ von Ξ

In Abschnitt 3.2 haben wir begründet, warum die Menge

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \xi \leq b \cdot \lambda\}$$

mit einer Funktion $b : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$ in der Praxis eine Rolle spielt. In Abschnitt 3.1 haben wir Gründe angegeben, dass in bestimmten Problemstellungen aus der Praxis Versuchspläne aus der Menge

$$\Upsilon = \{\xi \in \Xi \mid \xi \geq rv \cdot \lambda\}.$$

angewendet werden sollten. Natürlich sind auch Fälle denkbar, bei denen beide Einschränkungen aus der Praxis auftreten. Daher führen wir die Menge $\Upsilon[a, b]$ ein und normieren lediglich aus formalen Gründen das Lebesgue-Maß zum Wahrscheinlichkeitsmaß:

Definition 3.9 Sei $\tilde{\lambda}$ die Gleichverteilung auf \mathcal{E} , d.h. $\tilde{\lambda} = (\lambda(\mathcal{E}))^{-1} \cdot \lambda$. Sei $a : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$ Borel-messbar und Lebesgue-integrierbar mit $\int_{\mathcal{E}} a \, d\tilde{\lambda} \leq 1$. Sei $b : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$ Borel-messbar und Lebesgue-integrierbar mit $\int_{\mathcal{E}} b \, d\tilde{\lambda} \geq 1$ oder $b = \infty$. Weiter gelte $a \leq b$. Dann definieren wir

$$\Upsilon[a, b] := \{\xi \in \Xi \mid a \cdot \tilde{\lambda} \leq \xi \leq b \cdot \tilde{\lambda}\}, \quad \text{falls } b : \mathcal{E} \rightarrow [0, \infty)$$

(man beachte, dass die Maße in dieser Menge eine Lebesgue-Dichte auf \mathcal{E} besitzen) und

$$\Upsilon[a, b] := \{\xi \in \Xi \mid a \cdot \tilde{\lambda} \leq \xi\}, \quad \text{falls } b = \infty.$$

Unmittelbar klar ist das folgende Lemma:

Lemma 3.10 Seien a, b wie in Definition 3.9. $\Upsilon[a, b]$ ist konvex.

Bemerkung 3.11 (Symmetrische Versuchspläne bei Polynomregression) Betrachten wir \mathbf{e}_k - oder D -Optimalität in Ξ für Polynomregression auf dem Versuchsbereich $\mathcal{E} = [-1, 1]$. In diesem Fall kann man sich auf um 0 symmetrische Versuchspläne einschränken. Denn wenn $\xi \in \Xi$ nicht symmetrisch ist und $\tilde{\xi} \in \Xi$ der an 0 gespiegelte Versuchsplan, dann gilt $M(\xi) = SM(\tilde{\xi})S$, $S = \text{diag}(1, -1, 1, -1, \dots)$. Also folgt $\det(M(\xi)) = \det(M(\tilde{\xi}))$ und $(\mathbf{e}_k^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{e}_k)^{-1} = (\mathbf{e}_k^\top M(\tilde{\xi})^{-1} \mathbf{e}_k)^{-1}$. Aufgrund der Konkavität von $\xi \mapsto \log \det(M(\xi))$ (siehe z.B. Silvey (1980), Seite 41) und von $\xi \mapsto (\mathbf{e}_k^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{e}_k)^{-1}$ (siehe z.B. Pukelsheim (1993), Seite 77), folgt für den um 0 symmetrischen Versuchsplan $\xi_0 := \frac{1}{2}(\xi + \tilde{\xi}) \in \Xi$:

$$\det(M(\xi_0)) \geq \det(M(\xi)), \quad (\mathbf{e}_k^\top M(\xi_0)^{-1} \mathbf{e}_k)^{-1} \geq (\mathbf{e}_k^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{e}_k)^{-1}.$$

Falls $a(x) = a(-x)$ und $b(x) = b(-x)$ (symmetrisch um 0), so lassen sich alle obigen Argumente auch für $\Upsilon[a, b]$ statt für Ξ führen. Wichtig dabei ist, dass aus $\xi, \tilde{\xi} \in \Upsilon[a, b]$ wegen der Konvexitätsaussage in Lemma 3.10 auch $\xi_0 \in \Upsilon[a, b]$ folgt.

Lemma 3.12 Seien a, b wie in Definition 3.9 mit $b < \infty$. Dann ist $\Upsilon[a, b]$ kompakt.

Beweis: Für alle $\xi \in \Upsilon[a, b]$ gilt $\xi \leq b \cdot \tilde{\lambda}$ und $b \cdot \tilde{\lambda}$ ist ein endliches Maß. Daher folgt nach Korollar 5.8 in Bader (1997), dass die starke und schwache Konvergenz in $\Upsilon[a, b]$ äquivalent sind. Sei ξ_n eine Folge aus $\Upsilon[a, b]$. Da $\mathcal{E} \subseteq \mathbb{R}$ kompakt ist, ist $\Upsilon[a, b]$ trivialerweise straff. Damit folgt, dass eine gegen ein $\xi_0 \in \Xi$ (stark/schwach) konvergente Teilfolge ξ_{n_j} existiert (vgl. Billingsley (1968), Seite 37). Wegen

$$\forall A \in \mathcal{B}|_{\mathcal{E}} : \quad \xi_{n_j}(A) \geq a \cdot \tilde{\lambda}(A), \quad \xi_{n_j}(A) \leq b \cdot \tilde{\lambda}(A)$$

folgt $\xi_0 \in \Upsilon[a, b]$. Somit ist $\Upsilon[a, b]$ folgenkompakt. Da die Topologie der schwachen Konvergenz durch eine Metrik erzeugt werden kann (vgl. Billingsley (1968), Seite 238), ist $\Upsilon[a, b]$ kompakt. \square

Lemma 3.13 *Seien a, b wie in Definition 3.9. Dann gilt:*

a) $b < \infty \implies M(\Upsilon[a, b])$ ist kompakt,

b) f stetig $\implies M(\Upsilon[a, \infty])$ ist kompakt.

Beweis: a) Nach Lemma 3.12 ist $\Upsilon[a, b]$ kompakt. Da $\xi \mapsto M(\xi) = \int_{\mathcal{E}} f f^\top d\xi$ stetig ist, folgt die Behauptung.

b) Wegen

$$M(\Upsilon[a, \infty]) = M(a \cdot \tilde{\lambda}) + \left(1 - \int_{\mathcal{E}} a d\tilde{\lambda}\right) \cdot M(\Xi)$$

überträgt sich die Kompaktheit von $M(\Xi)$ (siehe Lemma 2.7) auf $M(\Upsilon[a, \infty])$. \square

Aus Lemma 3.13 folgt unmittelbar eine wichtige Folgerung über die Existenz eines optimalen Versuchsplans in $\Upsilon[a, b]$.

Korollar 3.14 *Sei $\Psi : M(\mathcal{S}(K)) \rightarrow \mathbb{R}$ ein auf $M(\Upsilon[a, b])$ stetiges Optimalitätskriterium. Sei f stetig oder sei $b < \infty$. Dann existiert ein Ψ -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b]$.*

3.4 Äquivalenztheoreme für Optimalität in $\Upsilon[a, b]$

In den Abschnitten 3.1 bis 3.3 haben wir die Menge $\Upsilon[a, b]$ definiert und motiviert. Wir werden in diesem Abschnitt nun Äquivalenztheoreme angeben, mit denen wir explizit optimale Versuchspläne in der Menge $\Upsilon[a, b]$ bestimmen können. Für a und b gelten ab sofort die Voraussetzungen, die in der Definition 3.9 gemacht wurden. Wir sind an dem Fall interessiert, dass nicht sowohl $a = 0$ als auch $b = \infty$ ist, denn der Fall $\Xi = \Upsilon[0, \infty]$ wurde in Kapitel 2 betrachtet.

Wir setzen ab sofort voraus, dass

$$\Upsilon[a, b] \subseteq \Xi^+. \quad (3.5)$$

Dadurch vereinfacht sich die Notation, da auf die Formulierung mit verallgemeinerten Inversen verzichtet werden kann. Die Bedingung (3.5) folgt beispielsweise, wenn

$$\int_{\mathcal{E}} f f^\top a d\tilde{\lambda} \text{ invertierbar.} \quad (3.6)$$

Zunächst spezialisieren wir das in Kapitel 2 betrachtete „Allgemeine Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität in Υ “ auf die Menge $\Upsilon = \Upsilon[a, b]$. Wir interessieren uns für den Parametervektor $K^\top \boldsymbol{\theta}$, wobei

$$K \in \mathbb{R}^{k \times s}, \quad 1 \leq s \leq k, \quad \text{Rang}(K) = s,$$

wie bereits in (1.4) eingeführt.

Satz 3.15 *Ein Versuchsplan $\xi \in \Upsilon[a, b]$ ist ϕ_p -optimal ($p \in (-\infty, 1)$) für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ in $\Upsilon[a, b]$ genau dann, wenn für*

$$N = M(\xi)^{-1} K (K^\top M(\xi)^{-1} K)^{-p-1} K^\top M(\xi)^{-1} \quad \left(M(\xi) = \int_{\mathcal{E}} f f^\top d\xi \right)$$

gilt:

$$\forall y \in \text{eSupp}(b \cdot \tilde{\lambda} - \xi), z \in \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda}) : \quad f(y)^\top N f(y) \leq f(z)^\top N f(z). \quad (3.7)$$

Bemerkung 3.16 a) *Es sei an Definition 2.15 erinnert: $\text{eSupp}(\xi) := \{x \in \mathcal{E} \mid \forall \epsilon > 0 : \xi(\{x - \epsilon, x\}) > 0 \text{ und } \xi(\{x, x + \epsilon\}) > 0\}$.*

b) *Für $b = \infty$ ist $\text{eSupp}(\infty \cdot \tilde{\lambda} - \xi) = \mathcal{E}$.*

c) *Die Abbildung $\xi \mapsto \phi_p((K^\top M(\xi)^{-1} K)^{-1})$ ist eine auf Ξ^+ differenzierbare Abbildung (siehe Pukelsheim (1993), Seite 179). Dies ist wegen unserer Voraussetzung (3.5) ($\Upsilon[a, b] \subseteq \Xi^+$) nützlich.*

Beweis von Satz 3.15: Wir wenden das „Äquivalenztheorem für ϕ_p -Optimalität in $\Upsilon \subseteq \Xi$ “ (Korollar 2.13) an. Die Aussage des zu beweisenden Satzes folgt aus dem Äquivalenztheorem, wenn wir zeigen, dass (3.7) und

$$\forall \eta \in \Upsilon[a, b] : \quad \int_{\mathcal{E}} f^\top N f d\eta \leq \int_{\mathcal{E}} f^\top N f d\xi \quad (3.8)$$

äquivalent sind. Dies wird in Theorem 11.8 in Pukelsheim (1993) für den Fall von Maßen aus

$$\{\xi \in \tilde{\Xi} \mid \forall x \in \mathcal{E} : a(x) \leq \xi(\{x\}) \leq b(x)\} \subseteq \tilde{\Xi}$$

(also Maße mit endlichem Träger) gezeigt. Für $\xi \in \Upsilon[a, b] \subseteq \Xi$ müssen wir den Beweis modifizieren.

Aus (3.7) folgt (3.8): Sei $c := \inf\{f(z)^\top N f(z) \mid z \in \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})\}$ und

$$A_+ := \{x \in \mathcal{E} \mid f(x)^\top N f(x) > c\},$$

$$A_0 := \{x \in \mathcal{E} \mid f(x)^\top N f(x) = c\},$$

$$A_- := \{x \in \mathcal{E} \mid f(x)^\top N f(x) < c\}.$$

Wegen (3.7) gilt $A_+ \cap \text{eSupp}(b \cdot \tilde{\lambda} - \xi) = \emptyset$ und $A_- \cap \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda}) = \emptyset$. Sei $\eta \in \mathcal{T}[a, b]$ beliebig. Für das signierte Maß $\xi - \eta$ gilt

$$\begin{aligned} \forall B \subseteq A_+ \cap \mathcal{B} : (\xi - \eta)(B) &\geq 0, \\ \forall B \subseteq A_- \cap \mathcal{B} : (\xi - \eta)(B) &\leq 0. \end{aligned}$$

Folglich

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi - \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\eta &= \int_{\mathcal{E}} f^\top N f - c \, d(\xi - \eta) \\ &= \int_{A_+} \underbrace{f^\top N f - c}_{\geq 0} \, d(\xi - \eta) + \int_{A_0} \underbrace{f^\top N f - c}_{=0} \, d(\xi - \eta) + \int_{A_-} \underbrace{f^\top N f - c}_{\leq 0} \, d(\xi - \eta) \\ &\geq 0. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Damit gilt also (3.8).

Aus (3.8) folgt (3.7): Wir nehmen an, dass (3.7) nicht gilt. Im Fall $b < \infty$ existieren disjunkte Mengen $B_1 \subseteq \text{eSupp}(b\tilde{\lambda} - \xi)$ und $B_2 \subseteq \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})$ mit

$$(b \cdot \tilde{\lambda} - \xi)(B_1) > 0, \quad (\xi - a \cdot \tilde{\lambda})(B_2) > 0$$

und

$$\forall x_1 \in B_1, x_2 \in B_2 : f(x_1)^\top N f(x_1) > f(x_2)^\top N f(x_2).$$

Sei

$$\xi_1 := (b \cdot \tilde{\lambda} - \xi)|_{B_1}, \quad \xi_2 := (\xi - a \cdot \tilde{\lambda})|_{B_2}.$$

Im Fall $b = \infty$ existieren Mengen $B_1 \subseteq \mathcal{E}$ und $B_2 \subseteq \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})$ mit

$$\tilde{\lambda}(B_1) > 0, \quad (\xi - a \cdot \tilde{\lambda})(B_2) > 0$$

und

$$\forall x_1 \in B_1, x_2 \in B_2 : f(x_1)^\top N f(x_1) > f(x_2)^\top N f(x_2).$$

Sei in diesem Falle

$$\xi_1 := \tilde{\lambda}|_{B_1}, \quad \xi_2 := (\xi - a \cdot \tilde{\lambda})|_{B_2}.$$

Für beliebige b definiere nun die endlichen Maße

$$\tilde{\xi}_i := \frac{\min\{\xi_1(\mathcal{E}), \xi_2(\mathcal{E})\}}{\xi_i(\mathcal{E})} \xi_i, \quad i = 1, 2.$$

Das Wahrscheinlichkeitsmaß

$$\bar{\xi} = \xi + \tilde{\xi}_1 - \tilde{\xi}_2$$

liegt in $\Upsilon[a, b]$. Nun gilt

$$\int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\bar{\xi} = \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi + \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\tilde{\xi}_1 - \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\tilde{\xi}_2 > \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi$$

was ein Widerspruch zu (3.8) ist. \square

Bemerkung 3.17 Wenn $\xi \in \Upsilon[a, b]$ ϕ_p -optimal ($p \in (-\infty, 1)$) für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ in $\Upsilon[a, b]$ ist, dann gilt offensichtlich

$$\sup\{f(y)^\top N f(y) \mid y \in \text{eSupp}(b \cdot \tilde{\lambda} - \xi)\} \leq \inf\{f(z)^\top N f(z) \mid z \in \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})\}.$$

Aus dem Beweis können wir noch eine Folgerung entnehmen, die uns später nützlich sein wird, wenn wir in konkreten Fällen die Eindeutigkeit des optimalen Versuchsplans zeigen wollen.

Korollar 3.18 Sei $\xi \in \Upsilon[a, b]$ ein ϕ_p -optimaler Versuchsplan für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ in $\Upsilon[a, b]$ und

$$N = M(\xi)^{-1} K (K^\top M(\xi)^{-1} K)^{-p-1} K^\top M(\xi)^{-1}.$$

Dann gilt für jeden anderen Versuchsplan $\eta \in \Upsilon[a, b]$, der ϕ_p -optimal für $K^\top \boldsymbol{\theta}$ in $\Upsilon[a, b]$ ist:

$$\text{eSupp}(\eta - a \cdot \tilde{\lambda}) \subseteq (\{x \in \mathcal{E} \mid f(x)^\top N f(x) \geq c\})$$

mit $c := \inf\{f(z)^\top N f(z) \mid z \in \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})\}$.

Beweis: Wir nehmen an, dass ein $x \in \text{eSupp}(\eta - a \cdot \tilde{\lambda})$ existiert mit $f(x)^\top N f(x) < c$. Sei f ohne Beschränkung der Allgemeinheit in x rechtsseitig stetig (linksseitig analog). Dann existiert eine rechtsseitige Umgebung $[x, x + \epsilon)$ mit $\eta([x, x + \epsilon)) > (a \cdot \tilde{\lambda})([x, x + \epsilon))$ und $\forall y \in [x, x + \epsilon) : f(y)^\top N f(y) < c$. Wegen der Optimalität von ξ und Satz 3.15 folgt $\forall y \in [x, x + \epsilon) : y \notin \text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})$. Also $\xi([x, x + \epsilon)) = a \cdot \tilde{\lambda}([x, x + \epsilon))$ und $\eta([x, x + \epsilon)) > \xi([x, x + \epsilon))$. Folglich gilt in (3.9):

$$\int_{A_-} (f^\top N f - c) \, d(\xi - \eta) = \int_{A_-} (c - f^\top N f) \, d(\eta - \xi) \geq \int_{[x, x + \epsilon)} \underbrace{c - f^\top N f}_{> 0} \, d(\eta - \xi) > 0$$

und damit $\int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\xi > \int_{\mathcal{E}} f^\top N f \, d\eta$. Also kann η nicht optimal sein. \square

Wir spezialisieren nun Satz 3.15 für $K = \mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$ (Korollar 3.19), für $K = \mathbf{e}_k$ (Korollar 3.20) und für $p = 0$ und $K = I$ (D -Optimalität für $\boldsymbol{\theta}$; Korollar 3.22).

Korollar 3.19 Ein Versuchsplan $\xi \in \Upsilon[a, b]$ ist optimal für $\mathbf{c}^\top \boldsymbol{\theta}$ in $\Upsilon[a, b]$ genau dann, wenn gilt:

$$\forall y \in \text{eSupp}(b\tilde{\lambda} - \xi), z \in \text{eSupp}(\xi - a\tilde{\lambda}) : \quad (\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} f(y))^2 \leq (\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} f(z))^2. \quad (3.10)$$

Beweis: Wir wählen in Satz 3.15 den Parameter p zu $p = -1$. Dann gilt $N = M(\xi)^{-1} \mathbf{c} \mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1}$ und $f(x)^\top N f(x) = (\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} f(x))^2$ für alle $x \in \mathcal{E}$. \square

Korollar 3.20 Ein Versuchsplan $\xi \in \Upsilon[a, b]$ ist optimal für θ_k in $\Upsilon[a, b]$ genau dann, wenn gilt:

$$\begin{aligned} \forall y \in \text{eSupp}(b\tilde{\lambda} - \xi), z \in \text{eSupp}(\xi - a\tilde{\lambda}) : \\ \left| \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k \right) (y) \right| \leq \left| \left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k \right) (z) \right|. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Beweis: Folgt aus Korollar 3.19 mit Benutzung der Beweise zu den Sätzen 2.34 und 2.36. \square

Bemerkung 3.21 Es sei daran erinnert (Bemerkung 2.37), dass sich $\left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k \right) (y)$ darstellen lässt durch

$$\left(-(M_{11}^{-1} M_{12})^\top, 1 \right) f(y),$$

wobei $M_{11} = \int_{\mathcal{E}} \tilde{f} \tilde{f}^\top d\xi$, $M_{12} = \int_{\mathcal{E}} \tilde{f} f_k d\xi$ mit $\tilde{f} := (f_1, \dots, f_{k-1})^\top$.

Korollar 3.22 Ein Versuchsplan $\xi \in \Upsilon[a, b]$ ist D -optimal für $\boldsymbol{\theta}$ in $\Upsilon[a, b]$ genau dann, wenn gilt:

$$\forall y \in \text{eSupp}(b\tilde{\lambda} - \xi), z \in \text{eSupp}(\xi - a\tilde{\lambda}) : \quad f(y)^\top M^{-1} f(y) \leq f(z)^\top M^{-1} f(z). \quad (3.12)$$

Beweis: Mit diesen Voraussetzungen gilt für die Matrix N aus Satz 3.15: $N = M^{-1}$. \square

Nachdem wir nun Äquivalenztheoreme für die Optimalität in $\Upsilon[a, b]$ angegeben haben, wenden wir uns als nächstes dem Spezialfall $b = \infty$ zu. In Abschnitt 3.1.2 haben wir die Menge $\Upsilon[a, \infty]$ motiviert durch sequentielles Optimieren. In Abschnitt 2.7.1 haben wir gesehen, dass das Problem der sequentiellen Optimierung auch als Problem der Optimierung Bayesscher Versuchspläne formuliert werden kann. Daher können wir für die Optimierung in $\Upsilon[a, \infty]$ auf Resultate aus der Bayesschen Versuchsplanung zurückgreifen.

Wir schreiben im Nachfolgenden a in der Form

$$a(x) = \alpha \cdot \tilde{a}(x) \quad \text{mit} \quad \int_{\mathcal{E}} \tilde{a} d\tilde{\lambda} = 1, \quad \alpha \in [0, 1].$$

Wir werden konkret vorgegebene \tilde{a} betrachten und untersuchen, wie der optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha\tilde{a}, \infty]$ für $\alpha \in [0, 1]$ aussieht.

Für einen \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan $\xi^* = \sum_{i=0}^{m-1} p_i^* \delta_{x_i}$ in Ξ , wobei $p_i^* > 0$, $\sum_{i=0}^{m-1} p_i^* = 1$ und $x_0, \dots, x_{m-1} \in \mathcal{E}$, $x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1}$, $m \in \mathbb{N}$, definieren wir

$$\begin{aligned} F &:= (f(x_0), \dots, f(x_{m-1})) \in \mathbb{R}^{k \times m}, \\ \mathbf{p}^* &:= (p_0^*, \dots, p_{m-1}^*)^\top \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

und S sei die Diagonalmatrix mit -1 - und 1 -Diagonaleinträgen aus der Elfving-Darstellung von \mathbf{c} , d.h.:

$$\frac{\mathbf{c}}{\rho(\mathbf{c})} = FS\mathbf{p}^*. \quad (3.13)$$

In den nächsten beiden Sätzen werden wir angeben, wie man aus einem \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in Ξ einen \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[a, \infty]$ konstruieren kann. Es sei an die Definition

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\xi, \mathbf{c}) &:= \{G \in M(\xi)^- \mid \forall y \in \mathcal{E}, z \in \text{eSupp}(\xi) : (\mathbf{c}^\top Gf(y))^2 \leq (\mathbf{c}^\top Gf(z))^2\} \\ &= \{G \in M(\xi)^- \mid \forall y \in \mathcal{E} : (\mathbf{c}^\top Gf(y))^2 \leq \rho(\mathbf{c})^2\} \end{aligned}$$

erinnert.

Satz 3.23 *Sei ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in Ξ gegeben durch*

$$\xi^* = \sum_{i=0}^{m-1} p_i^* \delta_{x_i} \text{ mit } p_i^* > 0, \sum_{i=0}^{m-1} p_i^* = 1, x_i \neq x_j \text{ (} i \neq j \text{)}, m \leq k$$

(d.h. ξ^* hat Masse auf genau m Punkten). Sei $a(x) = \alpha\tilde{a}(x)$ und F, \mathbf{p}^*, S wie oben, $R := \int_{\mathcal{E}} f f^\top \tilde{a} \, d\tilde{\lambda} \in \mathbb{R}^{k \times k}$. Die Vektoren $\mathbf{q} = (q_0, \dots, q_{m-1})^\top, \mathbf{p} = (p_0, \dots, p_{m-1})^\top \in \mathbb{R}^m$ und die Zahl $\alpha_0 > 0$ seien gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &:= (1 - \mathbf{1}_m^\top (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m) \mathbf{p}^* + (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m, \\ \mathbf{p} &:= \mathbf{p}(\alpha) := \mathbf{p}^* - \alpha \mathbf{q} = ((1 - \alpha) + \alpha \mathbf{1}_m^\top (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m) \mathbf{p}^* - \alpha (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m, \\ \alpha_0 &:= \min\{p_i^*/q_i \mid i = 0, \dots, m-1 \text{ mit } q_i > 0\} \end{aligned}$$

und sei $\alpha \in [0, \alpha_0]$. Hierbei ist $\mathbf{1}_m = (1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^m$. Es gelte $\text{Rang}(F) = m$ und es existiere eine verallgemeinerte Inverse $G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})$ mit $G\mathbf{c} \in [R^{-1}F]$. Der Versuchsplan

$$\xi = a\tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{m-1} w_i \delta_{x_i}$$

ist \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[a, \infty]$ genau dann, wenn $w_i = p_i$, $i = 0, \dots, m-1$ (die Gewichte w_i sind eindeutig bestimmt).

Der entsprechende Satz für Bayes-optimale Versuchspläne stammt im Wesentlichen von El-Krunz und Studen (1991). Dette (1993) bemerkte, dass die Voraussetzung $\text{Rang}(F) = m$ benötigt wird, jedoch in der Formulierung des Satzes von El-Krunz und Studen fehlt. Darüberhinaus ist die Formulierung von El-Krunz und Studen als Äquivalenztheorem falsch. Dies betonte Dette (1993) und gab im Fall $m = k$ eine korrekte Äquivalenzaussage an, bei der ausgesagt wird, dass die Gewichte w_i eindeutig bestimmt sind (für $\alpha \in [0, \alpha_0)$).

Im Gegensatz zu El-Krunz und Studen bzw. Dette, die an Bayes-optimalen Versuchsplänen interessiert sind, betrachten wir in obigem Satz die nicht-Bayessche Optimalität in $\Upsilon[a, \infty]$, was einige kleinere Änderungen bewirkt. Außerdem führen wir einen anderen Beweis als der von El-Krunz und Studen. Unsere Bedingung *es existiert eine verallgemeinerte Inverse* $G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})$ mit $G\mathbf{c} \in [R^{-1}F]$ ist neu. Den Zusammenhang zur Bedingung in El-Krunz und Studen (1991) liefert Satz 2.33, denn nach diesem Satz ist $G\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$ eine Tangentialhyperebene von \mathcal{R} im Punkt $\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$.

Beweis von Satz 3.23: Wegen $\mathbf{1}_m^\top \mathbf{q} = \mathbf{1}_m^\top \mathbf{p}^* (1 - \mathbf{1}_m^\top (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m) + \mathbf{1}_m^\top (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m = 1$, $\mathbf{1}_m^\top \mathbf{p} = \mathbf{1}_m^\top \mathbf{p}^* - \alpha \mathbf{1}_m^\top \mathbf{q} = 1 - \alpha$, $\int_{\mathcal{E}} 1 d\xi = \mathbf{1}_m^\top \mathbf{p} + \alpha \int_{\mathcal{E}} \tilde{a} d\tilde{\lambda} = 1$ ist ξ ein Wahrscheinlichkeitsmaß, also $\xi \in \Upsilon[a, \infty]$.

Es gilt

$$M(\xi^*) = \int ff^\top d\xi^* = FP^*F^\top, \quad M(\xi) = \int ff^\top d\xi = \alpha R + FPF^\top$$

mit $P^* := \text{diag}(p_0^*, \dots, p_{m-1}^*)$, $P := \text{diag}(p_0, \dots, p_{m-1}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$.

Es gilt $FP^*F^\top = M(\xi^*) = M(\xi^*)GM(\xi^*) = F(P^*F^\top GFP^*)F^\top$. Wegen $\text{Rang}(F) = m$ kann man von links mit $(F^\top F)^{-1}F^\top$ und von rechts mit $F(F^\top F)^{-1}$ multiplizieren und sieht $P^{*-1} = F^\top GF$. Daher haben wir unter Verwendung der Elfving-Gleichung (3.13):

$$SF^\top G\mathbf{c} = \rho(\mathbf{c}) \cdot SF^\top GF\mathbf{p}^* = \rho(\mathbf{c}) \cdot SP^{*-1}\mathbf{p}^* = \rho(\mathbf{c}) \cdot \mathbf{1}_m. \quad (3.14)$$

Weiter haben wir

$$\begin{aligned} G\mathbf{c} \in [R^{-1}F] &\Rightarrow \exists \mathbf{v} \in \mathbb{R}^m : G\mathbf{c} = R^{-1}F\mathbf{S}\mathbf{v} \\ &\Rightarrow \exists \mathbf{v} \in \mathbb{R}^m : SF^\top G\mathbf{c} = SF^\top R^{-1}F\mathbf{S}\mathbf{v} \\ &\Rightarrow \exists \mathbf{v} \in \mathbb{R}^m : (SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m = \mathbf{v} \\ &\Rightarrow R^{-1}FS(SF^\top R^{-1}FS)^{-1} \mathbf{1}_m = G\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Zur Abkürzung definieren wir $\gamma := ((1 - \alpha) + \alpha \mathbf{1}_m^\top (SF^\top R^{-1} FS)^{-1} \mathbf{1}_m)$. Dann haben wir

$$\begin{aligned}
\mathbf{p} &= \gamma \mathbf{p}^* - \alpha (SF^\top R^{-1} FS)^{-1} \mathbf{1}_m \\
&\Rightarrow FSP \mathbf{1}_m + \alpha RR^{-1} FS (SF^\top R^{-1} FS)^{-1} \mathbf{1}_m = \gamma FSp^* \\
&\Rightarrow FSP (SF^\top R^{-1} FS) (SF^\top R^{-1} FS)^{-1} \mathbf{1}_m + \alpha RG \mathbf{c} = \gamma \mathbf{c} / \rho(\mathbf{c}) \\
&\Rightarrow FPF^\top G \mathbf{c} + \alpha RG \mathbf{c} = \gamma \mathbf{c} / \rho(\mathbf{c}) \\
&\Rightarrow (FPF^\top + \alpha R) G \mathbf{c} = \gamma \mathbf{c} / \rho(\mathbf{c}) \\
&\Rightarrow G \mathbf{c} = \gamma M(\xi)^{-1} \mathbf{c} / \rho(\mathbf{c}).
\end{aligned}$$

Aus der \mathbf{c} -Optimalität von ξ^* in Ξ , Satz 2.31 und Korollar 3.19 folgt nun, dass ξ \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[a, \infty]$ ist.

$p_i(\alpha)$, $\alpha \in (0, 1]$, ist genau dann nichtnegativ, wenn $p_i^* - \alpha q_i \geq 0$, d.h. $q_i \leq 0$ oder $\alpha \leq p_i^* / q_i$. Also ist

$$\alpha_0 = \min\{p_i^* / q_i \mid i = 0, \dots, k-1 \text{ mit } q_i > 0\}$$

das größte $\alpha_0 \in (0, 1]$, so dass alle Gewichte nichtnegativ sind.

Die Eindeutigkeit der Gewichte folgt mit dem nachfolgenden Lemma 3.24. □

Lemma 3.24 Sei $\xi \in \Upsilon[a, \infty]$ ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, \infty]$ der Gestalt

$$\xi = a \cdot \tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{m-1} p_i \delta_{x_i} \text{ mit } p_i \geq 0, \sum_{i=0}^{m-1} p_i = 1, x_i \neq x_j \text{ (} i \neq j \text{)}$$

und seien $f(x_0), \dots, f(x_{m-1}) \in \mathbb{R}^n$ linear unabhängig. Dann sind die Gewichte p_i eindeutig bestimmt, d.h. für jeden \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan η in $\Upsilon[a, \infty]$ von der Gestalt

$$\eta = a \cdot \tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{m-1} \tilde{p}_i \delta_{x_i} \text{ mit } \tilde{p}_i \geq 0, \sum_{i=0}^{m-1} \tilde{p}_i = 1, x_i \neq x_j \text{ (} i \neq j \text{)}$$

gilt $p_i = \tilde{p}_i$, $i = 0, \dots, m-1$, also $\xi = \eta$.

Beweis: Seien $M = M(\xi)$ und $\tilde{M} = M(\eta)$ die Momentenmatrizen von ξ und η . Nach Pukelsheim (1993), Seite 201, folgt aus der \mathbf{c} -Optimalität von ξ und η : $\tilde{M}M^{-1}\mathbf{c} = \mathbf{c}$. Damit

$$\mathbf{c} = \tilde{M}M^{-1}\mathbf{c} = (\alpha R + F \text{diag}(\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1}) F^\top) M^{-1} \mathbf{c} \quad (3.16)$$

$$\Rightarrow \mathbf{c} - \alpha RM^{-1}\mathbf{c} = F \text{diag}(\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1}) F^\top M^{-1} \mathbf{c}$$

$$\Rightarrow (F^\top F)^{-1} F^\top (I_k - \alpha RM^{-1}) \mathbf{c} = \text{diag}(\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1}) F^\top M^{-1} \mathbf{c}. \quad (3.17)$$

Es gilt $F^\top M^{-1} \mathbf{c} = (\mathbf{c}^\top M^{-1} f(x_i))_{i=0, \dots, m-1}$. Da x_i nach Satz 3.15 die Maximalstellen der Funktion $x \mapsto (\mathbf{c}^\top M^{-1} f(x))^2$ sind, ist jede Komponente des Vektors $F^\top M^{-1} \mathbf{c}$ ungleich 0. Daher sind $\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1}$ durch (3.17) eindeutig festgelegt und es folgt $p_i = \tilde{p}_i$, $i = 0, \dots, m-1$, und schließlich $\xi = \eta$. \square

Betrachten wir nun die Voraussetzung: *Es existiert eine verallgemeinerte Inverse $G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})$ mit $G\mathbf{c} \in [R^{-1}F]$.* Diese Voraussetzung ist sehr einschränkend, was an folgenden Beispielen deutlich wird.

Beispiel 3.25 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (f_1(x), f_2(x))^\top = (1, x)^\top$ (Geradenregression), $\mathbf{c} = (1, c_2)^\top$, $c_2 \in (-1, 1)$, sowie $\tilde{a} \equiv 1$, also $a \equiv \alpha$. Dann ist $\xi^* = \delta_{c_2}$ \mathbf{c} -optimal in Ξ (siehe Beispiel 2.35) und es gilt

$$M(\xi^*) = \begin{pmatrix} 1 & c_2 \\ c_2 & c_2^2 \end{pmatrix}.$$

Sei

$$G = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 \end{pmatrix} \in M(\xi^*)^-.$$

Wegen $\text{eSupp}(\xi^*) = \{c_2\}$ und $G\mathbf{c} = (a_1 + c_2 a_2, a_2 + c_2 a_3)^\top$, kann nur dann $G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})$ sein, wenn $a_2 + c_2 a_3 = 0$ ist. Es gilt $R^{-1}F = \text{diag}(1, 1/3)^{-1} (1, c_2)^\top \cdot 1 = (1, 3c_2)^\top$. Damit die Voraussetzung $G\mathbf{c} \in [R^{-1}F]$ erfüllt sein kann, muss deshalb $c_2 = 0$ sein.

Betrachten wir nun $\mathbf{c} = \mathbf{e}_1 = (1, 0)^\top$. Es gilt

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c}) \quad \text{und} \quad G\mathbf{c} \in [R^{-1}F].$$

Also sind die Voraussetzungen von Satz 3.23 erfüllt und es ergeben sich $\alpha_0 = 1$, $\mathbf{p} = p_0 = 1 - \alpha$.

Für die Geradenregression ist also der Versuchsplan

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \delta_0$$

\mathbf{e}_1 -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, $\alpha \in [0, 1]$, was nicht unerwartet ist. Für $c_2 \in (-1, 1) \setminus \{0\}$ können wir Satz 3.23 also nicht anwenden. Wir wollen in diesem Fall auf anderem Wege den \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ bestimmen. Sei

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \delta_t, \quad t \in [-1, 1].$$

dann gilt

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & (1-\alpha)t \\ (1-\alpha)t & \frac{\alpha}{3} + (1-\alpha)t^2 \end{pmatrix}, \quad M(\xi)^{-1} = \text{const} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{3} + (1-\alpha)t^2 & -(1-\alpha)t \\ -(1-\alpha)t & 1 \end{pmatrix},$$

also

$$\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} = \left(\frac{\alpha}{3} + (1-\alpha)t^2 - c_2(1-\alpha)t, -(1-\alpha)t + c_2 \right).$$

Sei zunächst $t \in (-1, 1)$. Nach Korollar 3.19 ist ξ genau dann \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn $-(1-\alpha)t + c_2 = 0$, also wenn $t = c_2/(1-\alpha)$ ist. Damit $t \in (-1, 1)$ ist, muss $\alpha < 1 - |c_2|$ gelten.

Sei nun $t \equiv 1$. Wegen $\frac{\alpha}{3} + (1-\alpha) - c_2(1-\alpha) > 0$ ist ξ genau dann \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn $-(1-\alpha) + c_2 \geq 0$, also genau dann, wenn $c_2 > 0$ und $\alpha > 1 - |c_2|$.

Sei nun $t \equiv -1$. Wegen $\frac{\alpha}{3} + (1-\alpha) + c_2(1-\alpha) > 0$ ist ξ genau dann \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn $(1-\alpha) + c_2 \leq 0$, also genau dann, wenn $c_2 < 0$ und $\alpha > 1 - |c_2|$.

Insgesamt ist also:

$$\xi = \alpha\tilde{\lambda} + (1-\alpha)\delta_t, \quad \text{mit} \begin{cases} t = c_2/(1-\alpha), & \alpha < 1 - c_2, \\ t = 1, & \alpha \geq 1 - c_2, \\ t = -1, & \alpha \geq 1 + c_2 \end{cases}$$

ist \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$.

Beispiel 3.26 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, x^2)^\top$ (Quadratische Regression), $\mathbf{c} = (1, 0, 1/2)^\top$, sowie $\tilde{a} \equiv 1$.

$$\xi^* = \frac{1}{2}\delta_{-1/\sqrt{2}} + \frac{1}{2}\delta_{1/\sqrt{2}}$$

ist \mathbf{c} -optimal in Ξ (siehe Beispiel 2.30). Die Tangentialhyperebene im Punkt $\mathbf{c} = \mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})$ ist offensichtlich $\mathbf{h} = (1, 0, 0)^\top$. Wegen Satz 2.33 ist

$$\{G\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c}) \mid G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})\} = \mathcal{T}(\mathbf{c}/\rho(\mathbf{c})) = \{(1, 0, 0)^\top\}.$$

Es gilt $S = I_2$ und

$$R^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 9 & 0 & -15 \\ 0 & 12 & 0 \\ -15 & 0 & 45 \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad R^{-1}F = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ -6\sqrt{2} & 6\sqrt{2} \\ 15 & 15 \end{pmatrix}.$$

Also ist

$$[R^{-1}F] = \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 5 \end{pmatrix} \right].$$

Wegen $(1, 0, 0)^\top \notin [R^{-1}F]$ kann Satz 3.23 nicht angewendet werden.

Wir sehen also, dass die Bedingung *es gibt eine verallgemeinerte Inverse* $G \in \mathcal{G}(\xi^*, \mathbf{c})$ mit $G\mathbf{c} \in [R^{-1}F]$ die Anwendbarkeit von Satz 3.23 stark einschränkt. Im Spezialfall $m = k$ ist die Bedingung jedoch wegen $[R^{-1}F] = \mathbb{R}^k$ trivialerweise erfüllt und wir erhalten sofort:

Satz 3.27 *Sei ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in Ξ gegeben durch*

$$\xi^* = \sum_{i=0}^{k-1} p_i^* \delta_{x_i} \text{ mit } p_i^* > 0, \quad \sum_{i=0}^{k-1} p_i^* = 1, \quad x_i \neq x_j \quad (i \neq j)$$

(d.h. ξ^* hat Masse auf genau k Punkten), $a(x) = \alpha \tilde{a}(x)$ und F, \mathbf{p}^*, S seien wie oben, $R := \int_{\mathcal{E}} f f^\top \tilde{a} \, d\tilde{\lambda} \in \mathbb{R}^{k \times k}$. Die Vektoren $\mathbf{q} = (q_0, \dots, q_{k-1})^\top, \mathbf{p} = (p_0, \dots, p_{k-1})^\top \in \mathbb{R}^k$ und die Zahl $\alpha_0 > 0$ seien gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &:= (1 - \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} R F^{-1 \top} S \mathbf{1}_k) \mathbf{p}^* + S F^{-1} R F^{-1 \top} S \mathbf{1}_k, \\ \mathbf{p} &:= \mathbf{p}(\alpha) := \mathbf{p}^* - \alpha \mathbf{q} = ((1 - \alpha) + \alpha \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} R F^{-1 \top} S \mathbf{1}_k) \mathbf{p}^* - \alpha S F^{-1} R F^{-1 \top} S \mathbf{1}_k, \\ \alpha_0 &:= \min\{p_i^*/q_i \mid i = 0, \dots, k-1 \text{ mit } q_i > 0\} \end{aligned}$$

und sei $\alpha \in [0, \alpha_0]$. Es gelte $\text{Rang}(F) = k$. Der Versuchsplan

$$\xi = a \tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{k-1} w_i \delta_{x_i}$$

ist \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[a, \infty]$ genau dann, wenn $w_i = p_i, i = 0, \dots, k-1$.

Beispiel 3.28 *Sei wie in Beispiel 3.25: $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (f_1(x), f_2(x))^\top = (1, x)^\top$ (Geradenregression), $\mathbf{c} = (1, c_2)^\top$, sowie $\tilde{a} \equiv 1$. Wir betrachten nur die Fälle $c_2 \in [0, 1)$ (die Fälle $c_2 \in (-1, 0)$ gehen analog). Die Versuchspläne*

$$\xi^* = \frac{t_2 - c_2}{t_2 - t_1} \delta_{t_1} + \frac{c_2 - t_1}{t_2 - t_1} \delta_{t_2}, \quad \text{mit } -1 \leq t_1 < c_2 < t_2 \leq 1,$$

sind \mathbf{c} -optimal in Ξ (siehe Beispiel 2.35). Wegen

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ t_1 & t_2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \text{Rang}(F) = 2 = k$$

sind die Voraussetzungen von Satz 3.27 erfüllt und es gibt ein $\alpha_0 = \alpha_0(t_1, t_2) > 0$, so dass es für alle $\alpha \in [0, \alpha_0]$ einen \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha \tilde{a}, \infty]$ gibt, der die Gestalt

$$\xi = p_1 \delta_{t_1} + p_2 \delta_{t_2} + a \tilde{\lambda}$$

hat. Wir wollen nun t_1 und t_2 so wählen, dass α_0 möglichst groß wird. Es gilt

$$\begin{aligned} F^{-1} &= \frac{1}{t_2 - t_1} \begin{pmatrix} t_2 & -1 \\ -t_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad S = I_2, \quad R = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix}, \\ F^{-1}RF^{-1\top} &= \frac{1}{3(t_2 - t_1)^2} \begin{pmatrix} 1 + 3t_2^2 & -(1 + 3t_1t_2) \\ -(1 + 3t_1t_2) & 1 + 3t_1^2 \end{pmatrix}, \\ F^{-1}RF^{-1\top}\mathbf{1}_2 &= \frac{1}{t_2 - t_1} \begin{pmatrix} t_2 \\ -t_1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und $\mathbf{1}_2^\top F^{-1}RF^{-1\top}\mathbf{1}_2 = 1$. Damit gilt

$$\mathbf{q} = \frac{1}{t_2 - t_1} \begin{pmatrix} t_2 \\ -t_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p}^* = \begin{pmatrix} (t_2 - c_2)/(t_2 - t_1) \\ (c_2 - t_1)/(t_2 - t_1) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}^* - \frac{\alpha}{t_2 - t_1} \begin{pmatrix} t_2 \\ -t_1 \end{pmatrix}$$

Wir erhalten $\alpha_0 = (t_2 - c_2)/t_2$. Der Wert α_0 wird daher am größten, wenn $t_2 = 1$ ist. Die Wahl von $t_1 \in [-1, c_2)$ spielt dafür keine Rolle, wir können z.B. $t_1 = -1$ wählen. Wir haben also:

Für $\alpha \leq 1 - c_2$ ist der Versuchsplan

$$\xi = \frac{1}{2}(1 - c_2 - \alpha)\delta_{-1} + \frac{1}{2}(1 + c_2 - \alpha)\delta_1 + \alpha\tilde{\lambda}$$

\mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$.

Beispiel 3.29 Sei wie in Beispiel 3.26: $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, x^2)^\top$ (Quadratische Regression), $\mathbf{c} = (1, 0, 1/2)^\top$, sowie $\tilde{a} \equiv 1$.

$$\xi_t^* = \frac{1}{4t^2}(\delta_{-t} + \delta_t) + \left(1 - \frac{1}{2t^2}\right)\delta_0, \quad t \in \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 1\right],$$

ist \mathbf{c} -optimal in Ξ (siehe Beispiel 2.30). Es gilt $S = I_3$ und

$$\begin{aligned} R &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{5} \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -t & 0 & t \\ t^2 & 0 & t^2 \end{pmatrix}, \quad F^{-1} = \frac{1}{2t^2} \begin{pmatrix} 0 & -t & 1 \\ 2t^2 & 0 & -2 \\ 0 & t & 1 \end{pmatrix}, \\ F^{-1\top}\mathbf{1}_3 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad RF^{-1\top}\mathbf{1}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad F^{-1}RF^{-1\top}\mathbf{1}_3 = \frac{1}{6t^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 6t^2 - 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{1}_3^\top F^{-1}RF^{-1\top}\mathbf{1}_3 &= 1, \quad \mathbf{p}^* = \frac{1}{4t^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 4t^2 - 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q} = \frac{1}{6t^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 6t^2 - 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

Also gilt für den Vektor \mathbf{p} der Massen in den Versuchspunkten

$$\mathbf{p} = \frac{1}{4t^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 4t^2 - 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \alpha \frac{1}{6t^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 6t^2 - 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und α_0 ergibt sich zu

$$\alpha_0 = \min \left\{ \frac{3}{2}, \frac{3 \cdot 2t^2 - 1}{2 \cdot 3t^2 - 1} \right\} = 1 - \frac{1}{6t^2 - 2}.$$

Für α_0 erhalten wir den größten Wert, wenn $t = 1$ ist. In diesem Falle ergibt sich:

$$\xi = \left(\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{6} \right) (\delta_{-1} + \delta_1) + \left(\frac{1}{2} - \frac{2\alpha}{3} \right) \delta_0$$

ist \mathbf{c} -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, $\alpha \leq \frac{3}{4}$.

Wir haben in den Beispielen 3.25, 3.26, 3.28 und 3.29 gesehen, dass man zur Konstruktion eines \mathbf{c} -optimalen Versuchsplans in $\Upsilon[a, \infty]$ am besten einen \mathbf{c} -optimalen Versuchsplan in Ξ mit k Massepunkten und $\text{Rang}(F) = k$ nimmt (falls vorhanden) und dann Satz 3.27 anwendet. Darüberhinaus haben wir gesehen, dass es sich lohnen kann, verschiedene solcher \mathbf{c} -optimaler Versuchspläne in Ξ mit $\text{Rang}(F) = k$ zu betrachten und denjenigen zu verwenden, für den α_0 aus Satz 3.27 so groß wie möglich wird.

In den nachfolgenden Beispielen interessieren wir uns speziell für den Fall $\mathbf{c} = \mathbf{e}_k$. In diesem Fall können wir \mathbf{q} aus Satz 3.27 vereinfachen.

Satz 3.30 Sei die Situation von Satz 3.27 gegeben, sei $\mathbf{c} = \mathbf{e}_k$ und $\tilde{F}, \tilde{R} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times k}$ die ersten $(k-1)$ Zeilen von F bzw. R . Sei $(\mathbf{1}_k, S\tilde{F}^\top) \in \mathbb{R}^{k \times k}$ invertierbar. Dann ist \mathbf{q} in Satz 3.27 gegeben durch

$$\mathbf{q} = (\mathbf{1}_k, S\tilde{F}^\top)^{-1\top} \cdot (1, \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} \tilde{R}^\top)^\top.$$

Beweis: Multiplizieren wir die Gleichung

$$\mathbf{p} = ((1 - \alpha) + \alpha \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} R F^{-1\top} S \mathbf{1}_k) \mathbf{p}^* - \alpha S F^{-1} R F^{-1\top} S \mathbf{1}_k$$

aus Satz 3.27 von links mit $F S$, lassen die letzte Zeile weg und benutzen $\tilde{F} S \mathbf{p}^* = \mathbf{0}_{k-1}$ (Elfving), so erhalten wir

$$\tilde{F} S \mathbf{p} = -\alpha \tilde{R} F^{-1\top} S \mathbf{1}_k.$$

Außerdem gelten $\mathbf{1}_k^\top \mathbf{p} = 1 - \alpha$, $\mathbf{1}_k^\top \mathbf{p}^* = 1$. Damit

$$\begin{aligned} \tilde{F}S(\mathbf{p}^* - \mathbf{p}) &= \alpha \tilde{R}F^{-1\top}S\mathbf{1}_k, & \mathbf{1}_k^\top(\mathbf{p}^* - \mathbf{p}) &= \alpha \\ \implies (\mathbf{1}_k, S\tilde{F}^\top)^\top(\mathbf{p}^* - \mathbf{p}) &= \alpha(1, \mathbf{1}_k^\top SF^{-1}\tilde{R}^\top)^\top \\ \implies \mathbf{q} &= \frac{\mathbf{p}^* - \mathbf{p}}{\alpha} = (\mathbf{1}_k, S\tilde{F}^\top)^{-1\top}(1, \mathbf{1}_k^\top SF^{-1}\tilde{R}^\top)^\top. \end{aligned}$$

□

Dass diese neue Darstellung von \mathbf{q} unter Umständen eine Vereinfachung von der Darstellung in Satz 3.27 darstellt, liegt daran, dass in bestimmten Fällen für $\mathbf{1}_k^\top SF^{-1}$ eine einfache Darstellung vorliegt, nicht jedoch für $SF^{-1}RF^{-1\top}\mathbf{1}_k$. Die Matrix $(\mathbf{1}_k, S\tilde{F}^\top)^{-1}$ ist leichter zu berechnen, wenn gerade die letzte Komponente f_k von f „kompliziert“ ist.

Kapitel 4

D - und \mathbf{e}_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ für Polynomregression

In diesem Kapitel betrachten wir nun speziell die Polynomregression $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$ und interessieren uns für die beiden wichtigen Optimalitäten, die D - und die \mathbf{e}_k -Optimalität. In den nächsten beiden Bemerkungen machen wir erfreuliche Aussagen: Wir müssen nicht auf unterschiedliche Versuchsbereiche eingehen, da wir jedes kompakte Intervall durch lineare Transformation auf das Intervall $[-1, 1]$ übertragen können. Außerdem brauchen wir nicht weiter zu suchen, wenn wir einen optimalen Versuchsplan gefunden haben. Der optimale Versuchsplan in $\Upsilon[a, b]$ ist eindeutig.

Bemerkung 4.1 (Wahl des Versuchsbereiches) *Die Äquivalenztheoreme im Fall $\Upsilon[a, b]$ (Korollar 3.20 und 3.22) und im Fall Ξ (Satz 2.36 und Korollar 2.18 mit $p = 0$) weisen eine analoge Struktur auf. Deswegen lassen sich die Argumente aus Beispiel 2.25 und Bemerkung 2.41 für die Polynomregression und die Menge von Versuchsplänen Ξ direkt auf den Fall $\Upsilon[a, b]$ übertragen. Es genügt daher auch für die \mathbf{e}_k - und D -Optimalität in $\Upsilon[a, b]$ ohne Beschränkung der Allgemeinheit den Fall $\mathcal{E} = [-1, 1]$ zu betrachten. Andere kompakte Intervalle lassen sich durch lineare Transformation auf dieses Intervall übertragen. Dabei muss man die Funktionen a, b geeignet transformieren, wenn sie nicht konstant auf dem Versuchsbereich sind.*

Bemerkung 4.2 (Eindeutigkeit des optimalen Versuchsplans) *Sei ξ ein \mathbf{e}_k - (bzw. D -) optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b]$. Die Funktion $x \mapsto (\mathbf{e}_k^\top M(\xi)^{-1} f(x))^2$ (bzw. $x \mapsto (f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x))$) ist ein Polynom genau vom Grade $2k - 2$. Insbesondere ist das Polynom nicht konstant.*

Sei zunächst $b < \infty$. Nach Korollar 3.18 gilt für jeden weiteren \mathbf{e}_k - (bzw. D -) optimalen Versuchsplan η in $\Upsilon[a, b]$:

$$\text{eSupp}(\eta - a \cdot \tilde{\lambda}) \subseteq \overline{\text{eSupp}(\xi - a \cdot \tilde{\lambda})}. \quad (4.1)$$

Das einzige Wahrscheinlichkeitsmaß η mit der Eigenschaft (4.1) ist aber ξ .

Nun betrachten wir $b = \infty$. Die Funktion $x \mapsto (\mathbf{e}_k^\top M(\xi)^{-1} f(x))^2$ (bzw. $x \mapsto (f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x))$) hat höchstens k lokale Maxima auf \mathcal{E} . Seien diese x_0, \dots, x_{m-1} , $m \leq k$ und sei $F \in \mathbb{R}^{k \times m}$ die Matrix mit Spalten $f(x_i)$, $i = 0, \dots, m-1$. Da wir Polynomregression betrachten, hat die Matrix F den vollen Rang m . Nach Korollar 3.18 gilt für jeden \mathbf{e}_k - (bzw. D -) optimalen Versuchsplan η in $\Upsilon[a, \infty]$:

$$\text{eSupp}(\eta - a \cdot \tilde{\lambda}) = \text{Supp}(\eta - a \cdot \tilde{\lambda}) \subseteq \{x_i \mid i = 0, \dots, m-1\}.$$

Seien $M = \int_{\mathcal{E}} f f^\top d\xi$, $\tilde{M} = \int_{\mathcal{E}} f f^\top d\eta$ die Momentenmatrizen von ξ und η und $R = \int_{\mathcal{E}} f f^\top \tilde{a} d\tilde{\lambda}$ und $a = \alpha \tilde{a}$ mit $\int_{\mathcal{E}} \tilde{a} d\tilde{\lambda} = 1$. Dann gibt es $p_0, \dots, p_{m-1} \geq 0$, $\sum_{i=0}^{m-1} p_i = 1 - \alpha$ und $\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1} \geq 0$, $\sum_{i=0}^{m-1} \tilde{p}_i = 1 - \alpha$, so dass

$$M = \alpha R + F \text{diag}(p_0, \dots, p_{m-1}) F^\top, \quad \tilde{M} = \alpha R + F \text{diag}(\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1}) F^\top.$$

Für die \mathbf{e}_k -Optimalität folgt die Eindeutigkeit des optimalen Versuchsplans jetzt aus Lemma 3.24. Für die D -Optimalität folgt nach Pukelsheim (1993), Seite 151, dass $M \mapsto (\det M)^{1/k}$ strikt konkav auf $PD(k)$ ist. Daher folgt aus der D -Optimalität von ξ und η in $\Upsilon[a, b]$ die Gleichheit $M = \tilde{M}$ und somit

$$F \text{diag}(p_0, \dots, p_{m-1}) F^\top = F \text{diag}(\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{m-1}) F^\top.$$

Da F vollen Rang hat, können wir von links mit $(F^\top F)^{-1} F^\top$ und von rechts mit $F(F^\top F)^{-1}$ multiplizieren und erhalten $p_i = \tilde{p}_i$, $i = 0, \dots, m-1$. Also ist der optimale Versuchsplan eindeutig.

4.1 \mathbf{e}_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit a allgemein

Für fest vorgegebenes k können wir zwar sowohl α_0 als auch die Gewichte p_i für den \mathbf{e}_k -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[a, \infty]$ mit Satz 3.27 oder Satz 3.30 ausrechnen. Eine allgemeine Strukturaussage für die Polynomregression ist aber damit nicht möglich. Weiter wird die Invertierung der Matrix F (bzw. von $(\mathbf{1}, S\tilde{F}^\top)$ bei Satz 3.30) für wachsendes k auch für ein Computerprogramm immer aufwändiger.

Der folgende Satz 4.4 vereinfacht für Polynomregression (zu beliebigem Grad $k - 1$) den Satz 3.27 bzw. Satz 3.30 wesentlich, macht eine unerwartet erfreuliche Aussage über das Verhalten von α_0 für wachsenden Polynomgrad und darüberhinaus lässt der Beweis tiefere Einblicke in die Struktur des zugrundeliegenden Problems zu.

Wir benötigen Tschebyschev-Polynome $T_n(x)$, $n \in \mathbb{N}_0$, $x \in [-1, 1]$, und für den Beweis von Satz 4.4 auch Lagrange-Polynome $L_i^{(n)}(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$, $n \in \mathbb{N}$, $0 \leq i \leq n$, $x \in [-1, 1]$, zu den Stützstellen

$$x_j = x_j^{(n)} = \cos\left(\frac{(n-j)\pi}{n}\right), \quad j = 0, \dots, n. \quad (4.2)$$

Die wichtigsten Eigenschaften von T_n und $L_i^{(n)}$, die wir benötigen, stellen wir im Anhang A zusammen. Weiter müssen wir für eine Grenzwertaussage eine technische Voraussetzung an die Funktion \tilde{a} stellen.

Voraussetzung 4.3 Die Funktion \tilde{a} habe folgende beiden Eigenschaften:

(1) Die Funktion $t \mapsto \tilde{a}(\cos(t)) \cdot \sin(t)$ sei stetig und besitze eine stückweise stetige erste Ableitung für $t \in [0, \pi]$.

(2) Es gelte

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left| \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx \right| < \infty.$$

Wir werden später sehen, dass Voraussetzung 4.3 z.B. für $\tilde{a} \equiv 1$ und für $\tilde{a}(x) = 2/(\pi\sqrt{1-x^2})$ erfüllt ist.

Satz 4.4 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$, sowie $a(x) = \alpha \tilde{a}(x)$ und $\int_{\mathcal{E}} \tilde{a} d\tilde{\lambda} = 1$. Weiter seien $\nu_i = 1/2$ falls $i \in \{0, k-1\}$, $\nu_i = 1$ falls $i \in \mathbb{N} \setminus \{0, k-1\}$, und $p_i = \frac{\nu_i}{k-1} - \alpha q_i$, $i = 0, \dots, k-1$, mit

$$q_i = \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{2k-3} \cos\left(\frac{j(k-1-i)\pi}{k-1}\right) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx$$

sowie

$$\alpha_0 := \min\{\nu_i / ((k-1)q_i) \mid i = 0, \dots, k-1 \text{ mit } q_i > 0\}. \quad (4.3)$$

Dann gelten:

a) Für $\alpha \in [0, \alpha_0]$ ist der Versuchsplan

$$\xi = a \cdot \tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{k-1} p_i \delta_{\cos(\pi(k-1-i)/(k-1))}$$

e_k -optimal in $\Upsilon[a, \infty]$.

b) Falls \tilde{a} die Voraussetzung 4.3 erfüllt, gilt für $\alpha_0 = \alpha_0^{(k)}$ die Grenzwertaussage

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_0^{(k)} = 2 \left(\max_{z \in [-1, 1]} \left\{ 1 + \frac{\pi}{2} \tilde{a}(z) \sqrt{1 - z^2} \right\} \right)^{-1}.$$

Wir beweisen Satz 4.4 a) zunächst ausgehend von Satz 3.27 konstruktiv. Dazu benötigen wir folgendes Lemma. Später werden wir einen anderen (nicht-konstruktiven) Beweis angeben, der weder Satz 3.27 noch Lemma 4.5 b) und c) benötigt.

Lemma 4.5 Sei $k \geq 2$,

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_{k-1} \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_{k-1}^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^{k-1} & x_1^{k-1} & \cdots & x_{k-1}^{k-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k}$$

mit $x_j = \cos\left(\frac{(k-1-j)\pi}{k-1}\right)$, $j = 0, \dots, k-1$, und $S = \text{diag}(\dots, -1, 1, -1, 1)$, $R = \int_{-1}^1 f f^\top \tilde{a} d\tilde{\lambda}$. Dann gilt:

a) $\forall x \in [-1, 1] : \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} f(x) = T_{k-1}(x)$.

b) $\mathbf{1}_k^\top S F^{-1} R F^{-1} \mathbf{1}_k = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \int_{-1}^1 T_{2k-2}(x) \tilde{a}(x) dx$.

c) Sei $\nu_j := 1/2$, falls $j \in \{0, k-1\}$, $\nu_j := 1$, falls $j \in \mathbb{R} \setminus \{0, k-1\}$. Dann gilt für $i \in \{0, \dots, k-1\}$:

$$\mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} R F^{-1} \mathbf{1}_k = \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{2k-2} \nu_{j/2} T_j(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx.$$

Beweis: a) Die Funktion $x \mapsto \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} f(x)$ ist ein Polynom vom Grad $k-1$. Für dieses gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} f(x_i) &= \mathbf{1}_k^\top S \mathbf{e}_{i+1} = (-1)^{k-1-i} = \cos((k-1-i)\pi) \\ &= \cos((k-1) \arccos(x_i)) = T_{k-1}(x_i), \quad i = 0, \dots, k-1 \end{aligned}$$

(man vergleiche dazu die Definition von T_n im Anhang A). Also stimmt dieses Polynom an k Stellen mit dem Tschebyschev-Polynom vom Grad $k - 1$ überein und daher folgt die Behauptung.

b) Es gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} R F^{-1\top} S \mathbf{1}_k &= \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} \int_{-1}^1 f(x) f(x)^\top \tilde{a}(x) \tilde{\lambda}(dx) F^{-1\top} S \mathbf{1}_k \\ &= \int_{-1}^1 (\mathbf{1}_k^\top S F^{-1} f(x))^2 \tilde{a}(x) \tilde{\lambda}(dx) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (T_{k-1}(x))^2 \tilde{a}(x) dx. \end{aligned}$$

Nach Formel (A.4) im Anhang gilt für das Tschebyschev-Polynom $T_n(x)$, $n \in \mathbb{N}$:

$$T_n(x)^2 = \frac{1}{2}(T_{2n}(x) + T_0(x)) = \frac{1}{2}(T_{2n}(x) + 1).$$

Daher

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 (T_{k-1}(x))^2 \tilde{a}(x) dx = \frac{1}{4} \int_{-1}^1 T_{2k-2}(x) \tilde{a}(x) dx + \frac{1}{2}.$$

c) Es gilt

$$(-1)^{k-1-i} \mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} f(x_j) = (-1)^{k-1-i} \mathbf{e}_{i+1}^\top (-1)^{k-1-j} \mathbf{e}_{j+1} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (4.4)$$

Die Funktion $x \mapsto (-1)^{k-1-i} \mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} f(x)$ ist ein Polynom vom Grad $k - 1$ und daher wegen (4.4) gleich dem Lagrange-Interpolations-Polynom $L_i^{(k-1)}(x)$ zu den Stützstellen x_0, x_1, \dots, x_{k-1} .

Sei $\nu_j := 1/2$, falls $j \in \{0, k - 1\}$, $\nu_j := 1$, falls $j \in \mathbb{R} \setminus \{0, k - 1\}$. Wir haben

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} R F^{-1\top} S \mathbf{1}_k &= \mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} \int_{[-1,1]} f(x) f(x)^\top \tilde{a}(x) \tilde{\lambda}(dx) F^{-1\top} S \mathbf{1}_k \\ &= \int_{[-1,1]} \mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} f(x) f(x)^\top F^{-1\top} S \mathbf{1}_k \tilde{a}(x) \tilde{\lambda}(dx) \\ &= \frac{(-1)^{k-1-i}}{2} \int_{-1}^1 L_i^{(k-1)}(x) T_{k-1}(x) \tilde{a}(x) dx \\ &\stackrel{(A.6)}{=} \frac{(-1)^{k-1-i}}{2} \int_{-1}^1 \frac{2}{k-1} \nu_i \sum_{j=0}^{k-1} \nu_j T_j(x_i) T_j(x) T_{k-1}(x) \tilde{a}(x) dx \\ &= \frac{(-1)^{k-1-i}}{k-1} \nu_i \sum_{j=0}^{k-1} \nu_j T_j(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) T_{k-1}(x) \tilde{a}(x) dx \\ &\stackrel{(A.4)}{=} \frac{(-1)^{k-1-i}}{k-1} \nu_i \sum_{j=0}^{k-1} \nu_j T_j(x_i) \int_{-1}^1 \frac{1}{2} (T_{k-1+j}(x) + T_{k-1-j}(x)) \tilde{a}(x) dx \\ &= \frac{(-1)^{k-1-i}}{2(k-1)} \nu_i \sum_{j=0}^{2k-2} \nu_{j/2} T_{|k-1-j|}(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx \\ &= \frac{1}{2(k-1)} \nu_i \sum_{j=0}^{2k-2} \nu_{j/2} T_j(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx, \end{aligned}$$

wobei letztere Gleichheit wegen

$$\begin{aligned} (-1)^{k-1-i} T_{|k-1-j|}(x_i) &= (-1)^{k-1-i} \cos\left(\left|k-1-j\right| \cdot (k-1-i) \frac{\pi}{k-1}\right) \\ &= (-1)^{k-1-i} \cos\left((k-1-j)(k-1-i) \frac{\pi}{k-1}\right) \\ &= \cos\left(j(k-1-i) \frac{\pi}{k-1}\right) = T_j(x_i) \end{aligned}$$

gilt. □

Um Satz 4.4 b) zu beweisen, verwenden wir das folgende Lemma.

Lemma 4.6 Sei $\nu_j := 1/2$, falls $j \in \{0, k-1\}$, $\nu_j := 1$, falls $j \in \mathbb{R} \setminus \{0, k-1\}$. Für \tilde{a} gelte Voraussetzung 4.3. Dann gilt für $z \in [-1, 1]$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{2k-3} \nu_{j/2} T_j(z) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx &= \frac{\pi}{2} \text{Pr}_{[T_0, \dots, T_{2k-3}]^{L^2(1/\sqrt{1-x^2}, \lambda)}}(\tilde{a}(z) \sqrt{1-z^2}) \\ &\rightarrow \frac{\pi}{2} \tilde{a}(z) \sqrt{1-z^2} \quad (k \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

gleichmäßig auf $[-1, 1]$, wobei $\text{Pr}_{[T_0, \dots, T_{2k-3}]^{L^2(1/\sqrt{1-x^2}, \lambda)}}$ der Orthogonalprojektor in $L^2(1/\sqrt{1-x^2} \cdot \lambda)$ auf $[T_0, \dots, T_{2k-3}] = [1, x, \dots, x^{2k-3}]$ ist.

Beweis: Definiert man das Skalarprodukt $\langle g, h \rangle := \int_{-1}^1 g(x)h(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ auf $\{h : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R} \mid \|h\| := \langle h, h \rangle^{1/2} < \infty\}$ und normiert die Tschebyschev-Polynome durch

$$\tilde{T}_n(x) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot T_n(x), & n = 0, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot T_n(x), & n > 0, \end{cases}$$

so bilden $(\tilde{T}_n)_{n=0,1,\dots}$ nach (A.1) und (A.2) eine Orthonormalbasis dieses Raumes.

Daher gilt

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{2k-3} \nu_{j/2} T_j(z) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx &= \frac{\pi}{2} \sum_{j=0}^{2k-3} \tilde{T}_j(z) \int_{-1}^1 \tilde{a}(x) \sqrt{1-x^2} \tilde{T}_j(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \\ &= \frac{\pi}{2} \text{Pr}_{[T_0, \dots, T_{2k-3}]^{L^2(1/\sqrt{1-x^2}, \lambda)}}(\tilde{a}(z) \sqrt{1-z^2}). \end{aligned}$$

Diese Orthogonalprojektion konvergiert für $k \rightarrow \infty$ gleichmäßig auf $[-1, 1]$ gegen $\tilde{a}(z) \sqrt{1-z^2}$. Die punktweise Konvergenz folgt mit Satz 4.2 und den Erläuterungen auf Seite 170-171 in Schwarz (1988), da $F(t) := \tilde{a}(\cos(t)) \sqrt{1 - (\cos(t))^2} = \tilde{a}(\cos(t)) \sin(t)$ nach Voraussetzung 4.3 (1) stetig und stückweise stetig differenzierbar ist. Die gleichmäßige Konvergenz folgt aus Schwarz (1988),

Satz 4.11, oder aus Rivlin (1990), Seite 161, da die Koeffizienten $c_j = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \tilde{a}(x) T_j(x) dx$ der Tschebyschev-Entwicklung nach Voraussetzung 4.3 (2) eine absolut konvergente Reihe bilden. Also folgt die Behauptung. \square

Beweis von Satz 4.4: a) Nach Satz 2.40 hat der \mathbf{e}_k -optimale Versuchsplan in Ξ die Massen $p_i^* = \frac{\nu_i}{k-1}$ in den Punkten $x_i = \cos((k-1-i)\pi/(k-1))$. Also ist nach Satz 3.27 der Versuchsplan mit denselben Massepunkten und den Gewichte $p_i = p_i^* - \alpha q_i$ \mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[\alpha \tilde{a}, \infty]$ (für α klein genug), wobei

$$q_i = (1 - \mathbf{1}_k^\top S F^{-1} R F^{-1\top} S \mathbf{1}_k) p_i^* + \mathbf{e}_{i+1}^\top S F^{-1} R F^{-1\top} S \mathbf{1}_k, \quad i = 0, \dots, k-1.$$

Mit Lemma 4.5 ergibt sich wegen $T_{2k-2}(x_i) = \cos(2(k-1-i)\pi) = 1$:

$$\begin{aligned} q_i &= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4} \int_{-1}^1 T_{2k-2}(x) \tilde{a}(x) dx \right) \frac{\nu_i}{k-1} + \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{2k-2} \nu_{j/2} T_j(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx \\ &= \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{2k-3} T_j(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx. \end{aligned}$$

Mit der Definition von T_n hat man

$$T_j(x_i) = \cos\left(\frac{j(k-1-i)\pi}{k-1}\right).$$

Man beachte dabei, dass die Matrizen S aus Satz 3.27 und Lemma 4.5 übereinstimmen, da die Elfving-Darstellung von \mathbf{e}_k

$$\frac{\mathbf{e}_k}{\rho(\mathbf{e}_k)} = F \operatorname{diag}(\dots, -1, 1, -1, 1) \mathbf{p}^*$$

lautet.

b) Mit a) folgt

$$\alpha_0^{(k)} = \min_i \{p_i^*/q_i\} = \min_i \left\{ 2 / \left(1 + \sum_{j=0}^{2k-3} \nu_{j/2} T_j(x_i) \int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx \right) \right\}.$$

Wegen Lemma 4.6 haben wir

$$\alpha_0^{(k)} \rightarrow 2 \left(\max_{z \in [-1, 1]} \left\{ 1 + \frac{\pi}{2} \tilde{a}(z) \sqrt{1-z^2} \right\} \right)^{-1} \quad (k \rightarrow \infty).$$

\square

Alternativer Beweis für Satz 4.4 a): Seien $p_i^* := \frac{\nu_i}{k-1}$, $P^* := \operatorname{diag}(p_0, \dots, p_{k-1})$ und $\xi^* := \sum_{i=0}^{k-1} p_i^* \delta_{\cos(\pi(k-1-i)/(k-1))}$. Wie in Satz 4.4 seien p_i, q_i gegeben und $\mathbf{q} := (q_0, \dots, q_{k-1})^\top$, $Q := \operatorname{diag}(q_0, \dots, q_{k-1})$. Wie in Lemma 4.5 seien F, S, R, x_j definiert und $\tilde{F}, \tilde{R} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times k}$ die ersten $k-1$ Zeilen von F bzw. R .

Wir definieren die folgenden aus Tschebyschev-Polynomen gebildete Funktionen und Matrizen:

$$\begin{aligned} h^{(1)}(x) &= (T_0(x), \dots, T_{k-2}(x))^\top, \\ h^{(2)}(x) &= (T_{k-1}(x), \dots, T_{2k-3}(x))^\top, \\ h(x) &= (h^{(1)}(x)^\top, h^{(2)}(x)^\top)^\top, \\ H^{(j)} &= (h^{(j)}(x_i))_{i=0, \dots, k-1}, \quad j = 1, 2, \\ H &= (h(x_i))_{i=0, \dots, k-1}. \end{aligned}$$

Damit können wir

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2(k-1)} \text{diag}(1/2, 1, 1, \dots, 1, 1/2) H^\top \int_{-1}^1 h(x) \tilde{a}(x) dx$$

schreiben. Unter Berücksichtigung von $(-1)^{k-1-j} T_j(x_i) = T_{j+k-1}(x_i)$ folgt

$$\begin{aligned} H^{(1)} S \mathbf{q} &= \frac{1}{2(k-1)} H^{(2)} \text{diag}(1/2, 1, 1, \dots, 1, 1/2) H^\top \int_{-1}^1 h(x) \tilde{a}(x) dx \\ &\stackrel{(A.7)}{=} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & & 1/4 & 0 & 1/4 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & & \ddots & \\ 0 & 1/4 & 0 & & \cdots & & 0 & 1/4 \end{pmatrix} \int_{-1}^1 h(x) \tilde{a}(x) dx \\ &\stackrel{(A.4)}{=} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 h^{(1)}(x) \tilde{a}(x) T_{k-1}(x) dx. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Wir multiplizieren (4.5) von links mit der Basiswechselmatrix von T_0, \dots, T_{k-2} auf x^0, \dots, x^{k-2} und benutzen Lemma 4.5 a). Damit erhalten wir

$$\tilde{F} S \mathbf{q} = \tilde{R} F^\top{}^{-1} S \mathbf{1}_k.$$

Wir schreiben $\mathbf{q} = Q \mathbf{1}_k$ und benutzen Elfving $\frac{\mathbf{e}_k}{\rho(\mathbf{e}_k)} = F S \mathbf{p}^*$ (\mathbf{e}_k -Optimalität von ξ^* in Ξ), also $\mathbf{1}_k = P^{*-1} \mathbf{p}^* = P^{*-1} S F^{-1} \frac{\mathbf{e}_k}{\rho(\mathbf{e}_k)}$. Für beliebige α gilt dann

$$\alpha (\tilde{R} F^\top{}^{-1} S P^{*-1} S F^{-1} - \tilde{F} S Q P^{*-1} S F^{-1}) \mathbf{e}_k = \mathbf{0}_{k-1}$$

und weiter

$$\alpha (\tilde{R} (F P^* F^\top)^{-1} - \tilde{F} Q F^\top (F P^* F^\top)^{-1}) \mathbf{e}_k = \mathbf{0}_{k-1}. \quad (4.6)$$

Es gilt

$$M(\xi^*) = F P^* F^\top, \quad M(\xi) = M(\xi^*) + \alpha (R - F Q F^\top).$$

Wegen (4.6) existiert also ein $\gamma \in \mathbb{R}$ mit

$$(\alpha (R - F Q F^\top) + (M(\xi^*)) M(\xi^*)^{-1}) \mathbf{e}_k = \gamma \mathbf{e}_k$$

und somit

$$M(\xi^*)^{-1} \mathbf{e}_k = \gamma M(\xi)^{-1} \mathbf{e}_k.$$

Die Aussage folgt nun aus Korollar 3.19. □

Für die untere Schrankenfunktion $\tilde{a}(x) = 2/(\pi\sqrt{1-x^2})$ vereinfacht sich Satz 4.4 erheblich. Wir erhalten wegen den Formeln (A.1) und (A.2) im Anhang:

$$\int_{-1}^1 T_j(x) \tilde{a}(x) dx = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 T_j(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 2, & \text{falls } j = 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Damit ergibt sich folgendes Korollar:

Korollar 4.7 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$, sowie $a(x) = \alpha 2/(\pi\sqrt{1-x^2})$. Weiter seien $\nu_i = 1/2$, $i \in \{0, k-1\}$, $\nu_i = 1$, sonst, $p_i = (1-\alpha)\frac{\nu_i}{k-1}$ und $\alpha \in [0, 1]$ beliebig. Dann ist der Versuchsplan

$$\xi = a \cdot \tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{k-1} p_i \delta_{\cos(\pi(k-1-i)/(k-1))}$$

\mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[a, \infty]$.

Unser Hauptinteresse gilt Schranken a, b , die auf dem Versuchsbereich konstant sind, also die Betrachtung von $\Upsilon[\alpha, \beta]$ bzw. $\Upsilon[\alpha, \infty]$ mit $\alpha \in [0, 1]$, $\beta \in [1, \infty)$. Diese Fälle werden wir in den nächsten Abschnitten betrachten.

4.2 \mathbf{e}_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit $a = \alpha$ konstant

Wir spezialisieren Satz 4.4 für $\tilde{a} \equiv 1$, also $a = \alpha$.

Satz 4.8 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$ und seien $\nu_i = 1/2$, $i \in \{0, k-1\}$, $\nu_i = 1$, sonst, und $p_i = \frac{\nu_i}{k-1} - \alpha q_i$, $i = 0, \dots, k-1$, mit

$$q_i = \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{k-2} \cos\left(\frac{2ji\pi}{k-1}\right) \cdot \left(\frac{1}{2j+1} - \frac{1}{2j-1}\right)$$

sowie α_0 wie in (4.3). Dann gilt:

a) Für $\alpha \in [0, \alpha_0]$ ist der Versuchsplan

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + \sum_{i=0}^{k-1} p_i \delta_{\cos(\pi(k-1-i)/(k-1))}$$

\mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$.

b) Für $\alpha_0 = \alpha_0^{(k)}$ gilt die Grenzwertaussage

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_0^{(k)} = \frac{4}{2 + \pi} \approx 0.777969.$$

Beweis: a) Nach Formel (A.5) für $n \geq 2$:

$$\int_{-1}^1 T_n(x) dx = \frac{1}{2} \left[\frac{T_{n+1}(x)}{n+1} - \frac{T_{n-1}(x)}{n-1} \right]_{-1}^1,$$

also unter Berücksichtigung von $T_n(1) = 1, T_n(-1) = (-1)^n$:

$$\int_{-1}^1 T_n(x) dx = \begin{cases} 0, & \text{falls } n \text{ ungerade,} \\ \frac{1}{n+1} - \frac{1}{n-1} = \frac{-2}{(n-1)(n+1)}, & \text{falls } n \text{ gerade,} \end{cases} \quad (4.7)$$

wobei dies auch für $n = 0, 1$ gilt. Daher folgt aus Satz 4.4 für $k \geq 2$

$$\begin{aligned} q_i &= \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{2k-3} T_j(x_i) \left(\frac{1}{j+1} - \frac{1}{j-1} \right) \cdot \mathbf{1}_{\{j \text{ gerade}\}} \\ &= \frac{\nu_i}{2(k-1)} \sum_{j=0}^{k-2} \cos\left(\frac{2ji\pi}{k-1}\right) \cdot \left(\frac{1}{2j+1} - \frac{1}{2j-1} \right). \end{aligned}$$

b) Da $t \mapsto \sin(t)$ stetig differenzierbar ist und da (4.7) gilt, ist die Voraussetzung 4.3 für $\tilde{a} \equiv 1$ erfüllt und mit Satz 4.4 b) ergibt sich die hier gemachte Aussage. \square

In Tabelle 4.1 sind die Massen p_i für $k = 2, 3, \dots, 11$ berechnet.

In Satz 4.8 konnten wir für „sehr viele“ α , nämlich für $\alpha \in [0, \alpha_0]$ mit $\alpha_0 = \alpha_0^{(k)} \rightarrow 0.777969\dots$ den \mathbf{e}_k -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ für die Polynomregression bestimmen. Im nachfolgenden Satz 4.9 betrachten wir den Fall, dass α nahe bei 1 ist. Auch in diesem Fall können wir den optimalen Versuchsplan explizit angeben. Genauer gesagt geben wir den optimalen Versuchsplan für α in einem Intervall $[\alpha_1, 1]$ mit $\alpha_1 < 1$ an. Im Gegensatz zu dem weitreichenden Satz 4.8 haben wir das Ergebnis, dass α_1 mit wachsendem Polynomgrad $k-1$ gegen 1 konvergiert (siehe Satz 4.9 b). Allerdings deckt $[\alpha_1, 1]$ für kleine praxisrelevante k noch einen recht großen Bereich ab, wie wir später sehen werden. Im Fall $k = 3$ und $k = 4$ (quadratische und kubische Regression) gilt sogar $\alpha_0 = \alpha_1$, womit das Problem der Bestimmung des \mathbf{e}_k -optimalen Versuchsplans in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ vollständig gelöst ist. Für $k = 5$ ist $\alpha_0 < \alpha_1$, siehe Beispiel 4.13.

k	p_0	p_1	p_2
2	$\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\alpha$		
3	$\frac{1}{4} - \frac{1}{6}\alpha$	$\frac{1}{2} - \frac{2}{3}\alpha$	
4	$\frac{1}{6} - \frac{1}{10}\alpha$	$\frac{1}{3} - \frac{2}{5}\alpha$	
5	$\frac{1}{8} - \frac{1}{14}\alpha$	$\frac{1}{4} - \frac{4}{15}\alpha$	$\frac{1}{4} - \frac{34}{105}\alpha$
6	$\frac{1}{10} - \frac{1}{18}\alpha$	$\frac{1}{5} - \frac{70-4\sqrt{5}}{315}\alpha$	$\frac{1}{5} - \frac{70+4\sqrt{5}}{315}\alpha$
7	$\frac{1}{12} - \frac{1}{22}\alpha$	$\frac{1}{6} - \frac{1556}{10395}\alpha$	$\frac{1}{6} - \frac{76}{385}\alpha$
8	$\frac{1}{14} - \frac{1}{26}\alpha$	$\frac{1}{7} - \left(\frac{1}{7} + \frac{2c(1/7)}{315} - \frac{146c(2/7)}{3003} + \frac{38c(3/7)}{3465} \right) \alpha$	$\frac{1}{7} - \left(\frac{1}{7} + \frac{38c(1/7)}{3465} - \frac{2c(2/7)}{315} + \frac{146c(3/7)}{3003} \right) \alpha$
9	$\frac{1}{16} - \frac{1}{30}\alpha$	$\frac{1}{8} - \frac{5720-844\sqrt{2}}{45045}\alpha$	$\frac{1}{8} - \frac{5956}{45045}\alpha$
10	$\frac{1}{18} - \frac{1}{34}\alpha$	$\frac{1}{9} - \left(\frac{566}{5005} + \frac{2c(1/9)}{693} - \frac{86c(2/9)}{2295} - \frac{14c(4/9)}{1755} \right) \alpha$	$\frac{1}{9} - \left(\frac{566}{5005} + \frac{14c(1/9)}{1755} + \frac{2c(2/9)}{693} - \frac{86c(4/9)}{2295} \right) \alpha$
11	$\frac{1}{20} - \frac{1}{38}\alpha$	$\frac{1}{10} - \frac{6845064-637364\sqrt{5}}{72747675}\alpha$	$\frac{1}{10} - \frac{1608880-92756\sqrt{5}}{14549535}\alpha$

k	p_3	p_4	p_5
7	$\frac{1}{6} - \frac{2234}{10395}\alpha$		
8	$\frac{1}{7} - \left(\frac{1}{7} + \frac{146c(1/7)}{3003} - \frac{38c(2/7)}{3465} + \frac{2c(3/7)}{315} \right) \alpha$		
9	$\frac{1}{8} - \frac{5720+844\sqrt{2}}{45045}\alpha$	$\frac{1}{8} - \frac{1450}{9009}\alpha$	
10	$\frac{1}{9} - \frac{11174}{85085}\alpha$	$\frac{1}{9} - \left(\frac{566}{5005} + \frac{86c(1/9)}{2295} - \frac{14c(2/9)}{1755} - \frac{2c(4/9)}{693} \right) \alpha$	
11	$\frac{1}{10} - \frac{6845064+637364\sqrt{5}}{72747675}\alpha$	$\frac{1}{10} - \frac{1608880+92756\sqrt{5}}{14549535}\alpha$	$\frac{1}{10} - \frac{9360994}{72747675}\alpha$

Tabelle 4.1: Massen p_i DES e_k -OPTIMALEN VERSUCHSPÄNE IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ AUS SATZ 4.8. ES GILT JEWELNS $p_{k-1-i} = p_i$ UND $c(x) := \cos(x\pi)$

Satz 4.9 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$.

a) Es existiert ein $\alpha_1 = \alpha_1^{(k)} \in [0, 1)$, so dass für alle $\alpha \in [\alpha_1, 1]$ gilt: Ein Versuchsplan ξ ist genau dann e_k -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1).$$

b) Für eine Folge $\alpha_1^{(k)}$, die a) erfüllt, gilt die Grenzwertaussage

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_1^{(k)} = 1.$$

Um die Grenzwertaussage in Satz 4.9 b) zu beweisen, benötigen wir das folgende Lemma.

Lemma 4.10 Sei $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 1$ und

$$\begin{aligned} c_k(x, \xi) &:= f(x)^\top \left(\int_{-1}^1 f(t) f(t)^\top \xi(dt) \right)^{-1} e_k, \\ d_k(x, y, \xi) &:= f(x)^\top \left(\int_{-1}^1 f(t) f(t)^\top \xi(dt) \right)^{-1} f(y). \end{aligned}$$

Dann gilt:

a)

$$c_k(x, \tilde{\lambda}) = \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k} \cdot P_{k-1}(x).$$

b)

$$d_k(x, y, \tilde{\lambda}) = \sum_{j=0}^{k-1} (2j+1) \cdot P_j(x) P_j(y).$$

c)

$$\begin{aligned} d_k(x, -1, \tilde{\lambda}) &= d_k(-x, 1, \tilde{\lambda}), \\ d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) + (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda}) &= P'_k(x), \\ d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) - (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda}) &= P'_{k-1}(x). \end{aligned}$$

d) Für $\alpha \in (0, 1]$ gilt:

$$c_k \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1) \right) = \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k} \cdot \frac{1}{\alpha} \left(P_{k-1}(x) - \frac{1 - \alpha}{\alpha + (1 - \alpha)k(k+1)/2} P'_k(x) \right).$$

Beweis: a) Zur Berechnung von $c_k(x, \tilde{\lambda})$ wird ein Basiswechsel auf die Orthogonalbasis des $L^2(\tilde{\lambda})$ bestehend aus den Legendre-Polynomen P_0, \dots, P_{k-1} durchgeführt. Sei die Funktion g gegeben durch $g(x) = (P_0(x), P_1(x), \dots, P_{k-1}(x))^\top$ und $A \in \mathbb{R}^{k \times k}$ so, dass

$$g(x) = A \cdot f(x), \quad f(x) = A^{-1} \cdot g(x), \quad x \in [-1, 1].$$

Dabei ist A eine linke untere Dreiecksmatrix und der Eintrag in der rechten unteren Ecke ist $\frac{1}{2^{k-1}} \binom{2k-2}{k-1}$, siehe Formel (B.5) im Anhang. Dann gilt:

$$\begin{aligned} c_k(x, \tilde{\lambda}) &= f(x)^\top A^\top \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 A f(t) f(t)^\top A^\top dt \right)^{-1} A \mathbf{e}_k \\ &= g(x)^\top \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 g(t) g(t)^\top dt \right)^{-1} \mathbf{e}_k \cdot \frac{1}{2^{k-1}} \binom{2k-2}{k-1} \\ &\stackrel{(B.1)}{=} g(x)^\top \left(\text{diag} \left(1, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{2(k-1)+1} \right) \right)^{-1} \mathbf{e}_k \cdot \frac{1}{2^{k-1}} \binom{2k-2}{k-1} \\ &= \frac{2k-1}{2^{k-1}} \binom{2k-2}{k-1} \cdot P_{k-1}(x) = \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k} \cdot P_{k-1}(x). \end{aligned}$$

b) Wir gehen wie im a)-Teil vor und führen einen Basiswechsel zur Basis aus Legendre-Polynomen durch:

$$\begin{aligned} d_k(x, y, \tilde{\lambda}) &= f(x)^\top A^\top \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 A f(t) f(t)^\top A^\top dt \right)^{-1} A f(y) \\ &= g(x)^\top \left(\frac{1}{2} \int_{-1}^1 g(t) g(t)^\top dt \right)^{-1} g(y) \\ &\stackrel{(B.1)}{=} g(x)^\top \left(\text{diag} \left(1, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{2(k-1)+1} \right) \right)^{-1} g(y) \\ &= \sum_{j=0}^{k-1} (2j+1) \cdot P_j(x) P_j(y). \end{aligned}$$

c) Mit b) und den Formeln (B.3) und (B.15) hat man

$$\begin{aligned} d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) &= \sum_{j=0}^{k-1} (2j+1) P_j(x) P_j(1) = k \cdot \frac{P_{k-1}(x) - P_k(x)}{1-x}, \\ d_k(x, -1, \tilde{\lambda}) &= \sum_{j=0}^{k-1} (2j+1) P_j(x) (-1)^j = \sum_{j=0}^{k-1} (2j+1) P_j(-x) \\ &= d_k(-x, 1, \tilde{\lambda}) = k \frac{P_{k-1}(-x) - P_k(-x)}{1+x} = (-1)^{k-1} k \cdot \frac{P_{k-1}(x) + P_k(x)}{1+x}, \end{aligned}$$

womit also insbesondere die erste Gleichung gezeigt ist. Weiter folgt

$$\begin{aligned} d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) + (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda}) &= k \left(\frac{P_{k-1}(x) - P_k(x)}{1-x} + \frac{P_{k-1}(x) + P_k(x)}{1+x} \right) \\ &= 2k \frac{P_{k-1}(x) - x P_k(x)}{1-x^2} \stackrel{(B.13)}{=} 2P'_k(x) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) - (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda}) &= k \left(\frac{P_{k-1}(x) - P_k(x)}{1-x} - \frac{P_{k-1}(x) + P_k(x)}{1+x} \right) \\ &= 2k \frac{xP_{k-1}(x) - P_k(x)}{1-x^2} \stackrel{\text{(B.14)}}{=} 2P'_{k-1}(x). \end{aligned}$$

d) Sei $f_1(x) := (1, x^2, \dots, x^{k-3}, x^{k-1})^\top$, falls k ungerade und $f_1(x) := (x, x^3, \dots, x^{k-3}, x^{k-1})^\top$, falls k gerade, also $f_1(x) \in \mathbb{R}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor}$. Weiter seien die folgende Matrix und Vektoren definiert durch $M_1(\tilde{\lambda}) := \int_{[-1,1]} f_1 f_1^\top d\tilde{\lambda}$ und $\mathbf{1}^{(1)} := (1, 1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor}$, $\mathbf{e}_k^{(1)} = (0, 0, \dots, 0, 1)^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} c_k \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1-\alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1) \right) &= f(x)^\top M(\alpha \tilde{\lambda} + (1-\alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1))^{-1} \mathbf{e}_k \\ &= f_1(x)^\top \left(\alpha M_1(\tilde{\lambda}) + (1-\alpha) \mathbf{1}^{(1)} \mathbf{1}^{(1)\top} \right)^{-1} \mathbf{e}_k^{(1)}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Wir berechnen die Inverse mit der Sherman-Morrison-Formel, siehe z.B. Lancaster und Tismenetsky (1985), Seite 64, Aufgabe 5, und erhalten die Gleichheit von (4.8) und

$$\begin{aligned} f_1(x)^\top \left(\frac{1}{\alpha} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} - \frac{\frac{1-\alpha}{\alpha^2} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} \mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1}}{1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)}} \right) \mathbf{e}_k^{(1)} \\ = \frac{1}{\alpha} f_1(x)^\top M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{e}_k^{(1)} \\ - \frac{1-\alpha}{\alpha^2} \left(1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} \right)^{-1} \left(\mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{e}_k^{(1)} \right) \left(f_1(x) M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} \right). \end{aligned}$$

Nun gilt mit c) und a):

$$\begin{aligned} f_1(x)^\top M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{e}_k^{(1)} &= f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{e}_k = c_k(x, \xi) \stackrel{\text{a)}}{=} \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k} \cdot P_{k-1}(x), \\ \mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{e}_k^{(1)} &= f_1(1)^\top M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{e}_k^{(1)} = \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k} \cdot P_{k-1}(1) \stackrel{\text{(B.3)}}{=} \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k}, \\ f_1(x)^\top M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} &= \frac{1}{2} f(x) M(\tilde{\lambda})^{-1} (f(1) + (-1)^{k-1} f(-1)) \\ &= \frac{1}{2} (d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) + (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda})) \stackrel{\text{c)}}{=} P'_k(x), \\ \mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} &= f_1(1)^\top M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} = P'_k(1) \stackrel{\text{(B.4)}}{=} \frac{k(k+1)}{2}. \end{aligned}$$

Wir erhalten unter Verwendung von a)

$$\begin{aligned} c_k \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1-\alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1) \right) \\ = \frac{k}{\alpha 2^k} \binom{2k}{k} P_{k-1}(x) - \frac{1-\alpha}{\alpha^2} \left(1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \frac{k(k+1)}{2} \right)^{-1} \frac{k}{2^k} \binom{2k}{k} P'_k(x) \\ = \frac{k}{\alpha 2^k} \binom{2k}{k} \left(P_{k-1}(x) - \frac{1-\alpha}{\alpha + (1-\alpha)k(k+1)/2} P'_k(x) \right). \end{aligned} \quad \square$$

Beweis von Satz 4.9: a) Es gilt $\xi = \xi_\alpha = \alpha\tilde{\lambda} + (1 - \alpha)\frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1) \xrightarrow{st} \tilde{\lambda}$ für $\alpha \rightarrow 1$. Folglich gilt $c_k(x, \xi_\alpha) \rightarrow c_k(x, \tilde{\lambda}) = \text{const} \cdot P_{k-1}(x)$, $\alpha \rightarrow 1$, gleichmäßig, denn nach Satz 2.4 ist die Abbildung $\Xi^+ \rightarrow C[\mathcal{E}]$, $\xi \mapsto c_k(x, \xi)$ stetig, wenn Ξ^+ mit der von der starken Konvergenz erzeugten Metrik und $C[\mathcal{E}]$ mit der Supremumsmetrik versehen ist.

P_{k-1} hat genau $k - 2$ lokale Extrema auf $(-1, 1)$, an denen Funktionswerte angenommen werden, die betragsmäßig kleiner als 1 sind, siehe (B.3) im Anhang. Die absoluten Extrema von P_{k-1} sind in $x = \pm 1$, dort ist der Betrag der Funktionswerte gleich 1. Sei $\epsilon > 0$ so klein, dass sich die Funktionswerte an aufeinanderfolgenden lokalen Extremalstellen von $c_k(x, \tilde{\lambda}) = \text{const} \cdot P_{k-1}(x)$ mindestens um 2ϵ unterscheiden. Für α nahe bei 1 liegt das Polynom $k - 1$ -ten Grades $c_k(x, \xi_\alpha)$ im ϵ -Schlauch um $c_k(x, \tilde{\lambda})$:

$$\forall x \in \mathcal{E} : \quad c_k(x, \tilde{\lambda}) - \epsilon < c_k(x, \xi_\alpha) < c_k(x, \tilde{\lambda}) + \epsilon.$$

Folglich besitzt die Funktion $\mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$, $x \mapsto c_k(x, \xi_\alpha)$ genau $k - 2$ lokalen Extrema in $(-1, 1)$. Da für die Funktionswerte an den $k - 2$ lokalen Extrema gilt: $|c_k(x, \xi_\alpha)| < 1 - \epsilon$ und $|c_k(\pm 1, \xi_\alpha)| > 1 - \epsilon$, hat $|c_k(x, \xi_\alpha)|$ die einzigen globalen Extremalstellen im Intervall $[-1, 1]$ an den Randpunkten $x = \pm 1$.

b) Sei $\alpha \in [0, 1)$ beliebig, fest und zur Abkürzung $a_k := \frac{k}{\alpha^{2k}} \binom{2k}{k}$. Dann folgt wegen Lemma 4.10 d) und Formel (B.4) im Anhang:

$$c_k(1, \xi_\alpha)/a_k = P_{k-1}(1) - \frac{(1 - \alpha)k(k + 1)/2}{\alpha + (1 - \alpha)k(k + 1)/2} = \frac{\alpha}{\alpha + (1 - \alpha)k(k + 1)/2} = O\left(\frac{1}{k^2}\right) \quad (k \rightarrow \infty)$$

mit ξ_α wie im Beweis von a). Andererseits gilt

$$\max_{x \in [-1, 1]} |c_k(x, \xi_\alpha)|/a_k \geq \sqrt{\frac{1}{2} \int_{-1}^1 (c_k(x, \xi_\alpha)/a_k)^2 dx}$$

und (unter Ausnutzung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung sowie der Formeln (B.1) und (B.16))

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (c_k(x, \xi_\alpha)/a_k)^2 dx &\geq \int_{-1}^1 P_{k-1}(x)^2 dx - \frac{2(1 - \alpha)}{\alpha + (1 - \alpha)k(k + 1)/2} \int_{-1}^1 P_{k-1}(x) P_k'(x) dx \\ &\geq \frac{2}{2k - 1} - \frac{2(1 - \alpha)}{\alpha + (1 - \alpha)k(k + 1)/2} \sqrt{\int_{-1}^1 P_{k-1}(x)^2 dx \int_{-1}^1 P_k'(x)^2 dx} \\ &= \frac{2}{2k - 1} - \frac{2(1 - \alpha)}{\alpha + (1 - \alpha)k(k + 1)/2} \sqrt{\frac{2}{2k - 1} k(k + 1)} \\ &= \frac{2}{2k - 1} - O\left(\frac{1}{k^{3/2}}\right) \quad (k \rightarrow \infty), \end{aligned}$$

also gilt für k groß genug:

$$\max_{x \in [-1, 1]} |c_k(x, \xi_\alpha)|/a_k \geq \text{const}/\sqrt{k}.$$

k	2	3	4	5	6	7	8	∞
$\alpha_0^{(k)}$	1	0.75	0.8333	0.7721	0.7980	0.7755	0.7882	0.7780
$\alpha_1^{(k)}$	0	0.75	0.8333	0.8877	0.9205	0.9412	0.9549	1

Tabelle 4.2: NUMERISCHE WERTE FÜR $\alpha_0^{(k)}$ AUS SATZ 4.8 UND FÜR DIE KLEINSTMÖGLICHEN $\alpha_1^{(k)}$ AUS SATZ 4.9 FÜR DIE \mathbf{e}_k -OPTIMALITÄT IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ IM MODELL $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$

Daraus folgt

$$|c_k(1, \xi_\alpha)| < \max_{x \in [-1, 1]} |c_k(x, \xi_\alpha)|$$

für k groß genug. Also kann ξ_α für k groß genug nach Korollar 3.19 nicht \mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ im Modell $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$ sein. \square

Wir geben in Tabelle 4.2 die numerischen Werte für $\alpha_0^{(k)}$, $k = 2, 3, \dots, 8$ aus Satz 4.8 und für die kleinstmöglichen $\alpha_1^{(k)}$, $k = 2, 3, \dots, 8$ aus Satz 4.9 an.

Für $k = 2$ (Geradenregression) können wir leicht zeigen, dass $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + (1 - \alpha)\frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1)$ der \mathbf{e}_2 -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ ist, $\alpha \in [0, 1]$. In den nachfolgenden Beispielen betrachten wir $k = 3, 4, 5$.

Beispiel 4.11 (Quadratische Regression) *Wir betrachten nun speziell Polynomregression mit $k = 3$, also quadratische Regression. Nach Lemma 4.10 d) gilt*

$$\begin{aligned} c_3(x) := c_3\left(x, \alpha\tilde{\lambda} + (1 - \alpha)\frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1)\right) &= \frac{15}{2\alpha} \left(P_2(x) - \frac{1 - \alpha}{\alpha + (1 - \alpha)6} P_3'(x) \right) \\ &= \frac{15}{4\alpha} \left((3x^2 - 1) - \frac{1 - \alpha}{\alpha + (1 - \alpha)6} (15x^2 - 3) \right). \end{aligned}$$

Der Versuchsplan $\alpha\tilde{\lambda} + (1 - \alpha)\frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1)$ ist genau dann \mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn $\forall y \in [-1, 1] : |c_3(1)| \geq |c_3(y)|$. Da c_3 ein Polynom zweiten Grades mit $\forall y \in [-1, 1] : c_3(y) = c_3(-y)$ ist, ist dies äquivalent zu

$$c_3(1) \geq -c_3(0) \iff 1 \geq \frac{1 - \alpha}{\alpha + (1 - \alpha)6} \cdot 9 \iff \alpha \geq \frac{3}{4}.$$

Zusammen mit Satz 4.8 und Tabelle 4.1 hat man: Der Versuchsplan $\alpha\tilde{\lambda} + p_0\delta_{-1} + (1 - \alpha - 2p_0)\delta_0 + p_0\delta_1$ ist \mathbf{e}_3 -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ für die quadratische Regression mit

$$p_0 = \begin{cases} \frac{1}{4} - \frac{1}{6}\alpha, & \alpha \leq \frac{3}{4}, \\ \frac{1 - \alpha}{2}, & \alpha > \frac{3}{4}. \end{cases}$$

Beispiel 4.12 (Kubische Regression) Wir betrachten nun speziell Polynomregression mit $k = 4$, also kubische Regression. Nach Lemma 4.10 d) gilt

$$\begin{aligned} c_4(x) &:= c_4 \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1) \right) = \frac{35}{2\alpha} (P_3(x) - \omega P_4'(x)) \\ &= \frac{35}{4\alpha} ((5x^3 - 3x) - \omega(35x^3 - 15x)) \end{aligned}$$

mit $\omega := \frac{1-\alpha}{\alpha+(1-\alpha)10} \in [0, 1/10]$. Die lokalen Extrema der Funktion c_4 sind die Nullstellen der Ableitung von $(5x^3 - 3x) - \omega(35x^3 - 15x)$, also $x^2 = \frac{1-5\omega}{5-35\omega}$. Der Versuchsplan $\alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1)$ ist genau dann \mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn $\forall y \in [-1, 1] : |c_4(1)| \geq |c_4(y)|$. Also folgt, dass der Versuchsplan genau dann optimal ist, wenn

$$\begin{aligned} &\left| \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1-5\omega}{5-35\omega}} \left(5 \frac{1-5\omega}{5-35\omega} - 3 - 35\omega \frac{1-5\omega}{5-35\omega} + 15\omega \right) \right| \leq |1 - 10\omega| \\ &\iff \left| \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1-5\omega}{5-35\omega}} (1 - 5\omega - 3 + 15\omega) \right| \leq 1 - 10\omega \\ &\iff \sqrt{\frac{1-5\omega}{5-35\omega}} (1 - 5\omega) \leq 1 - 10\omega \\ &\iff (1 - 5\omega)^3 \leq (1 - 10\omega)^2 (5 - 35\omega) \\ &\iff 0 \leq (1 - 15\omega) \underbrace{(4 - 60\omega + 225\omega^2)}_{>0} \\ &\iff \frac{1 - \alpha}{\alpha + (1 - \alpha)10} = \omega \leq \frac{1}{15} \\ &\iff \alpha \geq \alpha_1 := \frac{5}{6}. \end{aligned}$$

Wieder mit Satz 4.8 und Tabelle 4.1 hat man: Der Versuchsplan $\alpha \tilde{\lambda} + p_0 (\delta_{-1} + \delta_1) + \frac{1-\alpha-2p_0}{2} (\delta_{-1/2} + \delta_{1/2})$ ist \mathbf{e}_4 -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ für die kubische Regression mit

$$p_0 = \begin{cases} \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{10}, & \alpha \leq \frac{5}{6}, \\ \frac{1-\alpha}{2}, & \alpha > \frac{5}{6}. \end{cases}$$

Beispiel 4.13 (Polynomregression 4. Grades) Wir betrachten schließlich speziell Polynomregression vom 4. Grade, also $k = 5$. Nach Lemma 4.10 d) gilt

$$\begin{aligned} c_5(x) &:= c_5 \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1) \right) = \frac{315}{8\alpha} (P_4(x) - \omega P_5'(x)) \\ &= \frac{315}{64\alpha} ((35x^4 - 30x^2 + 3) - \omega(315x^4 - 210x^2 + 15)) \end{aligned}$$

mit $\omega := \frac{1-\alpha}{\alpha+(1-\alpha)15} \in [0, 1/15]$. Die lokalen Extrema der Funktion c_5 sind an den Nullstellen der Ableitung von $(35x^4 - 30x^2 + 3) - \omega(315x^4 - 210x^2 + 15)$, also $x^2 = \frac{3}{7} \cdot \frac{1-7\omega}{1-9\omega}$. Der Versuchsplan

$\alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1)$ ist genau dann \mathbf{e}_k -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn $\forall y \in [-1, 1] : |c_5(1)| \geq |c_5(y)|$.

Also folgt, dass der Versuchsplan genau dann optimal ist, wenn

$$\begin{aligned}
& \left| (35 - 315\omega) \cdot \frac{9}{49} \cdot \frac{(1 - 7\omega)^2}{(1 - 9\omega)^2} - (30 - 210\omega) \cdot \frac{3}{7} \cdot \frac{1 - 7\omega}{1 - 9\omega} + (3 - 15\omega) \right| \leq 8|1 - 15\omega| \\
& \iff \left| \frac{-45(1 - 7\omega)^2 + 21(1 - 5\omega)(1 - 9\omega)}{7(1 - 9\omega)} \right| \leq 8(1 - 15\omega) \\
& \iff \left| \underbrace{12(-2 + 28\omega - 105\omega^2)}_{<0} \right| \leq 56(1 - 9\omega)(1 - 15\omega) \\
& \iff 6 - 84\omega + 315\omega^2 \leq 14 - 336\omega + 1890\omega^2 \\
& \iff \omega^2 - \frac{4}{25}\omega + \frac{8}{1575} \geq 0 \\
& \stackrel{\omega \in [0, 1/15]}{\iff} \omega \leq \underbrace{\frac{2}{25} - \sqrt{\frac{4}{625} - \frac{8}{1575}}}_{=: \omega_0} \\
& \iff \alpha \geq \alpha_1 := \frac{1 - 15\omega_0}{1 - 14\omega_0} \approx 0.8877.
\end{aligned}$$

Aus Satz 4.8 und Tabelle 4.1 erhält man den optimalen Versuchsplan für $\alpha \leq \alpha_0 = \frac{105}{136} \approx 0.7721$.

Es gilt also $\alpha_0 < \alpha_1$.

4.3 D-optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit $a = \alpha$ konstant

Wir betrachten den Fall, dass α nahe bei 1 ist. Mit Hilfe der Berechnung und Untersuchung der Funktion $x \mapsto d(x, \tilde{\lambda})$ lassen sich Aussagen für das optimale $\xi \in \Upsilon[\alpha, \infty]$ für diese α gewinnen.

Lemma 4.14 Sei $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 1$ und

$$d_k(x, \xi) := f(x)^\top \left(\int_{-1}^1 f(t)f(t)^\top \xi(dt) \right)^{-1} f(x).$$

Dann gilt:

$$d_k(x, \tilde{\lambda}) = \sum_{i=0}^{k-1} (2i + 1)(P_i(x))^2 = 2 \int_{-1}^x P'_{k-1}(t)P'_k(t) dt + k^2. \quad (4.9)$$

Beweis: Die erste Gleichheit in (4.9) folgt wegen $d_k(x, \tilde{\lambda}) = d_k(x, x, \tilde{\lambda})$ sofort aus Lemma 4.10 b).

Die noch verbleibende Behauptung

$$\sum_{i=0}^{k-1} (2i + 1)(P_i(x))^2 = 2 \int_{-1}^x P'_{k-1}(t)P'_k(t) dt + k^2$$

wird mittels vollständiger Induktion gezeigt:

Induktionsanfang ($k = 1$):

$$\sum_{i=0}^{1-1} (2i+1)(P_i(x))^2 = (P_0(x))^2 = 1 = 2 \int_{-1}^x 0 \, dt + 1^2.$$

Induktionsschritt ($k \rightarrow k+1$):

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^k (2i+1)(P_i(x))^2 &= 2 \int_{-1}^x P'_{k-1}(t)P'_k(t) \, dt + (2k+1)(P_k(x))^2 + k^2 \\ &\stackrel{(B.3)}{=} 2 \int_{-1}^x P'_{k-1}(t)P'_k(t) \, dt + (2k+1) \left((P_k(x))^2 - (P_k(-1))^2 \right) + 2k+1 + k^2 \\ &= 2 \int_{-1}^x P'_{k-1}(t)P'_k(t) \, dt + (2k+1) \left(2 \int_{-1}^x P_k(t)P'_k(t) \, dt \right) + (k+1)^2 \\ &= 2 \int_{-1}^x (P'_{k-1}(t) + (2k+1)P_k(t))P'_k(t) \, dt + (k+1)^2 \\ &\stackrel{(B.6)}{=} 2 \int_{-1}^x P'_{k+1}(t)P'_k(t) \, dt + (k+1)^2. \end{aligned}$$

□

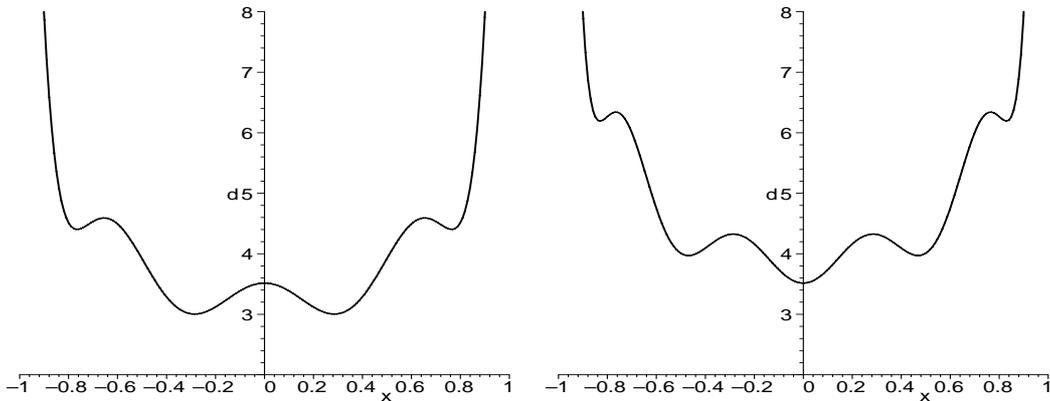


Abbildung 4.1: (A) $d_5(x, \tilde{\lambda})$ SOWIE (B) $d_6(x, \tilde{\lambda})$

Im folgenden Lemma wird die Funktion $d_k(x, \tilde{\lambda})$ näher untersucht.

Lemma 4.15 Die Funktion $x \mapsto d_k(x, \tilde{\lambda}), k \geq 2$, hat die folgenden Eigenschaften:

- a) Die lokalen Minima werden in den Nullstellen von P'_k (d.h. in den lokalen Extremwertstellen auf $(-1, 1)$ von P_k) angenommen. Die lokalen Maxima werden in den Nullstellen von P'_{k-1} und in -1 und 1 (d.h. in den lokalen Extremwertstellen von P_{k-1}) angenommen.

- b) Die lokalen Minima von $x \mapsto d_k(x, \tilde{\lambda})$ für von 0 nach 1 wachsendes x bilden eine streng wachsende Folge. Die lokalen Maxima von $x \mapsto d_k(x, \tilde{\lambda})$ für von 0 nach 1 wachsendes x bilden eine streng wachsende Folge.
- c) Das absolute Minimum wird für k gerade im Punkt $x = 0$ und für k ungerade in den beiden betragsmäßig kleinsten Nullstellen von P'_k angenommen. Das absolute Maximum wird in den Punkten $x = -1$ und $x = 1$ angenommen.

Beweis: a) Nach Lemma 4.14 ist die Ableitung von $d_k(x, \tilde{\lambda})$ nach x gegeben durch

$$\frac{d}{dx}d_k(x, \tilde{\lambda}) = 2P'_k(x) \cdot P'_{k-1}(x).$$

Die Ableitung verschwindet genau dann, wenn $P'_k(x) = 0$ oder $P'_{k-1}(x) = 0$ ist. Also kommen als lokale Extrema von d_k nur die Nullstellen von P'_k und P'_{k-1} sowie die Randpunkte -1 und 1 in Frage.

Sei $x = 1$. Nach (B.4) ist $P'_k(1) > 0$, $P'_{k-1}(1) > 0$, also $P'_k(1) \cdot P'_{k-1}(1) > 0$, d.h. d_k hat in $x = 1$ ein lokales Maximum.

Sei $x = -1$. Nach (B.4) ist $P'_k(-1) \cdot P'_{k-1}(-1) < 0$, d.h. d_k hat in $x = -1$ ebenfalls ein lokales Maximum.

Sei $x \in (-1, 1)$ eine Nullstelle von P'_k . Wäre $P''_k(x) = 0$, so müssten wegen (B.10) auch alle weiteren Ableitungen in x verschwinden und P_k wäre konstant. Dies ist aber nicht so, denn P_k ist vom Grad $k \geq 2$. Also gilt $P''_k(x) \neq 0$.

Falls P_k ein lokales Maximum in x hat, dann hat einerseits P'_k einen Vorzeichenwechsel (VZW) von $+$ nach $-$ in x und andererseits ist P_{k-1} streng monoton fallend in x (folgt aus Identität (B.11)). Damit ist $P'_{k-1}(x) < 0$ und $P'_k \cdot P'_{k-1}$ hat einen VZW von $-$ nach $+$ in x .

Falls P_k ein lokales Minimum in x hat, dann hat einerseits P'_k einen VZW von $-$ nach $+$ in x und andererseits ist P_{k-1} streng monoton wachsend in x (folgt aus Identität (B.11)). Damit ist $P'_{k-1}(x) > 0$ und $P'_k \cdot P'_{k-1}$ hat einen VZW von $-$ nach $+$ in x .

In jedem Fall hat d_k ein lokales Minimum in x .

Sei $x \in (-1, 1)$ eine Nullstelle von P'_{k-1} . Analog wie oben folgt wieder $P''_{k-1}(x) \neq 0$.

Falls P_{k-1} ein lokales Maximum in x hat, dann hat einerseits P'_{k-1} einen VZW von $+$ nach $-$ in

x und andererseits ist P_k streng monoton wachsend in x (folgt aus Identität (B.12)). Damit ist $P'_k(x) > 0$ und $P'_k \cdot P'_{k-1}$ hat einen VZW von $+$ nach $-$ in x .

Falls P_{k-1} ein lokales Minimum in x hat, dann hat einerseits P'_{k-1} einen VZW von $-$ nach $+$ in x und andererseits ist P_k streng monoton fallend in x (folgt aus Identität (B.12)). Damit ist $P'_k(x) < 0$ und $P'_k \cdot P'_{k-1}$ hat einen VZW von $+$ nach $-$ in x .

In jedem Fall hat d_k ein lokales Maximum in x .

b) Seien die Hilfsfunktionen $h_{-,k}, h_{+,k}$ definiert durch

$$\begin{aligned} h_{-,k}(x) &:= d_k(x, \tilde{\lambda}) - \frac{1}{k+1} (P'_k(x))^2 (1-x^2), \\ h_{+,k}(x) &:= d_k(x, \tilde{\lambda}) + \frac{1}{k-1} (P'_{k-1}(x))^2 (1-x^2). \end{aligned}$$

Die Funktionen $d_k, h_{-,k}$ und $h_{+,k}$ sind für $k \in \{5, 6\}$ in Abbildung 4.2 zu sehen.

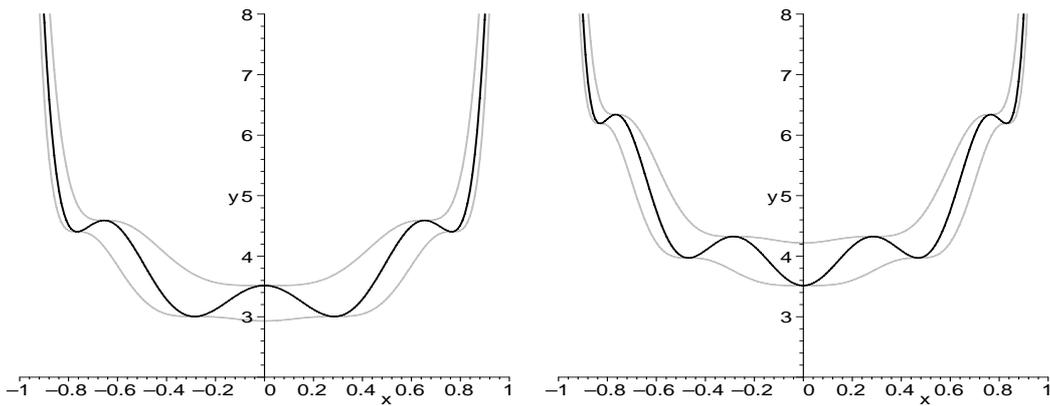


Abbildung 4.2: (A) $d_5(x, \tilde{\lambda})$ (SCHWARZ) UND $h_{-,5}(x), h_{+,5}(x)$ (GRAU) SOWIE (B) $d_6(x, \tilde{\lambda})$ (SCHWARZ) UND $h_{-,6}(x), h_{+,6}(x)$ (GRAU)

Offensichtlich gilt für alle $x \in [-1, 1]$

$$h_{-,k}(x) \leq d_k(x, \tilde{\lambda}) \leq h_{+,k}(x). \quad (4.10)$$

Da $(P'_k(x))^2(1-x^2)$ genau dann verschwindet, wenn $x \in \{-1, 1\}$ oder x eine Nullstelle von P'_k ist, gilt nach a) „ \Leftarrow “ in der linken Ungleichung von (4.10) genau dann, wenn $x \in \{-1, 1\}$ oder x lokales Minimum von d_k ist.

Nun wird die Ableitung von $h_{-,k}$ berechnet:

$$\begin{aligned}
h'_{-,k}(x) &= 2P'_k(x) \cdot P'_{k-1}(x) - \frac{1}{k+1} \frac{d}{dx} (P'_k(x)^2(1-x^2)) \\
&\stackrel{(B.7)}{=} 2P'_k(x) \cdot P'_{k-1}(x) - \frac{1}{k+1} P'_k(x) P''_k(x) (1-x^2) + kP_k(x) P'_k(x) \\
&= \frac{2}{k+1} P'_k(x) \cdot \left((k+1)P'_{k-1}(x) - \frac{1}{2} P''_k(x) (1-x^2) + \frac{k(k+1)}{2} P_k(x) \right) \\
&\stackrel{(B.8)}{=} \frac{2}{k+1} P'_k(x) \cdot \left((k+1)(xP'_k(x) - kP_k(x)) - \frac{1}{2} P''_k(x) (1-x^2) + \frac{k(k+1)}{2} P_k(x) \right) \\
&= \frac{2}{k+1} P'_k(x) \cdot \left((k+1)xP'_k(x) - \frac{k(k+1)}{2} P_k(x) - \frac{1}{2} P''_k(x) (1-x^2) \right) \\
&\stackrel{(B.10)}{=} \frac{2}{k+1} P'_k(x) \cdot kxP'_k(x) \\
&= 2 \frac{k}{k+1} \cdot (P'_k(x))^2 x.
\end{aligned}$$

Die Funktion $h_{-,k}$ ist also monoton fallend auf $[-1, 0]$ und monoton wachsend auf $[0, 1]$, d.h. die Behauptung über die Folge der lokalen Minima folgt.

Da $(P'_{k-1}(x))^2(1-x^2)$ genau dann verschwindet, wenn $x \in \{-1, 1\}$ oder x eine Nullstelle von P'_{k-1} ist, gilt nach a) „ \Leftarrow “ in der rechten Ungleichung von (4.10) genau dann, wenn $x \in \{-1, 1\}$ oder x lokales Maximum von d_k ist.

Analog wie oben berechnen wir die Ableitung von $h_{+,k}$:

$$\begin{aligned}
h'_{+,k}(x) &= 2P'_k(x) \cdot P'_{k-1}(x) + \frac{1}{k-1} \frac{d}{dx} (P'_{k-1}(x)^2(1-x^2)) \\
&\stackrel{(B.7)}{=} 2P'_k(x) \cdot P'_{k-1}(x) + \frac{1}{k-1} P'_{k-1}(x) P''_{k-1}(x) (1-x^2) - kP_{k-1}(x) P'_{k-1}(x) \\
&= \frac{2}{k-1} P'_{k-1}(x) \cdot \left((k-1)P'_k(x) - \frac{1}{2} P''_{k-1}(x) (1-x^2) - \frac{k(k-1)}{2} P_{k-1}(x) \right) \\
&\stackrel{(B.9)}{=} \frac{2}{k-1} P'_{k-1}(x) \\
&\quad \cdot \left((k-1)(xP'_{k-1}(x) + kP_{k-1}(x)) - \frac{1}{2} P''_{k-1}(x) (1-x^2) - \frac{k(k-1)}{2} P_{k-1}(x) \right) \\
&= \frac{2}{k-1} P'_{k-1}(x) \cdot \left((k-1)xP'_{k-1}(x) + \frac{k(k-1)}{2} P_{k-1}(x) - \frac{1}{2} P''_{k-1}(x) (1-x^2) \right) \\
&\stackrel{(B.10)}{=} \frac{2}{k-1} P'_{k-1}(x) \cdot kxP'_{k-1}(x) \\
&= 2 \frac{k}{k-1} \cdot (P'_{k-1}(x))^2 x.
\end{aligned}$$

Die Funktion $h_{+,k}$ ist also monoton fallend auf $[-1, 0]$ und monoton wachsend auf $[0, 1]$, d.h. die Behauptung über die Folge der lokalen Maxima folgt.

c) Die Aussage c) folgt aus Aussage b). □

Satz 4.16 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$.

a) Es existiert ein $\alpha_1 = \alpha_1^{(k)} \in [0, 1)$, so dass für alle $\alpha \in [\alpha_1, 1]$ gilt: ξ ist genau dann D -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, wenn

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}(1 - \alpha)(\delta_{-1} + \delta_1).$$

b) Für eine Folge $\alpha_1^{(k)}$, die a) erfüllt, gilt die Grenzwertaussage

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_1^{(k)} = 1.$$

Wie im Falle der \mathbf{e}_k -Optimalität benötigen wir auch hier, um die Grenzwertaussage in Satz 4.16 b) zu beweisen, ein Lemma, in dem d_k für den in a) angegebenen Versuchsplan berechnet wird.

Lemma 4.17 Sei $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 1$. Für $\alpha \in (0, 1]$ gilt:

$$\begin{aligned} & d_k \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1) \right) \\ &= \frac{1}{\alpha} \left(d_k(x, \tilde{\lambda}) - \frac{(1 - \alpha)(P'_k(x))^2}{\alpha + (1 - \alpha)k(k + 1)/2} - \frac{(1 - \alpha)(P'_{k-1}(x))^2}{\alpha + (1 - \alpha)k(k - 1)/2} \right). \end{aligned}$$

Beweis: Die generelle Beweisidee entspricht dem Beweis von Lemma 4.10 d). Für die D -Optimalität wird der Beweis aber etwas aufwändiger. Sei $f_1(x) := (\dots, x^{k-3}, x^{k-1})^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor}$ und $f_2(x) := (\dots, x^{k-4}, x^{k-2})^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor k/2 \rfloor}$. Weiter seien die folgenden Matrizen und Vektoren definiert durch $M_i(\tilde{\lambda}) := \int_{[-1, 1]} f_i f_i^\top d\tilde{\lambda}$, $i = 1, 2$, und $\mathbf{1}^{(1)} := (1, 1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor}$, $\mathbf{1}^{(2)} := (1, 1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor k/2 \rfloor}$. Dann gilt (ebenso wie in Lemma 4.10 d) unter Verwendung der Sherman-Morrison-Formel, Lancaster und Tismenetsky (1985), Seite 64, Aufgabe 5):

$$\begin{aligned} & d_k \left(x, \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1) \right) \\ &= f(x)^\top M \left(\alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1) \right)^{-1} f(x) \\ &= \sum_{i=1}^2 f_i(x)^\top \left(\alpha M_i(\tilde{\lambda}) + (1 - \alpha) \mathbf{1}^{(i)} \mathbf{1}^{(i)\top} \right)^{-1} f_i(x) \\ &= \sum_{i=1}^2 f_i(x)^\top \left(\frac{1}{\alpha} M_i(\tilde{\lambda})^{-1} - \frac{\frac{1-\alpha}{\alpha^2} M_i(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(i)} \mathbf{1}^{(i)\top} M_i(\tilde{\lambda})^{-1}}{1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \mathbf{1}^{(i)\top} M_i(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(i)}} \right) f_i(x) \\ &= \frac{1}{\alpha} f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} f(x) \\ &\quad - \frac{1-\alpha}{\alpha^2} \sum_{i=1}^2 f_i(x)^\top M_i(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(i)} \left(1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \mathbf{1}^{(i)\top} M_i(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(i)} \right)^{-1} \mathbf{1}^{(i)\top} M_i(\tilde{\lambda})^{-1} f_i(x). \end{aligned}$$

Definiert man

$$\mathbf{v}_1 := \sqrt{v_1}(\dots, 0, 1, 0, 1)^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor (k+1)/2 \rfloor}, \quad \mathbf{v}_2 := \sqrt{v_2}(\dots, 1, 0, 1, 0)^\top \in \mathbb{R}^{\lfloor k/2 \rfloor}$$

mit

$$v_i := \left(1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \mathbf{1}^{(i)\top} M_i(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(i)} \right)^{-1},$$

so hat man die Gleichheit zu

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\alpha} d_k(x, \tilde{\lambda}) - \frac{1-\alpha}{\alpha^2} f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} (\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^\top + \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2^\top) M(\tilde{\lambda})^{-1} f(x) \\ &= \frac{1}{\alpha} d_k(x, \tilde{\lambda}) - \frac{1-\alpha}{\alpha^2} \sum_{i=1}^2 (f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{v}_i)^2. \end{aligned}$$

Wir haben mit Lemma 4.10 c)

$$\begin{aligned} f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{v}_1 &= \frac{\sqrt{v_1}}{2} f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} (\mathbf{1}_k + (-1)^{k-1} (1, -1, 1, -1, \dots)^\top) \\ &= \frac{\sqrt{v_1}}{2} (d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) + (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda})) = \sqrt{v_1} P'_k(x), \\ f(x)^\top M(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{v}_2 &= \frac{\sqrt{v_2}}{2} (d_k(x, 1, \tilde{\lambda}) - (-1)^{k-1} d_k(x, -1, \tilde{\lambda})) = \sqrt{v_2} P'_{k-1}(x). \end{aligned}$$

Im Beweis von Lemma 4.10 d) wurde gezeigt, dass

$$\mathbf{1}^{(1)\top} M_1(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(1)} = \frac{k(k+1)}{2}.$$

Analog kann man nachrechnen:

$$\mathbf{1}^{(2)\top} M_2(\tilde{\lambda})^{-1} \mathbf{1}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(d_k(1, 1, \tilde{\lambda}) - (-1)^{k-1} d_k(1, -1, \tilde{\lambda}) \right) = P'_{k-1}(1) = \frac{k(k-1)}{2}.$$

Zusammenfassend ist die Behauptung gezeigt. \square

Beweis von Satz 4.16: a) Wie bei Satz 4.9 a) folgt aus der starken Konvergenz $\xi_\alpha = \alpha \tilde{\lambda} + (1-\alpha) \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_1) \xrightarrow{s^k} \tilde{\lambda}$ für $\alpha \rightarrow 1$ die gleichmäßige Konvergenz von $d_k(x, \xi_\alpha)$ gegen $d_k(x, \tilde{\lambda})$, denn nach Satz 2.4 ist die Abbildung $\Xi \rightarrow C[\mathcal{E}], \xi \mapsto d_k(x, \xi)$ stetig.

Analog wie im Beweis von Satz 4.9 a) können wir wegen Lemma 4.15 einen ϵ -Schlauch um $d_k(x, \tilde{\lambda})$ legen, in dem $d_k(x, \xi_\alpha)$ liegt, falls α nahe genug bei 1 ist. So können wir nachweisen, dass für α nahe bei 1 die einzigen globalen Maxima bei $x = \pm 1$ liegen.

b) Aus Lemma 4.17 folgt:

$$\begin{aligned} d_k(1, \xi_\alpha) &= \frac{1}{\alpha} \left(k^2 - \left(\frac{(1-\alpha)k^2(k+1)^2/4}{\alpha + (1-\alpha)k(k+1)/2} + \frac{(1-\alpha)k^2(k-1)^2/4}{\alpha + (1-\alpha)k(k-1)/2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\alpha k(k+1)/2}{\alpha + (1-\alpha)k(k+1)/2} + \frac{\alpha k(k-1)/2}{\alpha + (1-\alpha)k(k-1)/2} \right) \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \left(2 - \frac{\alpha}{\alpha + (1-\alpha)k(k+1)/2} - \frac{\alpha}{\alpha + (1-\alpha)k(k-1)/2} \right) \leq \frac{2}{1-\alpha}. \end{aligned}$$

Also folgt für $k > \frac{2}{1-\alpha}$ mit Satz 2.23 (Kiefer und Wolfowitz)

$$d_k(1, \xi_\alpha) \leq \frac{2}{1-\alpha} < k = \max_{x \in [-1, 1]} d_k(x, \xi^*) \leq \max_{x \in [-1, 1]} d_k(x, \xi_\alpha),$$

wobei ξ^* der D -/ G -optimale Versuchsplan in Ξ für Polynomregression $k - 1$ -ten Grades ist. Nach Korollar 3.22 ist also ξ_α nicht D -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ für Polynomregression vom $k - 1$ -ten Grad, falls $k > \frac{2}{1-\alpha}$. \square

Für $k = 2$ (Geradenregression) können wir wie schon im Falle der \mathbf{e}_2 -Optimalität leicht zeigen, dass $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + (1-\alpha)\frac{1}{2}(\delta_{-1} + \delta_1)$ der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ ist, $\alpha \in [0, 1]$. Im nachfolgenden Beispiel betrachten wir $k = 3$.

Beispiel 4.18 (Quadratische Regression) *Wir betrachten nun speziell Polynomregression mit $k = 3$, also quadratische Regression. Sei ξ der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \infty]$.*

$$d_k(x, \xi) = f(x)^\top M(\xi)^{-1} f(x)$$

ist Polynom vom 4. Grade und wegen $d_k(x, \xi) \geq 0$ folgt $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} d_k(x, \xi) = +\infty$. ξ kann als ein um 0 symmetrischer Versuchsplan betrachtet werden (siehe Bemerkung 3.11), daher ist $d_k(x, \xi)$ achsensymmetrisch um 0. ξ hat daher höchstens zwei lokale Minima und höchstens ein lokales Maximum, das (sofern es existiert) nur für $x = 0$ angenommen werden kann. Folglich hat ξ die Gestalt

$$\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_0\delta_{-1} + (1 - \alpha - 2p_0)\delta_0 + p_0\delta_1 \quad \text{mit } p_0 \in \left[0, \frac{1-\alpha}{2}\right].$$

Den noch verbleibenden Parameter p_0 bestimmen wir über das Maximieren der Determinante. Mit

$$\begin{aligned} m_2 &= \int_{-1}^1 x^2 \xi(dx) = \frac{\alpha}{3} + 2p_0, \\ m_4 &= \int_{-1}^1 x^4 \xi(dx) = \frac{\alpha}{5} + 2p_0 \end{aligned}$$

gilt

$$\det(M(\xi)) = m_2(m_4 - m_2^2) = -8p_0^3 + 4(1-\alpha)p_0^2 + \frac{2}{15}\alpha(8-5\alpha)p_0 + \frac{\alpha^2}{15} - \frac{\alpha^3}{27}.$$

Die Ableitung nach p_0 ist

$$-24p_0^2 + 8(1-\alpha)p_0 - \frac{2}{15}\alpha(8-5\alpha)$$

und diese Ableitung verschwindet, falls

$$p_0 \in \left\{ \frac{1-\alpha}{6} + \frac{\sqrt{25-10\alpha}}{30}, \frac{1-\alpha}{6} - \frac{\sqrt{25-10\alpha}}{30} \right\}.$$

Wie man leicht nachrechnen kann, ist die zweite Ableitung im ersten der obigen Werte für jedes $\alpha \in [0, 1]$ negativ, für den zweiten der obigen Werte für jedes α positiv. Weiter ist der erste Wert positiv, der zweite Wert nichtpositiv. Damit ist

$$p_0 = \min \left\{ \frac{1-\alpha}{6} + \frac{\sqrt{25-10\alpha}}{30}, \frac{1-\alpha}{2} \right\}$$

die Maximalstelle von $p_0 \mapsto \det(M(\xi))$ auf $[0, (1-\alpha)/2]$. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{1-\alpha}{6} + \frac{\sqrt{25-10\alpha}}{30} &\leq \frac{1-\alpha}{2} \\ \iff \sqrt{25-10\alpha} &\leq 10(1-\alpha) \\ \iff 0 &\leq 100\alpha^2 - 190\alpha + 75 \\ \iff_{\alpha \in [0,1]} \alpha &\leq \frac{19}{20} - \sqrt{\frac{361}{400} - \frac{3}{4}} = \frac{19-\sqrt{61}}{20} \approx 0.5595. \end{aligned}$$

Damit folgt: Der einzige Versuchsplan, der D-optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ für die quadratische Regression ist, ist $\alpha\tilde{\lambda} + p_0\delta_{-1} + (1-\alpha-2p_0)\delta_0 + p_0\delta_1$ mit

$$p_0 = \begin{cases} \frac{1-\alpha}{6} + \frac{\sqrt{25-10\alpha}}{30}, & \alpha \leq \frac{19-\sqrt{61}}{20}, \\ \frac{1-\alpha}{2}, & \alpha > \frac{19-\sqrt{61}}{20}. \end{cases}$$

Das $\alpha_1^{(3)}$ aus Satz 4.16 ist $\frac{19-\sqrt{61}}{20} \approx 0.5595$.

Beispiel 4.19 (Kubische Regression) Wir betrachten nun speziell Polynomregression mit $k = 4$, also kubische Regression. Mit analogen Argumenten wie bei der quadratischen Regression zeigt man, dass der D-optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ die Gestalt

$$\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_0(\delta_{-1} + \delta_1) + \left(\frac{1-\alpha}{2} - p_0 \right) (\delta_{-t_0} + \delta_{t_0}) \quad \text{mit } p_0 \in \left[0, \frac{1-\alpha}{2} \right], \quad t_0 \in [0, 1]$$

hat. Die beiden Parameter p_0 und t_0 kann man grundsätzlich wieder über das Maximieren der Determinante bestimmen. Allerdings ist die explizite Lösung für allgemeines α kaum durchführbar. Kein Problem ist dagegen, für konkrete Werte von α die Ableitungen von $(p_0, t_0) \mapsto \det(M(\xi))$ nach p_0 und t_0 zu bestimmen, die beiden Terme Null zu setzen und das Gleichungssystem numerisch z.B. mit MAPLE zu lösen. Durch die anschließende Berechnung und grafische Darstellung von $d(x, \xi) = d(x, \xi(p_0, t_0))$ kann man optisch überprüfen, ob es sich bei dem berechneten Punkt wirklich um die (globale) Maximumstelle des Optimierungsproblems handelt. Wenn wir im Inneren von $[0, \frac{1-\alpha}{2}] \times [0, 1)$ keine Maximumstelle finden, müssen noch die Ränder betrachtet werden. Der Rand, der in diesem Falle eine Rolle spielt, ist $p_0 = 0$, d.h. die Betrachtung von

$$\xi = \alpha\tilde{\lambda} + \frac{1-\alpha}{2}(\delta_{-1} + \delta_1).$$

α	t_0	$\frac{1-\alpha}{2} - p_0$	p_0
0	0.447	0.25	0.25
0.1	0.4509	0.2108	0.2392
0.2	0.4553	0.1716	0.2284
0.3	0.4604	0.1327	0.2173
0.4	0.4664	0.0939	0.2061
0.5	0.4732	0.0555	0.1945
0.6	0.4808	0.0175	0.1825
0.7	-	0	0.15
0.8	-	0	0.1
0.9	-	0	0.05

Tabelle 4.3: MASSEPUNKTE UND MASSES DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPANS ξ IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ FÜR KUBISCHE REGRESSION MIT $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_0(\delta_{-1} + \delta_1) + (\frac{1-\alpha}{2} - p_0)(\delta_{-t_0} + \delta_{t_0})$

Auf diese Weise wurden für $\alpha = 0, 0.1, 0.2, \dots, 0.9$ die D -optimalen Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ numerisch berechnet und in Tabelle 4.3 angegeben. Der Wert $\alpha_1^{(4)}$, ab dem $p_0 = 0$ ist, ist numerisch 0.6464. In Abbildung 4.3 ist $d(x, \xi)$ für $\alpha = 0.5, 0.9$ zu sehen. Abbildung 4.4 stellt die Massepunkte und Gewichte des D -optimalen Versuchspans in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ in Abhängigkeit von α dar.

Numerische Werte für das kleinstmögliche $\alpha_1 = \alpha_1^{(k)}$ für $k = 2, 3, 4, 5$ sind in Tabelle 4.4 angegeben.

k	2	3	4	5	∞
$\alpha_1^{(k)}$	0	0.5595	0.6464	0.7272	1

Tabelle 4.4: NUMERISCHE WERTE FÜR DIE KLEINSTMÖGLICHEN $\alpha_1^{(k)}$ AUS SATZ 4.16 FÜR DIE D -OPTIMALITÄT IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ IM MODELL $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$

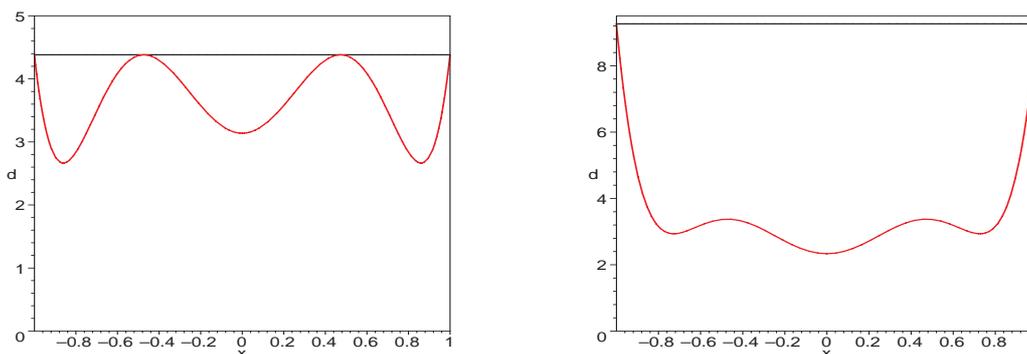


Abbildung 4.3: KUBISCHE REGRESSION: FUNKTION $d(x, \xi^*)$ (ROT) UND $\max_{t \in [-1, 1]} d(t, \xi^*)$ (SCHWARZ) DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPLANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ FÜR $\alpha = 0.5$ (LINKS), $\alpha = 0.9$ (RECHTS)

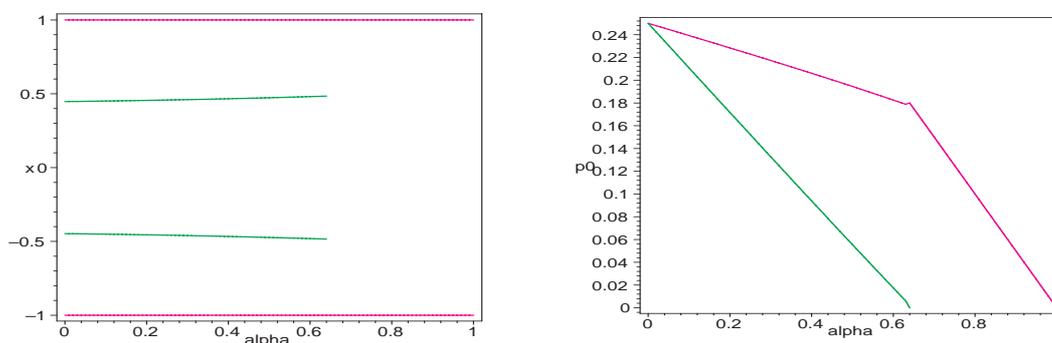


Abbildung 4.4: KUBISCHE REGRESSION: IN DER LINKEN ABBILDUNG MASSEPUNKTE $-1, 1$ (MAGENTA) UND $-t_0, t_0$ (GRÜN) UND IN DER RECHTEN ABBILDUNG GEWICHTE p_0 (MAGENTA), $\frac{1-\alpha}{2} - p_0$ (GRÜN) DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPLANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ ALS FUNKTION VON α

4.4 Optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ mit $a = \alpha$, $b = \beta$ konstant

Wir betrachten auch hier konstante Grenzfunktionen a und $b : [-1, 1] \rightarrow [0, \infty)$, also $a = \alpha \in [0, 1], b = \beta \in [1, \infty)$.

Für beliebige $(\alpha, \beta) \in [0, 1] \times [1, \infty)$ kann man die Gestalt von \mathbf{e}_k - und D -optimalen Versuchsplänen angeben. Der nachfolgende Satz stellt eine Verallgemeinerung einer Aussage von Wynn (1982) dar, der eine entsprechende Aussage für den Fall $\alpha = 0$ und die D -Optimalität gemacht hat.

Satz 4.20 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top, k \geq 2$ und seien $0 \leq \alpha < 1 < \beta < \infty$ beliebig. Dann existieren Konstanten $0 = c_0 < c_1 < \dots < c_m \leq 1$, so dass sowohl der \mathbf{e}_k -optimale als auch der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ die Gestalt

$$\xi = \beta \tilde{\lambda} - (\beta - \alpha) \mathbf{1}_A \cdot \tilde{\lambda} \quad (4.11)$$

hat mit

$$A = \bigcup_{i=0}^{\lfloor (m-1)/2 \rfloor} ((c_{m-2i-1}, c_{m-2i}) \cup (-c_{m-2i}, -c_{m-2i-1}))$$

für ein $m \in \{1, 2, \dots, k-1\}$.

Bemerkung 4.21 Nimmt man für gerades k den Punkt 0 zur Menge A aus Satz 4.20 hinzu (was den Versuchsplan ξ nicht ändert), so ist A die Vereinigung aus genau m disjunkten offenen Intervallen. Beim Versuchsplan ξ in (4.11) wechseln sich also $m+1$ Intervalle ab, auf denen ξ die maximale Masse β hat, und m Intervalle, auf denen ξ die minimale Masse α hat.

Beweis von Satz 4.20: Zunächst argumentieren wir für die D -Optimalität. Da $x \mapsto d(x, \xi)$ ein Polynom vom Grade $2(k-1)$ ist, das für $x \rightarrow \pm\infty$ gegen $+\infty$ strebt, folgt dass dieses Polynom höchstens $k-1$ lokale Minima auf \mathcal{E} hat. Mit Korollar 3.22 folgt, dass ein D -optimaler Versuchsplan auf höchstens $k-1$ Intervallen mit $\alpha\tilde{\lambda}$ und auf den dazwischen liegenden Intervallen mit $\beta\tilde{\lambda}$ übereinstimmt. Aus Symmetriegründen (siehe Bemerkung 3.11) hat er die Gestalt (4.11).

Für die \mathbf{e}_k -Optimalität beachte man, dass

$$\left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} f_k \right) (y)$$

ein Polynom vom Grad $k-2$ ist. Daher können wir für das Quadrat dieses Polynoms die gleiche Argumentation wie oben führen, nur dass wir statt Korollar 3.22 das Korollar 3.20 benutzen. \square

Bei der Frage, wieviele Intervalle mit maximaler und minimaler Masse sich abwechseln, betrachten wir „Randfälle“. Die Randfälle $\Upsilon[\alpha, 1] = \Upsilon[1, \beta] = \{\tilde{\lambda}\}$ können Aufschluss darüber geben, wie die optimalen Versuchspläne in der Nähe dieser Randfälle aussehen. Hierbei spielt Satz 2.4 wieder eine entscheidende Rolle: Haben wir beispielsweise eine Folge $\beta_n \rightarrow 1$ und eine beliebige Folge $\xi_n \in \Upsilon[\alpha, \beta_n]$ mit $\xi_n \xrightarrow{st} \tilde{\lambda}$, so gilt auch $d(x, \xi_n) \rightarrow d(x, \tilde{\lambda})$ und $c(x, \xi_n) \rightarrow c(x, \tilde{\lambda})$ gleichmäßig. Korollar 3.22 bzw. Korollar 3.20 gibt dann Aufschluss über den optimalen Versuchsplan für β in der Nähe von 1.

Die Menge $\Upsilon[\alpha, 1 + \epsilon]$, ϵ klein, wird in Satz 4.22 betrachtet, $\Upsilon[1 - \epsilon, \beta]$, ϵ klein, in Satz 4.23.

Satz 4.22 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$, und $\alpha \in [0, 1]$ beliebig. Dann gilt:

- a) Es existiert ein $\beta_1 > 1$, so dass für alle $\beta \in [1, \beta_1]$ der \mathbf{e}_k -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ die Darstellung (4.11) mit $m = k-1$ hat.

b) Es existiert ein $\beta_1 > 1$, so dass für alle $\beta \in [1, \beta_1]$ der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ die Darstellung (4.11) mit

$$m = \begin{cases} 1, & \text{falls } k \text{ gerade,} \\ 2, & \text{falls } k \text{ ungerade} \end{cases}$$

hat. Insbesondere gilt für k ungerade: Für alle $\beta \in [1, \beta_1]$ hat der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ die Darstellung

$$\beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{(-\gamma, \gamma)} \cdot \tilde{\lambda}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{\beta-\alpha}$.

Beweis: a) Nach Lemma 4.10 a) gilt $c_k(x, \tilde{\lambda}) = \text{const} \cdot P_{k-1}(x)$. Das Polynom $c_k(x, \tilde{\lambda})$ vom Grad $k - 1$ hat genau $k - 1$ voneinander verschiedene Nullstellen (Lemma B.2 f)). Damit hat auch jedes $c_k(x, \xi)$ mit $\xi \in \Xi$ aus einer Umgebung von $\tilde{\lambda}$ genau $k - 1$ voneinander verschiedene Nullstellen. Nach Korollar 3.20 hat der \mathbf{e}_k -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ daher auf genau $k - 1$ Intervallen minimale Masse.

b) Nach Lemma 4.15 c) hat $d_k(x, \tilde{\lambda})$ genau eine globale Minimumstelle bei $x = 0$, falls k gerade ist und genau zwei verschiedene (symmetrisch um 0 liegende) globale Minimumstellen bei den betragsmäßig kleinsten Nullstellen von P'_k . Für jeden um 0 symmetrischen Versuchsplan ξ aus einer Umgebung von $\tilde{\lambda}$ hat $d_k(x, \xi)$ jeweils dieselbe Zahl von globalen Minima. Da der optimale Versuchsplan symmetrisch um 0 sein muss, folgt die Behauptung. \square

Satz 4.23 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, \dots, x^{k-1})^\top$, $k \geq 2$, und $\beta \in [0, 1]$ beliebig. Dann gilt: Es existiert ein $\alpha_1 < 1$, so dass für alle $\alpha \in [\alpha_1, 1]$ sowohl der \mathbf{e}_k - als auch der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ die Darstellung

$$\beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{(-\gamma, \gamma)} \cdot \tilde{\lambda}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{\beta-\alpha}$ hat.

Beweis: Nach der Ungleichung in (B.3) bzw. nach Lemma 4.15 c) hat $c_k(x, \tilde{\lambda})^2$ bzw. $d_k(x, \tilde{\lambda})$ genau zwei globale Maxima an den Stelle $x = \pm 1$. Daher gilt dies auch für $c_k(x, \xi)^2$ und $d_k(x, \xi)$ mit ξ aus einer Umgebung von $\tilde{\lambda}$. Mit Korollar 3.22 bzw. Korollar 3.20 folgt die Behauptung. \square

Für Geradenregression ($k = 2$) und quadratische Regression ($k = 3$) geben wir in den folgenden Sätzen die \mathbf{e}_k - und D -optimalen Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ an.

Satz 4.24 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x)^\top$, ($k = 2$), $0 \leq \alpha < 1 < \beta < \infty$. Sowohl der \mathbf{e}_k - als auch der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ ist gegeben durch

$$\xi = \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\tilde{\lambda} \cdot \mathbf{1}_{(-\gamma, \gamma)} \quad (4.12)$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{\beta-\alpha}$.

Beweis: Dass der optimale Versuchsplan die Gestalt (4.12) hat, folgt direkt aus Satz 4.20 (dort muss $m = 1$ sein). Dabei muss $\gamma = \frac{\beta-1}{\beta-\alpha}$ gewählt werden, damit ξ ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist ($\int 1 d\xi = 1$). \square

Satz 4.25 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, x^2)^\top$, ($k = 3$), $0 \leq \alpha < 1 < \beta < \infty$.

a) Der \mathbf{e}_k -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ ist gegeben durch

$$\xi = \begin{cases} \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{(-c-\gamma, -c+\gamma) \cup (c-\gamma, c+\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}, & \text{falls } \alpha < \underbrace{\beta - (\beta - 1)\sqrt{1 + \frac{1}{2\beta}}}_{\in(3/4, 1)}, \\ \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{(-2\gamma, 2\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{2(\beta-\alpha)}$ und

$$c = \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{(\beta-1)^2(\beta+2)}{12\beta(\beta-\alpha)^2}}.$$

b) Der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ ist gegeben durch

$$\xi = \begin{cases} \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{(-c-\gamma, -c+\gamma) \cup (c-\gamma, c+\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}, & \text{falls } \alpha < \underbrace{\beta - (\beta - 1)\sqrt{1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}}}_{\in((19-\sqrt{61})/20, 1)}, \\ \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{(-2\gamma, 2\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{2(\beta-\alpha)}$ und

$$c = \frac{1}{\beta - \alpha} \left(\frac{1}{180\beta(\beta - 1)} \left(45\beta^4 - 120\beta^3\alpha - 15\beta^3 + 60\beta^2\alpha^2 + 80\beta^2\alpha + 15\beta^2 - 40\beta\alpha^2 - 45\beta + 20 - 4 \left(-90\beta^6\alpha + 225\beta^6 + 285\beta^5\alpha^2 - 510\beta^5\alpha - 450\beta^5 - 240\beta^4\alpha^3 + 115\beta^4\alpha^2 + 1050\beta^4\alpha + 450\beta^4 + 60\beta^3\alpha^4 + 140\beta^3\alpha^3 - 525\beta^3\alpha^2 - 750\beta^3\alpha - 375\beta^3 - 35\beta^2\alpha^4 + 375\beta^2\alpha^2 + 200\beta^2\alpha + 285\beta^2 - 100\beta\alpha^2 - 135\beta + 25 \right)^{1/2} \right) \right)^{1/2}.$$

Beweis: a) Der optimale Versuchsplan muss symmetrisch um 0 sein. Nach Bemerkung 2.37 gilt

$$\left(\text{pr}_{[f_1, \dots, f_{k-1}]^\perp}^{L^2(\xi)} \right) (y) = (-m_2, 0, 1)f(y) = y^2 - m_2$$

mit $m_2 := \int_{\mathcal{E}} x^2 \xi(dx)$. Aus Korollar 3.20 folgt, dass der optimale Versuchsplan die Gestalt

$$\xi = \xi_c = \beta \tilde{\lambda} - (\beta - \alpha) \mathbf{1}_{(-c-\gamma, -c+\gamma) \cup (c-\gamma, c+\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}, \quad c \in [\gamma, 1 - \gamma],$$

haben muss. Damit ξ_c ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist, muss $\gamma = \frac{\beta-1}{2(\beta-\alpha)}$ gelten. Es bleibt also noch c zu bestimmen. Für m_2 gilt

$$m_2 = \int_{\mathcal{E}} x^2 \xi(dx) = \frac{\beta}{3} - \frac{\beta - \alpha}{3} ((c + \gamma)^3 - (c - \gamma)^3).$$

Nach Korollar 3.20 ist ξ_c , $c \in [\gamma, 1 - \gamma]$, optimal, wenn $-\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_c)} x^2 \right) |_{x=c-\gamma} = \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} x^2 \right) |_{x=c+\gamma}$ ist, bzw. ξ_c für $c = \gamma$ ist optimal, wenn $\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_c)} x^2 \right) |_{x=0} \leq \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} x^2 \right) |_{x=2\gamma}$ ist. Es gilt

$$\begin{aligned} & - \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} x^2 \right) |_{x=c-\gamma} = \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} x^2 \right) |_{x=c+\gamma} \\ \iff & -(c - \gamma)^2 + m_2 = (c + \gamma)^2 - m_2 \\ \iff & m_2 = c^2 + \gamma^2 \\ \iff & \frac{\beta}{3} - \frac{\beta - \alpha}{3} (6c^2\gamma + 2\gamma^3) = c^2 + \gamma^2 \\ \iff & \frac{\beta}{3} - \frac{\beta - \alpha}{3} 2\gamma^3 - \gamma^2 = c^2 \underbrace{(1 + 2(\beta - \alpha)\gamma)}_{=\beta} \\ \iff & \frac{1}{3} - \frac{2(\beta - \alpha)}{3\beta} \gamma^3 - \frac{\gamma^2}{\beta} = c^2 \\ \iff & \frac{1}{3} - \frac{(\beta - 1)^2(\beta + 2)}{12\beta(\beta - \alpha)^2} = c^2 \\ \iff & \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{(\beta - 1)^2(\beta + 2)}{12\beta(\beta - \alpha)^2}} = c. \end{aligned} \tag{4.13}$$

Wir zeigen zunächst, dass stets $c \leq 1 - \gamma$ gilt:

$$\begin{aligned} c \leq 1 - \gamma & \iff \frac{1}{3} - \frac{(\beta - 1)^2(\beta + 2)}{12\beta(\beta - \alpha)^2} \leq 1 - \frac{\beta - 1}{\beta - \alpha} + \frac{(\beta - 1)^2}{4(\beta - \alpha)^2} \\ & \iff 0 \leq \frac{8\beta(\beta - \alpha)^2 - 12\beta(\beta - \alpha)(\beta - 1) + (4\beta + 2)(\beta - 1)^2}{12\beta(\beta - \alpha)^2} \\ & \iff 0 \leq 6\beta^2 - 4\alpha\beta^2 + 8\alpha^2\beta - 12\alpha\beta + 2 =: g_\alpha(\beta). \end{aligned}$$

Das Polynom $g_\alpha(\beta)$ vom Grade 2 wird minimal, falls $g'_\alpha(\beta) = 0$, also $12\beta - 8\alpha\beta + 8\alpha^2 - 12\alpha = 0 \iff \beta = \alpha$. Daher

$$0 \leq (1 - \alpha)^2(4\alpha + 2) = 4\alpha^3 - 6\alpha^2 + 2 \quad \Rightarrow \quad 0 \leq g_\alpha(\beta) \quad \Rightarrow \quad c \leq 1 - \gamma.$$

Falls $c > \gamma$, so ist ξ_c optimal. Falls $c \leq \gamma$, so folgt mit analogen Umformungen wie bei (4.13):

$$\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{(\beta-1)^2(\beta+2)}{12\beta(\beta-\alpha)^2}} \leq \gamma \implies -(-m_2, 0, 1)f(0) \leq (-m_2, 0, 1)f(2\gamma)$$

und ξ_γ ist optimal.

Nun untersuchen wir, wann der Fall $c < \gamma$ eintritt:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{(\beta-1)^2(\beta+2)}{12\beta(\beta-\alpha)^2}} < \gamma &\iff \frac{1}{3} < \frac{(\beta-1)^2(4\beta+2)}{12\beta(\beta-\alpha)^2} \\ &\iff (\beta-\alpha)^2 < \frac{(\beta-1)^2(4\beta+2)}{4\beta} = (\beta-1)^2 \left(1 + \frac{1}{2\beta}\right) \\ &\iff \alpha > \beta - (\beta-1)\sqrt{1 + \frac{1}{2\beta}} =: g(\beta). \end{aligned}$$

Die Funktion $g(\beta)$ ist streng monoton fallend auf $[1, \infty)$, denn $g'(\beta) = 1 - \sqrt{1 + 1/(2\beta)} + (\beta - 1)/(8\beta^2 \sqrt{1 + 1/(2\beta)}) < 0$ wegen

$$\underbrace{\sqrt{1 + 1/(2\beta)} - (1 + 1/(4\beta))}_{<0} \underbrace{- 1/(4\beta) + 1/(8\beta) - 1/(8\beta^2)}_{<0} < 0.$$

Weiter gilt

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} g(\beta) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta^2 - (\beta-1)^2(1 + \frac{1}{2\beta})}{\beta + (\beta-1)\sqrt{1 + 1/(2\beta)}} = \frac{3}{4}.$$

Also $g(\beta) \in (3/4, 1)$ für $\beta \in (1, \infty)$.

b) Da $x \mapsto f(x)^\top M^{-1} f(x)$ ein um 0 symmetrisches Polynom von viertem Grade ist das für $x \rightarrow \pm\infty$ gegen $+\infty$ strebt, folgt mit Korollar 3.22, dass der D -optimale Versuchsplan die Gestalt

$$\xi = \xi_c = \beta \tilde{\lambda} - (\beta - \alpha) \mathbf{1}_{(-c-\gamma, -c+\gamma) \cup (c-\gamma, c+\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}, \quad c \in [\gamma, 1 - \gamma],$$

haben muss mit $\gamma = \frac{\beta-1}{2(\beta-\alpha)}$. Wir müssen also auch hier nur noch c bestimmen.

Seien

$$\begin{aligned} m_2 &:= \int_{[-1,1]} x^2 \xi(dx) = \frac{\beta}{3} - \frac{\beta-\alpha}{3}((c+\gamma)^3 - (c-\gamma)^3) = \frac{\beta}{3} - \frac{\beta-\alpha}{3}(6c^2\gamma + 2\gamma^3) \\ m_4 &:= \int_{[-1,1]} x^4 \xi(dx) = \frac{\beta}{5} - \frac{\beta-\alpha}{5}((c+\gamma)^5 - (c-\gamma)^5) = \frac{\beta}{5} - \frac{\beta-\alpha}{5}(10c^4\gamma + 20c^2\gamma^3 + 2\gamma^5). \end{aligned}$$

Es gilt

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & m_2 \\ 0 & m_2 & 0 \\ m_2 & 0 & m_4 \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \frac{1}{(m_4 - m_2^2)m_2} \begin{pmatrix} m_2 m_4 & 0 & -m_2^2 \\ 0 & m_4 - m_2^2 & 0 \\ -m_2^2 & 0 & m_2 \end{pmatrix}.$$

Nach Korollar 3.22 ist $\xi_c, c \in [\gamma, 1 - \gamma]$, optimal, wenn

$$f(c - \gamma)^\top M^{-1} f(c - \gamma) = f(c + \gamma)^\top M^{-1} f(c + \gamma) \quad (4.14)$$

ist, bzw. ξ_γ ist optimal, wenn

$$f(0)^\top M^{-1} f(0) \leq f(2\gamma)^\top M^{-1} f(2\gamma) \quad (4.15)$$

ist.

Wir beginnen mit der Untersuchung des zweiten Falles in dem gilt $m_2 = \frac{\beta}{3} - \frac{(\beta-1)^3}{3(\beta-\alpha)^2}$ und $m_4 = \frac{\beta}{5} - \frac{(\beta-1)^5}{5(\beta-\alpha)^4}$.

$$(4.15) \iff 0 \leq m_4 - 3m_2^2 + 4m_2\gamma^2 \\ \iff 0 \leq \frac{\beta}{5} - \frac{(\beta-1)^5}{5(\beta-\alpha)^4} - \frac{\beta^2}{3} + \frac{2\beta(\beta-1)^3}{3(\beta-\alpha)^2} - \frac{(\beta-1)^6}{3(\beta-\alpha)^4} + \frac{\beta(\beta-1)^2}{3(\beta-\alpha)^2} - \frac{(\beta-1)^5}{3(\beta-\alpha)^4}.$$

Mit $\rho := (\beta - \alpha)^2$ und Multiplikation mit ρ^2 ist dies äquivalent zu

$$0 \leq \rho^2 \left(\frac{\beta}{5} - \frac{\beta^2}{3} \right) + \rho \frac{2\beta(\beta-1)^3 + \beta(\beta-1)^2}{3} - \frac{(\beta-1)^5}{5} - \frac{(\beta-1)^6 + (\beta-1)^5}{3} \\ \iff 0 \geq \rho^2 - \rho \frac{5(\beta-1)^2(2\beta-1)}{(5\beta-3)} + \frac{3(\beta-1)^5}{\beta(5\beta-3)} + \frac{5(\beta-1)^5}{(5\beta-3)} \\ \iff \rho \in \left[\frac{5(\beta-1)^2(2\beta-1)}{2(5\beta-3)} - \sqrt{W}, \frac{5(\beta-1)^2(2\beta-1)}{2(5\beta-3)} + \sqrt{W} \right]$$

mit

$$W = \frac{(\beta-1)^4}{(5\beta-3)^2} \left(\frac{25}{4}(2\beta-1)^2 - \frac{3}{\beta}(\beta-1)(5\beta-3) - 5(\beta-1)(5\beta-3) \right) \\ = \frac{(\beta-1)^4}{(5\beta-3)^2} \left(25\beta^2 - 25\beta + \frac{25}{4} - \frac{15\beta^2 - 24\beta + 9}{\beta} - 25\beta^2 + 40\beta - 15 \right) \\ = \frac{(\beta-1)^4}{(5\beta-3)^2} \left(\frac{61}{4} - \frac{9}{\beta} \right).$$

Man sieht schnell, dass für alle $\beta \geq 1$:

$$(\beta-1)^2 \geq \frac{(\beta-1)^2}{5\beta-3} \left(\frac{5(2\beta-1)}{2} - \sqrt{\frac{61}{4} - \frac{9}{\beta}} \right)$$

und folglich auch

$$\rho = (\beta-\alpha)^2 \geq \frac{(\beta-1)^2}{5\beta-3} \left(\frac{5(2\beta-1)}{2} - \sqrt{\frac{61}{4} - \frac{9}{\beta}} \right) = \frac{5(\beta-1)^2(2\beta-1)}{2(5\beta-3)} - \sqrt{W}.$$

Damit hat man

$$(4.15) \iff \rho = (\beta-\alpha)^2 \leq \frac{(\beta-1)^2}{(5\beta-3)} \left(\frac{5(2\beta-1)}{2} + \sqrt{\frac{61}{4} - \frac{9}{\beta}} \right) \\ \iff \alpha \geq \beta - \frac{\beta-1}{\sqrt{5\beta-3}} \sqrt{\frac{5(2\beta-1)}{2} + \sqrt{\frac{61}{4} - \frac{9}{\beta}}} \\ \iff \alpha \geq \beta - (\beta-1) \sqrt{1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}} =: h(\beta).$$

Die Funktion $h(\beta)$ ist streng monoton fallend auf $[1, \infty)$, denn $h'(\beta) < 0$ weil $h'(\beta) \sqrt{1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}}$ gegeben ist durch

$$\begin{aligned}
& \sqrt{1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}} - \left(1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}\right) \\
& + \underbrace{\frac{\beta - 1}{2(10\beta - 6)^2}}_{\geq 0} \left(\frac{18(10\beta - 6)}{\beta^2 \sqrt{61 - 36/\beta}} - \underbrace{10(1 + \sqrt{61 - 36/\beta})}_{< 0} \right) \\
& \leq \underbrace{\sqrt{1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}} - \left(1 + \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6}\right)}_{\leq 0} \\
& - \frac{1}{2} \frac{1 + \sqrt{61 - 36/\beta}}{10\beta - 6} + \frac{18(\beta - 1)}{2(10\beta - 6)\beta^2 \sqrt{61 - 36/\beta}} \\
& \leq \frac{1}{2(10\beta - 6)\sqrt{61 - 36/\beta}} \left(-\sqrt{61 - 36/\beta} - \underbrace{(61 - 36/\beta)}_{\geq 25} + \underbrace{\frac{18(\beta - 1)}{\beta^2}}_{\leq 18} \right) < 0.
\end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned}
& \lim_{\beta \rightarrow \infty} h(\beta) \\
& = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta^2 - (\beta - 1)^2(1 + (1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6))}{\beta + (\beta - 1)\sqrt{1 + (1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6)}} \\
& = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{2\beta - 1 - \beta^2(1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6) + (2\beta - 1)(1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6)}{\beta + (\beta - 1)\sqrt{1 + (1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6)}} \\
& = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{2\beta - 1 - \beta(1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/10 + (-3/5\beta + 2\beta - 1)(1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6)}{\beta + (\beta - 1)\sqrt{1 + (1 + \sqrt{61 - 36/\beta})/(10\beta - 6)}} \\
& = \frac{2 - (1 + \sqrt{61})/10}{2} = \frac{19 - \sqrt{61}}{20}.
\end{aligned}$$

Also $h(\beta) \in ((19 - \sqrt{61})/20, 1)$ für $\beta \in (1, \infty)$.

Nun betrachten wir den Fall, dass (4.14) eintritt:

$$\begin{aligned}
(4.14) \quad & \iff 0 = (m_4 - 3m_2^2) \cdot 4c\gamma + m_2(8c^3\gamma + 8c\gamma^3) \\
& \iff 0 = m_4 - 3m_2^2 + 2m_2(c^2 + \gamma^2).
\end{aligned}$$

Setzt man in diese Gleichung die Werte von $m_2 = m_2(c)$ und $m_4 = m_4(c)$ ein, dividiert durch c und führt Variablensubstitution $d := c^2 \in [\gamma^2, (1 - \gamma)^2]$ durch, so erhält man eine quadratische Gleichung

in d . MAPLE liefert das Ergebnis:

$$d = \frac{1}{180\beta(\beta-1)(\beta-\alpha)^2} \left(45\beta^4 - 120\beta^3\alpha - 15\beta^3 + 60\beta^2\alpha^2 + 80\beta^2\alpha + 15\beta^2 - 40\beta\alpha^2 - 45\beta + 20 - 4 \left(-90\beta^6\alpha + 225\beta^6 + 285\beta^5\alpha^2 - 510\beta^5\alpha - 450\beta^5 - 240\beta^4\alpha^3 + 115\beta^4\alpha^2 + 1050\beta^4\alpha + 450\beta^4 + 60\beta^3\alpha^4 + 140\beta^3\alpha^3 - 525\beta^3\alpha^2 - 750\beta^3\alpha - 375\beta^3 - 35\beta^2\alpha^4 + 375\beta^2\alpha^2 + 200\beta^2\alpha + 285\beta^2 - 100\beta\alpha^2 - 135\beta + 25 \right)^{1/2} \right).$$

□

In den Abbildungen 4.5 bzw. 4.6 sehen wir \mathbf{e}_3 - bzw. D -optimale Versuchspläne für quadratische Regression gemäß Satz 4.25. In der Abbildung 4.7 ist die Grenze skizziert zwischen den optimalen Versuchsplänen in $\Upsilon[\alpha, \beta]$, die 2 bzw. 3 Bereiche mit maximaler Masse besitzen.

Bemerkung 4.26 *Wynn (1982) gab bereits numerische Ergebnisse für den D -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[0, \beta]$ ($\alpha = 0$) für die quadratische Regression an und zwar für $1/\beta = 0.1, 0.2, \dots, 0.9, 1$. In dem Fall $\alpha = 0$ lässt sich Satz 4.25 b) spezialisieren zu:*

Der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[0, \beta]$ ist gegeben durch

$$\xi = \beta \mathbf{1}_{[-1, -c-\gamma] \cup [-c+\gamma, c-\gamma] \cup [c+\gamma, 1]} \cdot \tilde{\lambda}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{2\beta}$ und

$$c = \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{180\beta(\beta-1)} \left(45\beta^4 - 15\beta^3 + 15\beta^2 - 45\beta + 20 - 4 \left(225\beta^6 - 450\beta^5 + 450\beta^4 - 375\beta^3 + 285\beta^2 - 135\beta + 25 \right)^{1/2} \right) \right)^{1/2}.$$

In den Abbildungen 4.8 bzw. 4.10 sehen wir \mathbf{e}_4 - bzw. D -optimale Versuchspläne für kubische Regression, in den Abbildungen 4.9 und 4.11 ist skizziert, wie viele Intervalle mit der maximalen Masse der in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ optimale Versuchsplan in Abhängigkeit von (α, β) hat. Man beachte dabei den Unterschied zwischen der \mathbf{e}_4 - und der D -Optimalität. In den Abbildungen 4.12 und 4.13 sind die entsprechenden Skizzen der Intervallzahl mit maximaler Masse für die Polynomregression vom Grade 4. Alle diese optimalen Versuchspläne wurden dabei numerisch bestimmt.

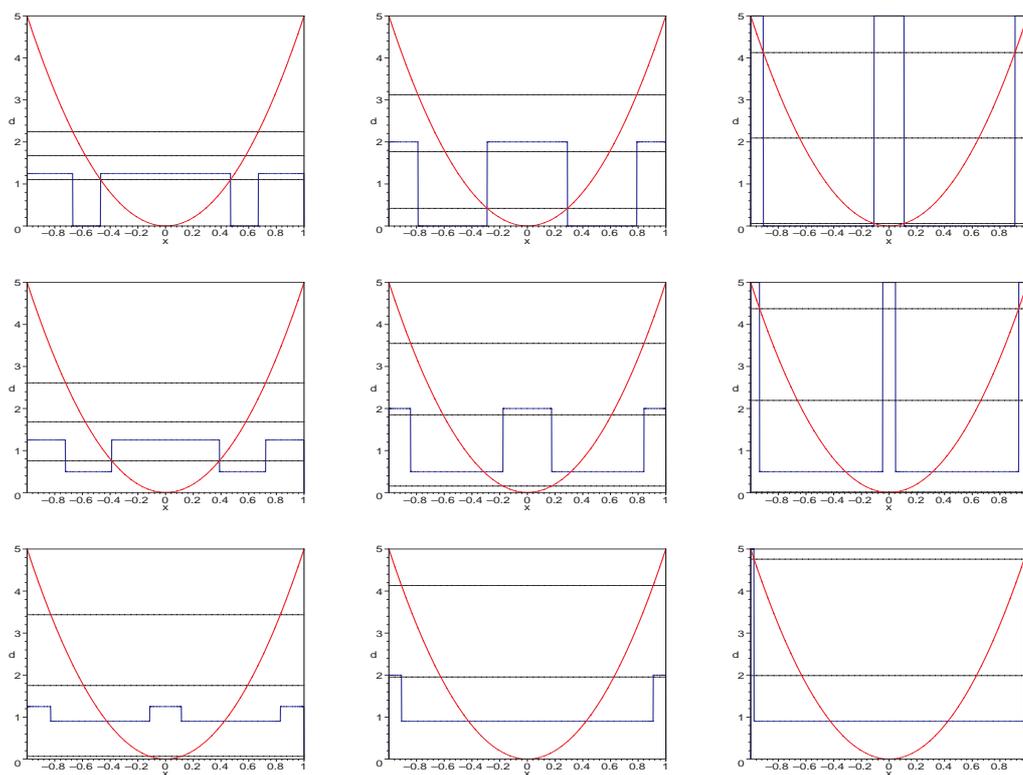


Abbildung 4.5: QUADRATISCHE REGRESSION: $\tilde{\lambda}$ -DICHTE (BLAU) DES e_3 -OPTIMALEN VERSUCHSPANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR $\alpha = 0$ (ERSTE ZEILE), $\alpha = 0.5$ (ZWEITE ZEILE), $\alpha = 0.9$ (DRITTE ZEILE) UND $\beta = 1.25$ (ERSTE SPALTE), $\beta = 2$ (ZWEITE SPALTE), $\beta = 5$ (DRITTE SPALTE); FUNKTION $f_3(x) = x^2$ (ROT, ZUR BESSEREN DARSTELLUNG MIT 5 MULTIPLIZIERT), $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3$ (DÜNN SCHWARZ) UND DIE BEIDEN FUNKTIONEN $\text{pr}_{[f_1, f_2]}^{L^2(\xi^*)} f_3 \pm \text{const}$, DIE DEN OPTIMALEN VERSUCHSPAN BESTIMMEN (FETT SCHWARZ)

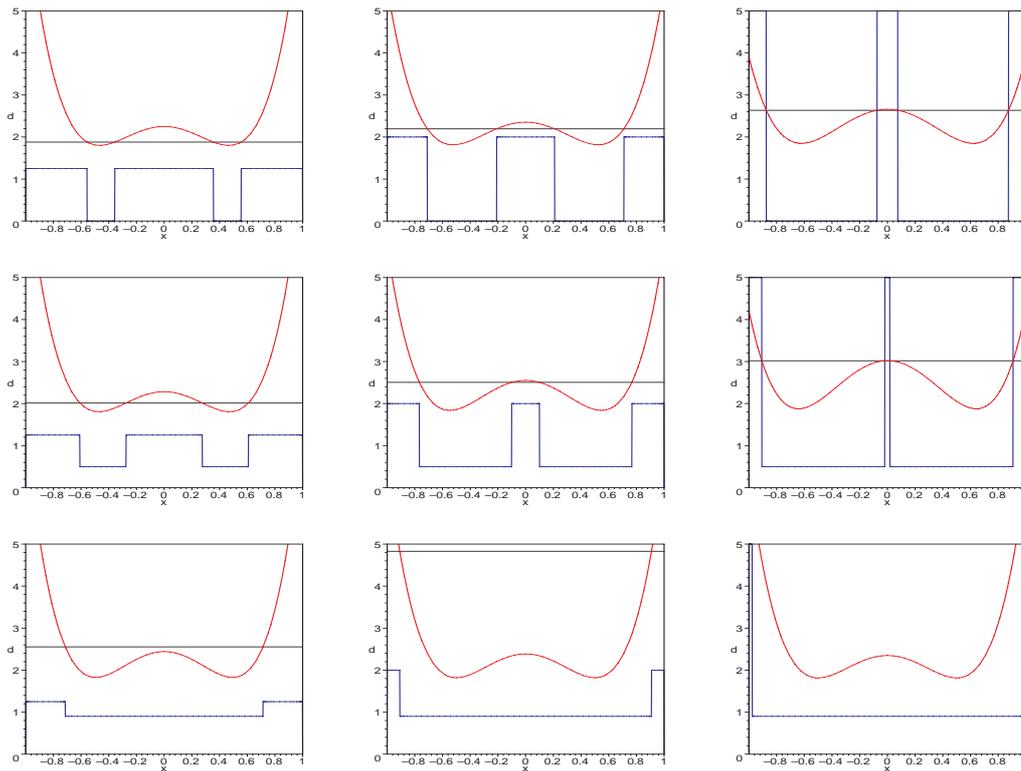


Abbildung 4.6: QUADRATISCHE REGRESSION: $\tilde{\lambda}$ -DICHTE (BLAU) DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR $\alpha = 0$ (ERSTE ZEILE), $\alpha = 0.5$ (ZWEITE ZEILE), $\alpha = 0.9$ (DRITTE ZEILE) UND $\beta = 1.25$ (ERSTE SPALTE), $\beta = 2$ (ZWEITE SPALTE), $\beta = 5$ (DRITTE SPALTE); VARIANZFUNKTION $d(x, \xi^*)$ (ROT) UND DIE KONSTANTE, DIE DEN OPTIMALEN VERSUCHSPAN BESTIMMT (SCHWARZ)

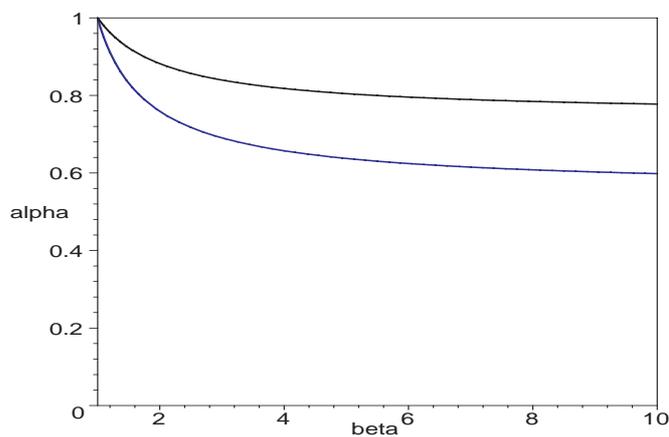


Abbildung 4.7: QUADRATISCHE REGRESSION: GRENZE ZWISCHEN e_3 -OPTIMALEN VERSUCHSPÄNE IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ MIT 2 (OBERHALB DER KURVE) UND MIT 3 (UNTERHALB DER KURVE) BEREICHEN, AUF DENEN DIE VOLLE MASSE LIEGT (SCHWARZE KURVE) UND ENTSPRECHEND FÜR D -OPTIMALE VERSUCHSPÄNE (BLAUE KURVE)

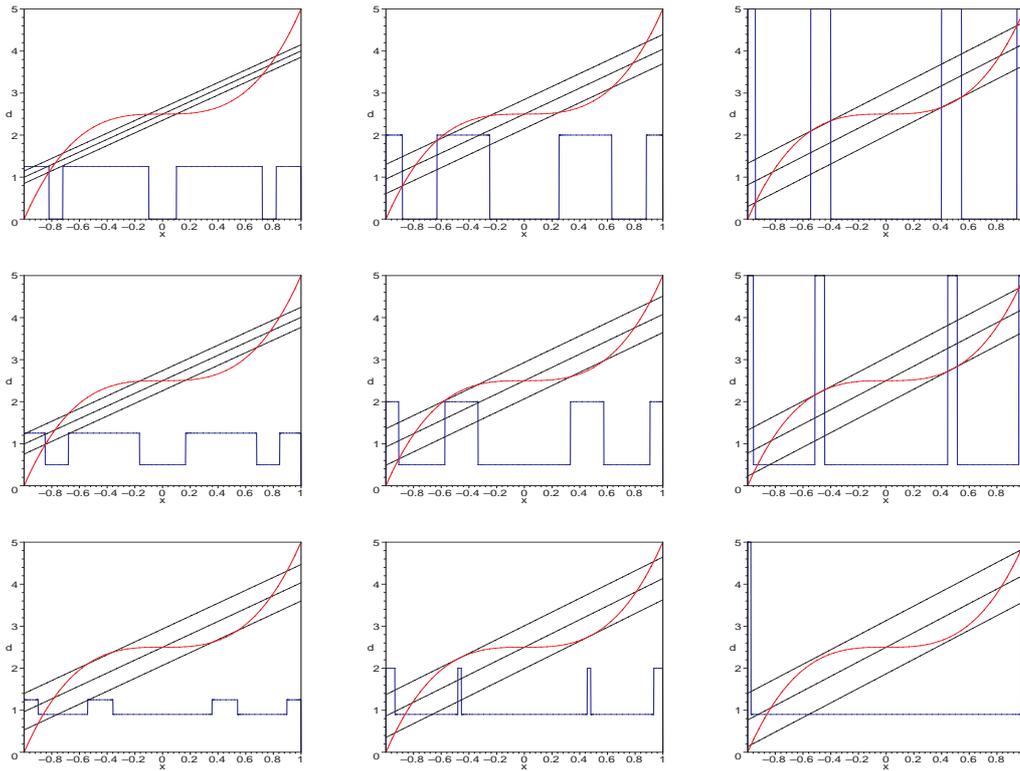


Abbildung 4.8: KUBISCHE REGRESSION: $\tilde{\lambda}$ -DICHTE (BLAU) DES e_4 -OPTIMALEN VERSUCHSPLANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR $\alpha = 0$ (ERSTE ZEILE), $\alpha = 0.5$ (ZWEITE ZEILE), $\alpha = 0.9$ (DRITTE ZEILE) UND $\beta = 1.25$ (ERSTE SPALTE), $\beta = 2$ (ZWEITE SPALTE), $\beta = 5$ (DRITTE SPALTE); $f_3(x) = x^3$ (ROT, ZUR BESSEREN DARSTELLUNG MIT $5/2$ MULTIPLIZIERT UND UM $5/2$ NACH OBEN VERSCHOBEN), $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi^*)} f_4$ (DÜNN SCHWARZ) UND DIE FUNKTIONEN $\text{pr}_{[f_1, f_2, f_3]}^{L^2(\xi^*)} f_4 \pm \text{const}$, DIE DEN OPTIMALEN VERSUCHSPLAN BESTIMMEN (FETT SCHWARZ)

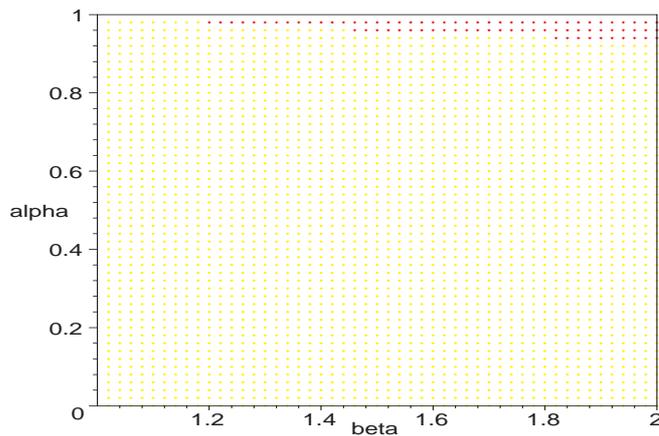


Abbildung 4.9: KUBISCHE REGRESSION: ANZAHL DER BEREICHE DES e_4 -OPTIMALEN VERSUCHSPLANS IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$, AUF DENEN DIE VOLLE MASSE LIEGT IN ABHÄNGIGKEIT VON α UND β (ROT: 2 BEREICHE, GELB: 4 BEREICHE)

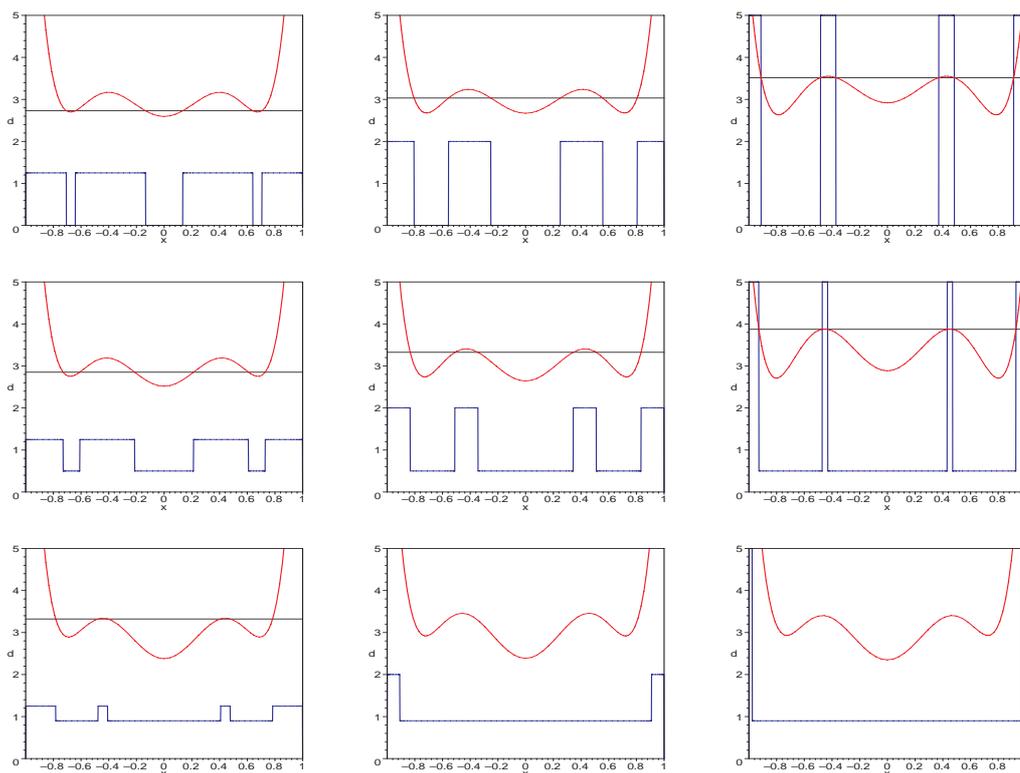


Abbildung 4.10: KUBISCHE REGRESSION: $\tilde{\lambda}$ -DICHTE (BLAU) DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR $\alpha = 0$ (ERSTE ZEILE), $\alpha = 0.5$ (ZWEITE ZEILE), $\alpha = 0.9$ (DRITTE ZEILE) UND $\beta = 1.25$ (ERSTE SPALTE), $\beta = 2$ (ZWEITE SPALTE), $\beta = 5$ (DRITTE SPALTE); VARIANZFUNKTION $d(x, \xi^*)$ (ROT) UND DIE KONSTANTE, DIE DEN OPTIMALEN VERSUCHSPAN BESTIMMT (SCHWARZ)

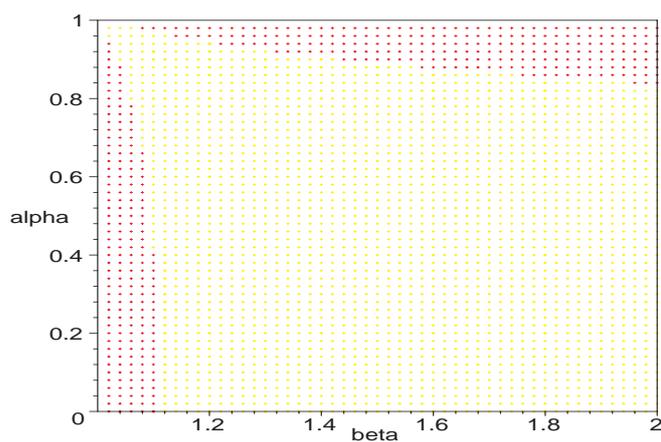


Abbildung 4.11: KUBISCHE REGRESSION: ANZAHL DER BEREICHE DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPANS IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$, AUF DENEN DIE VOLLE MASSE LIEGT IN ABHÄNGIGKEIT VON α UND β (ROT: 2 BEREICHE, GELB: 4 BEREICHE)

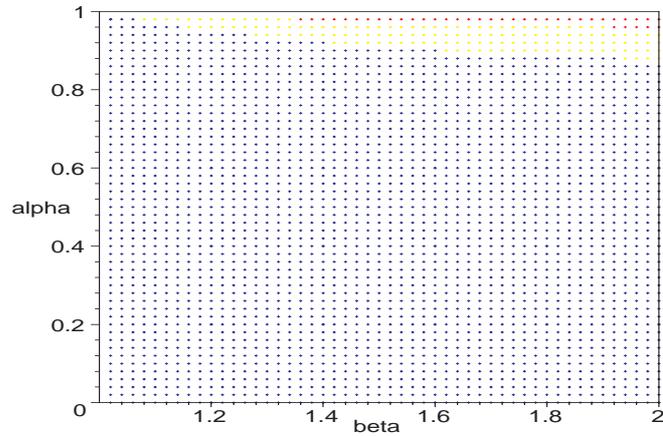


Abbildung 4.12: POLYNOM-REGRESSION VIERTEN GRADES: ANZAHL DER BEREICHE DES e_5 -OPTIMALEN VERSUCHSPANS IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$, AUF DENEN DIE VOLLE MASSE LIEGT IN ABHÄNGIGKEIT VON α UND β (ROT: 2 BEREICHE, GELB: 4 BEREICHE, BLAU: 5 BEREICHE)

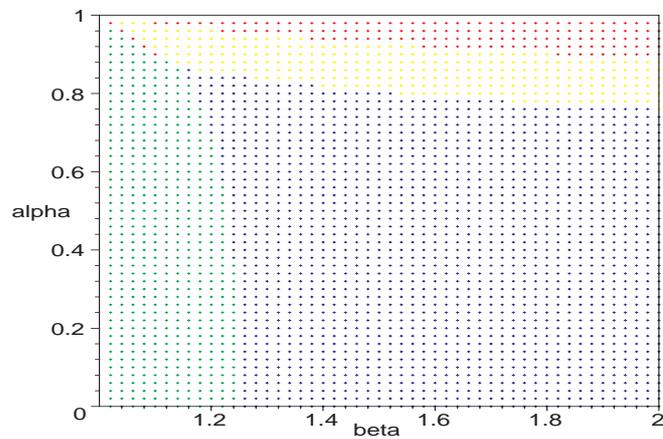


Abbildung 4.13: POLYNOM-REGRESSION VIERTEN GRADES: ANZAHL DER BEREICHE DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPANS IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$, AUF DENEN DIE VOLLE MASSE LIEGT IN ABHÄNGIGKEIT VON α UND β (ROT: 2 BEREICHE, GRÜN: 3 BEREICHE, GELB: 4 BEREICHE, BLAU: 5 BEREICHE)

Kapitel 5

Optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ für die Change-Point-Regression

5.1 e_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \infty]$

In diesem Abschnitt kommen wir wieder auf die Change-Point-Regression aus Abschnitt 2.6.2 zurück. Wir werden e_k -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, \infty]$ mit $a \equiv \alpha \in [0, 1]$ bestimmen.

Satz 5.1 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, ((x - \tau)^+)^{\kappa})^{\top}$, $\kappa = 1, \tau \in (-1, 1)$ oder $\kappa > 1, \tau \in [-1, 1]$ und sei

$$\varrho := \begin{cases} \tau, & \text{für } \kappa = 1, \\ \tau + (1 - \tau)^{\kappa/(\kappa-1)}(2\kappa)^{-1/(\kappa-1)}, & \text{für } \kappa > 1. \end{cases}$$

Sei weiter

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^* &= \begin{pmatrix} (1 - \varrho)/4 \\ 1/2 \\ (1 + \varrho)/4 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{q} &= \frac{1}{(1 + \tau)(1 - \varrho)} \cdot \begin{pmatrix} ((\tau - \varrho) + (1 - \tau)/3 + ((\varrho - \tau) - \kappa(1 - \varrho)/2)(1 - \tau)^{\kappa+1}/((\kappa + 1)(\kappa + 2)) \\ (1 - \tau)(1 - (1 - \tau)^{\kappa}/(\kappa + 1)) \\ (\tau(1 - \varrho) - (1 - \tau)/3 + ((2 - \varrho + \tau) + \kappa(3 - \varrho)/2)(1 - \tau)^{\kappa+1}/((\kappa + 1)(\kappa + 2)) \end{pmatrix} \\ \mathbf{p} &= (p_0, p_1, p_2)^{\top} = \mathbf{p}^* - \alpha \mathbf{q} \\ \alpha_0 &= \min\{p_i^*/q_i \mid i = 0, 1, 2 \text{ mit } q_i > 0\}. \end{aligned}$$

Für $\alpha \in [0, \alpha_0]$ ist der Versuchsplan

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + p_0 \delta_{-1} + p_1 \delta_\varrho + p_2 \delta_1$$

\mathbf{e}_3 -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$.

Beweis: Im Satz 2.42 wurde der \mathbf{e}_3 -optimale Versuchsplan in Ξ für die Change-Point-Regression

$$f(x) = (1, x, ((x - \tau)^+)^{\kappa})^{\top}$$

mit $\kappa = 1, \tau \in (-1, 1)$ oder $\kappa > 1, \tau \in [0, 1)$ angegeben. Er hat die Gewichte $p_0^* = (1 - \varrho)/4, p_1^* = 1/2, p_2^* = (1 + \varrho)/4$ in den Massepunkten $x_0 = -1, x_1 = \varrho, x_2 = 1$ mit

$$\varrho := \begin{cases} \tau, & \text{für } \kappa = 1, \\ \tau + (1 - \tau)^{\kappa/(\kappa-1)} (2\kappa)^{-1/(\kappa-1)}, & \text{für } \kappa > 1. \end{cases}$$

Die dazugehörige Design-Matrix F ist also gegeben durch

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & \varrho & 1 \\ 0 & \varrho - \tau & 1 - \tau \end{pmatrix}$$

und die Matrix S aus der Elfving-Darstellung ist $S = \text{diag}(1, -1, 1)$. Durch elementares Ausrechnen ergibt sich die Inverse der Matrix F zu

$$F^{-1} = \frac{1}{(1 + \tau)(1 - \varrho)} \begin{pmatrix} \tau(1 - \varrho) & -(1 - \varrho) & 1 - \varrho \\ 1 - \tau & 1 - \tau & -2 \\ -(\varrho - \tau) & -(\varrho - \tau) & 1 + \varrho \end{pmatrix}$$

und weiter

$$F^{-1\top} S \mathbf{1}_3 = \frac{1}{(1 + \tau)(1 - \varrho)} \begin{pmatrix} -\tau\varrho + 3\tau - \varrho - 1 \\ -2(1 - \tau) \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix \tilde{R} (die ersten $k - 1$ Zeilen von $R = \int_{\mathcal{E}} f f^{\top} \tilde{a} d\tilde{\lambda}$, siehe Satz 3.30) erhält man mittels folgender Integrale:

$$\begin{aligned} \int ((x - \tau)^+)^{\kappa} dx &= \int_0^{1-\tau} x^{\kappa} dx = \frac{1}{\kappa + 1} (1 - \tau)^{\kappa+1}, \\ \int x ((x - \tau)^+)^{\kappa} dx &= \left[\frac{1}{\kappa + 1} x (x - \tau)^{\kappa+1} \right]_{\tau}^1 - \int_{\tau}^1 \frac{1}{\kappa + 1} (x - \tau)^{\kappa+1} dx \\ &= \frac{1}{\kappa + 1} (1 - \tau)^{\kappa+1} - \int_0^{1-\tau} \frac{1}{\kappa + 1} x^{\kappa+1} dx \\ &= \frac{1}{\kappa + 1} (1 - \tau)^{\kappa+1} - \frac{1}{(\kappa + 1)(\kappa + 2)} (1 - \tau)^{\kappa+2} \\ &= \frac{1}{(\kappa + 1)(\kappa + 2)} (1 - \tau)^{\kappa+1} (\kappa + 1 + \tau). \end{aligned}$$

Also ist

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{(1-\tau)^{\kappa+1}}{2(\kappa+1)} \\ 0 & 1/3 & \frac{(1-\tau)^{\kappa+1}(\kappa+1+\tau)}{2(\kappa+1)(\kappa+2)} \end{pmatrix}.$$

und

$$\tilde{R}F^{-1\top}S\mathbf{1}_3 = \frac{1}{(1+\tau)(1-\varrho)} \begin{pmatrix} -\tau\varrho + 3\tau - \varrho - 1 + 2(1-\tau)^{\kappa+1}/(\kappa+1) \\ -\frac{2}{3}(1-\tau) + 2(1-\tau)^{\kappa+1}(\kappa+1+\tau)/((\kappa+1)(\kappa+2)) \end{pmatrix}.$$

Sei \tilde{F} die Matrix der ersten $k-1$ Zeilen von F (siehe Satz 3.30). Dann ist

$$(\mathbf{1}_3, S\tilde{F}^\top)^\top = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & -\varrho & 1 \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{1}_3, S\tilde{F}^\top)^{-1\top} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-\varrho & 1+\varrho & -2 \\ 2 & -2 & 0 \\ 1+\varrho & 1-\varrho & 2 \end{pmatrix}.$$

Nach Satz 3.30 ist

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= (\mathbf{1}_3, S\tilde{F}^\top)^{-1\top} \cdot (1, \mathbf{1}_3^\top SF^{-1}\tilde{R}^\top)^\top \\ &= \frac{1}{4(1+\tau)(1-\varrho)} \\ &\quad \cdot \begin{pmatrix} 1-\varrho & 1+\varrho & -2 \\ 2 & -2 & 0 \\ 1+\varrho & 1-\varrho & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (1+\tau)(1-\varrho) \\ -\tau\varrho + 3\tau - \varrho - 1 + 2(1-\tau)^{\kappa+1}/(\kappa+1) \\ -\frac{2}{3}(1-\tau) + 2(1-\tau)^{\kappa+1}(\kappa+1+\tau)/((\kappa+1)(\kappa+2)) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{(1+\tau)(1-\varrho)} \\ &\quad \cdot \begin{pmatrix} ((\tau-\varrho) + (1-\tau)/3 + ((\varrho-\tau) - \kappa(1-\varrho)/2)(1-\tau)^{\kappa+1}/((\kappa+1)(\kappa+2)) \\ (1-\tau)(1 - (1-\tau)^\kappa/(\kappa+1)) \\ (\tau(1-\varrho) - (1-\tau)/3 + ((2-\varrho+\tau) + \kappa(3-\varrho)/2)(1-\tau)^{\kappa+1}/((\kappa+1)(\kappa+2)) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Mit Satz 3.27 und 3.30 folgt die Behauptung. □

Wir betrachten nun speziell den Fall $\kappa = 1$.

Satz 5.2 Sei $\mathcal{E} = [-1, 1]$ und $f(x) = (1, x, (x-\tau)^+)^\top$, $\tau \in (-1, 1)$. Der Versuchsplan

$$\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_0\delta_{-1} + p_1\delta_\tau + p_2\delta_1$$

mit

$$\begin{aligned}
 p_0 &= \begin{cases} \frac{1-\tau}{4} - \frac{3-\tau}{12}\alpha, & \alpha < 3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, \\ \frac{2-2\alpha+2|\tau|-|\tau|\alpha}{7+|\tau|}, & \alpha \in \left[3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, 1 - \frac{|\tau|}{5}\right], \tau < 0, \\ 1 - \alpha, & \alpha > 1 - \frac{|\tau|}{5}, \tau < 0, \\ 0, & \alpha \geq 3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, \tau > 0, \end{cases} \\
 p_1 &= \begin{cases} \frac{1-\alpha}{2}, & \alpha < 3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, \\ \frac{5-5\alpha-|\tau|}{7+|\tau|}, & \alpha \in \left[3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, 1 - \frac{|\tau|}{5}\right], \\ 0, & \alpha > 1 - \frac{|\tau|}{5}, \end{cases} \\
 p_2 &= \begin{cases} \frac{1+\tau}{4} - \frac{3+\tau}{12}\alpha, & \alpha < 3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, \\ \frac{2-2\alpha+2|\tau|-|\tau|\alpha}{7+|\tau|}, & \alpha \in \left[3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, 1 - \frac{|\tau|}{5}\right], \tau > 0, \\ 1 - \alpha, & \alpha > 1 - \frac{|\tau|}{5}, \tau > 0, \\ 0, & \alpha \geq 3\frac{1-|\tau|}{3-|\tau|}, \tau < 0 \end{cases}
 \end{aligned}$$

ist \mathbf{e}_3 -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$.

Beweis: Aus Satz 5.1 erhält man wegen $\varrho = \tau$ den Vektor \mathbf{q} zu:

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} 1/4 - \tau/12 \\ 1/2 \\ 1/4 + \tau/12 \end{pmatrix}.$$

Nach Satz 2.42 ist $\mathbf{p}^* = ((1-\tau)/4, 1/2, (1+\tau)/4)^\top$. Also hat man $\alpha_0 = \min\{3(1-\tau)/(3-\tau), 3(1+\tau)/(3+\tau)\} = 3(1-|\tau|)/(3-|\tau|)$ und p_0, p_1, p_2 für $\alpha \leq \alpha_0$.

Nun wollen wir den optimalen Versuchsplan für $\alpha > \alpha_0$ bestimmen. Dazu betrachten wir $\tau \in (-1, 0]$ (für $\tau \in (0, 1)$ analog). Für $\alpha = \alpha_0$ ist $p_2 = 0$. Daher kann man vermuten, dass dann der Versuchsplan

$$\xi_\rho = \alpha\tilde{\lambda} + \rho\delta_{-1} + (1 - \alpha - \rho)\delta_\tau$$

für ein $\rho = \rho(\alpha) \in (0, 1 - \alpha)$ optimal für θ_3 in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ ist.

Da f_3 jeweils linear auf $[-1, \tau]$ und $[\tau, 1]$ ist, folgt aus Korollar 3.20, dass ξ_ρ genau dann optimal für θ_3 in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ ist, wenn

$$\left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (-1) \right| = \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (\tau) \right| \geq \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (1) \right|.$$

Nach Bemerkung 3.21 gilt $\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 = (-M_{12}^\top M_{11}^{-1}, 1)$ mit

$$M_{11} := \int_{\mathcal{E}} \tilde{f} \tilde{f}^\top d\xi_\rho, \quad M_{12} := \int_{\mathcal{E}} \tilde{f} f_3 d\xi_\rho, \quad \tilde{f} := (f_1, f_2)^\top = (1, x)^\top.$$

Es gilt mit $\omega := \alpha/3 + \rho + (1 - \alpha - \rho)\tau^2 - (\rho(1 + \tau) - \tau(1 - \alpha))^2$ (man beachte $\omega > 0$):

$$\begin{aligned} M_{11} &= \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix} + \rho \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} + (1 - \alpha - \rho) \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ \tau & \tau^2 \end{pmatrix} \\ M_{11}^{-1} &= \frac{1}{\omega} \begin{pmatrix} \alpha/3 + \rho + (1 - \alpha - \rho)\tau^2 & \rho(1 + \tau) - \tau(1 - \alpha) \\ \rho(1 + \tau) - \tau(1 - \alpha) & 1 \end{pmatrix} \\ M_{12} &= \alpha \begin{pmatrix} (1 - \tau)^2/4 \\ (1 - \tau)^2(2 + \tau)/12 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

($M_{12} = \alpha \cdot$ letzte Spalte von \tilde{R} für $\kappa = 1, \varrho = \tau$),

$$\begin{aligned} & -M_{12}^\top M_{11}^{-1} \\ &= -\frac{\alpha(1 - \tau)^2}{12\omega} \\ & \quad \cdot (\alpha + 3\rho + 3(1 - \alpha - \rho)\tau^2 + (2 + \tau)(\rho(1 + \tau) - \tau(1 - \alpha)), 3\rho(1 + \tau) - 3\tau(1 - \alpha) + 2 + \tau) \\ &= -\frac{\alpha(1 - \tau)^2}{12\omega} (\rho(5 + 3\tau - 2\tau^2) - 2(1 - \tau)\tau(1 - \alpha) + \alpha, 3\rho(1 + \tau) - 3\tau(1 - \alpha) + 2 + \tau) \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} 12\omega/(\alpha(1 - \tau)^2) \cdot \text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 &= 12\omega/(\alpha(1 - \tau)^2) \cdot (-M_{12}^\top M_{11}^{-1}, 1) \cdot f(x) \\ &= (-\rho(5 + 3\tau - 2\tau^2) + 2(1 - \tau)\tau(1 - \alpha) - \alpha, \\ & \quad -3\rho(1 + \tau) + 3\tau(1 - \alpha) - 2 - \tau, 12\omega/(\alpha(1 - \tau)^2)) \cdot f(x). \end{aligned}$$

Damit

$$\begin{aligned} & \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (-1) \right| = \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (\tau) \right| \\ & \iff \left| (-M_{12}^\top M_{11}^{-1}, 1)(1, -1, 0)^\top \right| = \left| (-M_{12}^\top M_{11}^{-1}, 1)(1, \tau, 0)^\top \right| \\ & \iff (-M_{12}^\top M_{11}^{-1}, 1)(2, -1 + \tau, 0)^\top = 0 \\ & \iff \rho = \frac{2 - 2\alpha - 2\tau + \tau\alpha}{7 - \tau} \geq 0. \end{aligned}$$

Dabei ist $\rho \leq 1 - \alpha \iff \alpha \leq 1 + \tau/5$. Für dieses ρ erhält man durch elementare Rechnung:

$$\begin{aligned} \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (-1) &= \frac{1}{12\omega/(\alpha(1 - \tau)^2)} \cdot \frac{\alpha(9\tau^2 + 6\tau - 3) + (-2\tau^3 - 10\tau^2 + 2\tau + 10)}{7 - \tau} \\ \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (1) &= \frac{1}{12\omega/(\alpha(1 - \tau)^2)} \cdot \frac{1 + \tau}{(7 - \tau)^2 \alpha(1 - \tau)} \left(3\alpha^2(1 - 3\tau)(5 + 12\tau - \tau^2) \right. \\ & \quad \left. - 2\alpha(\tau^4 - 8\tau^3 - 112\tau^2 + 4\tau + 43) + 24(5 + \tau)(1 - \tau^2) \right). \end{aligned}$$

Es gilt $\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(-1) \geq 0$, denn

$$\begin{aligned} & (\alpha(9\tau^2 + 6\tau - 3) + (-2\tau^3 - 10\tau^2 + 2\tau + 10))/(1 + \tau) \\ &= 3\alpha(3\tau - 1) + (2\tau + 10)(1 - \tau) \\ &\geq \begin{cases} 3\alpha(-5/2) + 8 \geq 0, & \text{für } \tau \in [-1/2, 0], \\ 3\alpha(-4) + 12 \geq 0, & \text{für } \tau \in (-1, -1/2). \end{cases} \end{aligned}$$

Für $\alpha \geq 3\frac{1+\tau}{3+\tau}$ gilt $\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(1) \leq \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(-1)$, denn

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha(7-\tau)^2(1-\tau)}{48\omega/(\alpha(1-\tau)^2)} \left(\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(-1) - \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(1) \right) \\ &= \alpha^2(9\tau^3 + 33\tau^2 + 15\tau - 9) + \alpha(-2\tau^4 - 43\tau^3 - 73\tau^2 + 7\tau + 39) \\ &+ (6\tau^4 + 36\tau^3 + 24\tau^2 - 36\tau - 30) =: g(\alpha). \end{aligned}$$

Wegen $9\tau^3 + 33\tau^2 + 15\tau - 9 = 3(1+\tau)(8\tau - 3(1-\tau^2)) < 0$ gilt $g(\alpha) \rightarrow -\infty$ für $\alpha \rightarrow \pm\infty$. Daher ist $g(\alpha)$ eine nach unten geöffnete Parabel. Es gilt

$$g\left(3\frac{1+\tau}{3+\tau}\right) = 0 \quad \text{und} \quad g(1) = 8(1-\tau^2) \underbrace{\tau}_{\leq 0} \underbrace{(2\tau^2 - \tau - 7)}_{< 0} \geq 0,$$

also $g(\alpha) \geq 0$ für $\alpha \in \left[3\frac{1+\tau}{3+\tau}, 1\right]$.

In ähnlicher Weise zeigen wir, dass für $\alpha \geq 3\frac{1+\tau}{3+\tau}$ auch $-\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(1) \leq \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(-1)$ gilt, denn

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha(7-\tau)^2(1-\tau)}{24\omega/(\alpha(1-\tau)^2)} \left(\left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(-1) + \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3\right)(1) \right) \\ &= \alpha^2(9\tau^4 - 84\tau^3 - 54\tau^2 + 36\tau - 3) + \alpha(-2\tau^5 + 10\tau^4 + 154\tau^3 + 70\tau^2 - 80\tau - 8) \\ &+ (-12\tau^4 - 72\tau^3 - 48\tau^2 + 72\tau + 60) =: \tilde{g}(\alpha). \end{aligned}$$

Wegen $9\tau^4 - 84\tau^3 - 54\tau^2 + 36\tau - 3 = 3(1+\tau)(1-3\tau)(-\tau^2 + 10\tau - 1) < 0$ gilt $\tilde{g}(\alpha) \rightarrow -\infty$ für $\alpha \rightarrow \pm\infty$. Daher ist $\tilde{g}(\alpha)$ eine nach unten geöffnete Parabel. Es gilt

$$\tilde{g}\left(3\frac{1+\tau}{3+\tau}\right) = \frac{3(7-\tau)^2(1+\tau)^2(1-\tau)(2\tau^2 + \tau + 3)}{(3+\tau)^2} > 0$$

und

$$\tilde{g}(1) = (1+\tau) \underbrace{(-2\tau^4 + 9\tau^3 - 11\tau^2)}_{\geq -22} \underbrace{-21\tau + 49}_{\geq 49} > 0,$$

also $\tilde{g}(\alpha) \geq 0$ für $\alpha \in \left[3\frac{1+\tau}{3+\tau}, 1\right]$.

Also haben wir $\left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (1) \right| \leq \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi_\rho)} f_3 \right) (-1) \right|$ und somit ist ξ_ρ e_3 -optimal in $\Upsilon[\alpha, \infty]$, falls $\alpha \in [3\frac{1+\tau}{3+\tau}, 1 + \tau/5]$.

Für $\alpha > 1 + \tau/5$ betrachten wir den Versuchsplan

$$\xi = \alpha \tilde{\lambda} + (1 - \alpha) \delta_{-1}$$

und zeigen durch

$$\left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3 \right) (-1) \right| \geq \max \left\{ \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3 \right) (\tau) \right|, \left| \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3 \right) (1) \right| \right\}, \quad (5.1)$$

dass dieser Versuchsplan optimal für θ_3 in $\Upsilon[\alpha, \infty]$ ist.

$$\begin{aligned} M_{11} &= \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix} + (1 - \alpha) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \\ M_{11}^{-1} &= \frac{1}{\alpha(\frac{4}{3} - \alpha)} \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{3}\alpha & 1 - \alpha \\ 1 - \alpha & 1 \end{pmatrix} \\ M_{12} &= \alpha \begin{pmatrix} (1 - \tau)^2/4 \\ (1 - \tau)^2(2 + \tau)/12 \end{pmatrix} \\ M_{11}^{-1} M_{12} &= \frac{(1 - \tau)^2}{4(4 - 3\alpha)} \begin{pmatrix} 5 - 4\alpha + \tau - \tau\alpha \\ 5 - 3\alpha + \tau \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Daher ist

$$12\omega/(\alpha(1 - \tau)^2) \cdot \text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3(x) = ((1 - \tau)^2(-5 + 4\alpha - \tau + \tau\alpha), (1 - \tau)^2(-5 + 3\alpha - \tau), 4(4 - 3\alpha)) \cdot f(x)$$

und für $c := 4(4 - 3\alpha) > 0$ gilt

$$\begin{aligned} \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3 \right) (-1) &= c(1 - \tau)^2(1 + \tau)\alpha \\ \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3 \right) (\tau) &= c(1 - \tau)^2(1 + \tau)(-5 - \tau + 4\alpha) \\ \left(\text{pr}_{[f_1, f_2]^\perp}^{L^2(\xi)} f_3 \right) (1) &= c(1 - \tau)(1 + \tau)(6 + 2\tau - 5\alpha - \tau\alpha) \end{aligned}$$

Die Ungleichung (5.1) ist daher genau dann erfüllt, wenn

$$\begin{aligned} &\begin{cases} \alpha \geq -5 - \tau + 4\alpha, & \alpha - \tau\alpha \geq 6 + 2\tau - 5\alpha - \tau\alpha, \\ \alpha \geq 5 + \tau - 4\alpha, & \alpha - \tau\alpha \geq -6 - 2\tau + 5\alpha + \tau\alpha, \end{cases} \\ &\iff \begin{cases} \alpha \leq \frac{5+\tau}{3}, & \alpha \geq 1 + \frac{\tau}{3}, \\ \alpha \geq 1 + \frac{\tau}{5}, & \alpha \leq \frac{6+2\tau}{4+2\tau}, \end{cases} \\ &\iff \alpha \geq 1 + \frac{\tau}{5}. \end{aligned}$$

Zusammenfassend haben wir die Behauptung gezeigt. □

Die verschiedenen Bereiche (abhängig von α und τ), in denen sich die Massepunkte des optimalen Versuchsplans unterscheiden, sind in Abbildung 5.1 skizziert. Dabei ist links oben $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + (1-\alpha)\delta_{-1}$ optimal, links im mittleren Bereich $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_0\delta_{-1} + p_1\delta_\tau$, im unteren Bereich $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_0\delta_{-1} + p_1\delta_\tau + p_2\delta_1$, rechts im mittleren Bereich $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + p_1\delta_\tau + p_2\delta_1$, rechts oben $\xi = \alpha\tilde{\lambda} + (1-\alpha)\delta_1$.

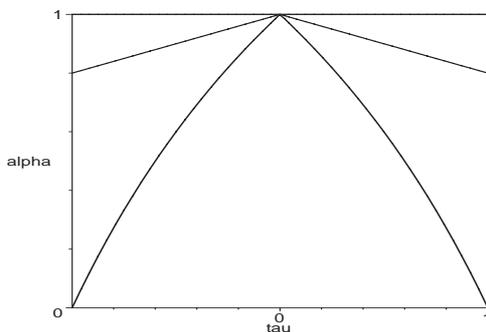


Abbildung 5.1: VERSCHIEDENE BEREICHE DES OPTIMALEN VERSUCHSPANS FÜR θ_3 IN $\Upsilon[\alpha, \infty]$ IM MODELL $f(x) = (1, x, (x - \tau)^+)^T$

In den Abbildungen 5.2 und 5.3 sind die Gewichte p_0, p_1, p_2 (auf $x_0 = -1, x_1 = \tau, x_2 = 1$) für die Fälle $\tau = -0.8, -0.4$ in Abhängigkeit von α aufgetragen.

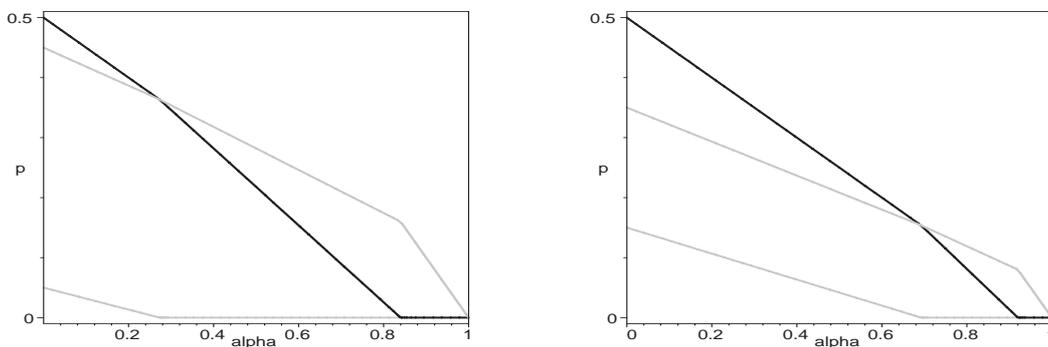


Abbildung 5.2: GEWICHTE p_0 (OBERE GRAUE KURVE), p_1 (SCHWARZE KURVE), p_2 (UNTERE GRAUE KURVE) FÜR $\tau = -0.8$ (LINKE ABBILDUNG) UND $\tau = -0.4$ (RECHTE ABBILDUNG)

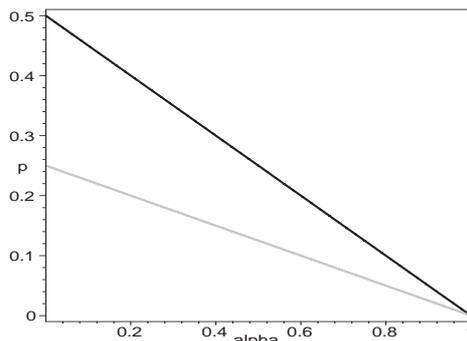


Abbildung 5.3: GEWICHTE p_0, p_2 (GRAU) UND p_1 (SCHWARZ) FÜR $\tau = 0$

5.2 Das volle Change-Point-Modell

In diesem Abschnitt betrachten wir auf dem Versuchsbereich $\mathcal{E} = [-1, 1]$ für $k \in \mathbb{N}$ gerade das sogenannte „volle Change-Point-Modell“

$$f(x) = \left(\mathbf{1}_{[-1, \tau)}(x), (x - \tau)^-, \dots, ((x - \tau)^-)^{k/2-1}, \mathbf{1}_{[\tau, 1]}(x), (x - \tau)^+, \dots, ((x - \tau)^+)^{k/2-1} \right)^\top, \quad (5.2)$$

bei dem sich alle Parameter der Polynomregression vom $k/2 - 1$ -ten Grad beim Change-Point $\tau \in (-1, 1)$ ändern können. Hierbei bezeichnet $(y)^- = \min\{y, 0\}$, $(y)^+ = \max\{y, 0\}$. Wegen der Unstetigkeit der Regressionsfunktion existiert im Allgemeinen kein optimaler Versuchsplan in Ξ oder in $\Upsilon[a, \infty]$. Dagegen existieren \mathbf{c} - und D -optimale Versuchspläne in $\Upsilon[a, b]$ für $b < \infty$, denn $\Upsilon[a, b]$ ist dann kompakt, siehe Lemma 3.12, und $\xi \mapsto (\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{c})^{-1}$ und $\xi \mapsto \det M(\xi)$ sind stetig auf Ξ^+ . Wir setzen daher $b < \infty$ in diesem Abschnitt voraus. Ansonsten gelten unsere generellen Voraussetzungen an a und b aus Definition 3.9, d.h. insbesondere $\int_{\mathcal{E}} a \, d\tilde{\lambda} \leq 1 \leq \int_{\mathcal{E}} b \, d\tilde{\lambda}$.

Wir werden ausnutzen können, dass im Modell (5.2) entweder die $k/2$ ersten Komponenten oder die $k/2$ letzten Komponenten verschwinden. Zur Interpretation der einzelnen Parameter kann aber das folgende umparametrisierte Modell unter Umständen nützlicher sein:

$$g(x) = \left(1, x - \tau, \dots, (x - \tau)^{k/2-1}, \right. \\ \left. -\mathbf{1}_{[-1, \tau)}(x) + \mathbf{1}_{[\tau, 1]}(x), (x - \tau) \cdot \operatorname{sgn}(x - \tau), \dots, (x - \tau)^{k/2-1} \cdot \operatorname{sgn}(x - \tau) \right)^\top, \quad (5.3)$$

wobei $\text{sgn}(y) = 1$, falls $y \geq 0$, $\text{sgn}(y) = -1$, sonst. Es gilt

$$g(x) = Af(x) \text{ mit } A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & & 0 & 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & & 1 & 0 & 0 & & 1 & \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \\ 0 & -1 & & 0 & 0 & 1 & & 0 & \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & & -1 & 0 & 0 & & 1 & \end{pmatrix}.$$

Wie leicht zu sehen ist, ist ein Versuchsplan genau dann D -optimal in einer Menge Υ für das Modell f mit (5.2), wenn er D -optimal in Υ für das Modell g mit (5.3) ist (man vergleiche dazu auch Abschnitt 2.4.3). Ebenso ist leicht zu sehen, dass ein Versuchsplan genau dann \mathbf{c} -optimal in einer Menge Υ für das Modell f mit (5.2) ist, wenn er $\tilde{\mathbf{c}}$ -optimal in Υ für das Modell g mit (5.3) ist, wobei $\tilde{\mathbf{c}} = A^\top \mathbf{c}$.

Die \mathbf{c} - und D -optimalen Versuchspläne setzen sich aus optimalen Versuchsplänen auf den Teilintervallen $[-1, \tau)$ und $[\tau, 1]$ zusammen:

Satz 5.3 Sei das volle Change-Point-Modell (5.2) mit $k \geq 4$, k gerade, $\tau \in (-1, 1)$ gegeben und sei $b < \infty$. Seien $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2 \in \mathbb{R}^{k/2} \setminus \{\mathbf{0}_{k/2}\}$ und

$$w_u := \max \left\{ \int_{-1}^{\tau} a \, d\tilde{\lambda}, 1 - \int_{\tau}^1 b \, d\tilde{\lambda} \right\} \in [0, 1], \quad w_o := \min \left\{ \int_{-1}^{\tau} b \, d\tilde{\lambda}, 1 - \int_{\tau}^1 a \, d\tilde{\lambda} \right\} \in [0, 1].$$

Weiter setzen wir voraus, dass $w_u < 1$ und $w_o > 0$ sind.

- Sei $\mathbf{c}^\top = (\mathbf{c}_1^\top, \mathbf{0}_{k/2}^\top)$ und ξ ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b] \cap \mathcal{S}(\mathbf{c})$ für das volle Change-Point-Modell. Dann gilt $\xi([-1, \tau)) = w_o$ und $\frac{1}{w_o} \xi|_{[-1, \tau)}$ ist ein \mathbf{c}_1 -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{a}{w_o} \mathbf{1}_{[-1, \tau)}, \frac{b}{w_o} \mathbf{1}_{[-1, \tau)} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.
- Sei $\mathbf{c}^\top = (\mathbf{0}_{k/2}^\top, \mathbf{c}_2^\top)$ und ξ ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b] \cap \mathcal{S}(\mathbf{c})$ für das volle Change-Point-Modell. Dann gilt $\xi([-1, \tau)) = w_u$ und $\frac{1}{1-w_u} \xi|_{[\tau, 1]}$ ist ein \mathbf{c}_2 -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{a}{1-w_u} \mathbf{1}_{[\tau, 1]}, \frac{b}{1-w_u} \mathbf{1}_{[\tau, 1]} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.
- Sei $\mathbf{c}^\top = (\mathbf{c}_1^\top, \mathbf{c}_2^\top)$ und ξ ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b] \cap \mathcal{S}(\mathbf{c})$ für das volle Change-Point-Modell.

Dann gilt $w := \xi([-1, \tau]) \in [w_u, w_o] \cap (0, 1)$ und $\frac{1}{w}\xi|_{[-1, \tau]}$ ist ein \mathbf{c}_1 -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{a}{w}\mathbf{1}_{[-1, \tau]}, \frac{b}{w}\mathbf{1}_{[-1, \tau]} \right]$, $\frac{1}{1-w}\xi|_{[\tau, 1]}$ ist ein \mathbf{c}_2 -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{a}{1-w}\mathbf{1}_{[\tau, 1]}, \frac{b}{1-w}\mathbf{1}_{[\tau, 1]} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.

d) Sei ξ ein D -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b]$ für das volle Change-Point-Modell.

Dann gilt $w := \xi([-1, \tau]) \in [w_u, w_o] \cap (0, 1)$ und $\frac{1}{w}\xi|_{[-1, \tau]}$ ist der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{a}{w}\mathbf{1}_{[-1, \tau]}, \frac{b}{w}\mathbf{1}_{[-1, \tau]} \right]$, $\frac{1}{1-w}\xi|_{[\tau, 1]}$ ist der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{a}{1-w}\mathbf{1}_{[\tau, 1]}, \frac{b}{1-w}\mathbf{1}_{[\tau, 1]} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.

Beweis: Sei $\xi \in \Xi$, $w = \xi([-1, \tau])$. Der Versuchsplan $\xi \in \Xi$ lässt sich schreiben in der Form

$$\xi = w\xi_1 + (1-w)\xi_2, \quad \text{eSupp}(\xi_1) \subseteq [-1, \tau), \quad \text{eSupp}(\xi_2) \subseteq [\tau, 1], \quad (5.4)$$

mit $\xi_1, \xi_2 \in \Xi$ (Zerlegung in zwei Versuchspläne auf $[-1, \tau)$ und auf $[\tau, 1]$). Es gilt

$$\begin{aligned} \xi \in \Upsilon[a, b] &\iff w \in [w_u, w_o] \text{ und } \left(w = 0 \text{ oder } a\mathbf{1}_{[-1, \tau)} \leq w \frac{d\xi_1}{d\lambda} \leq b\mathbf{1}_{[-1, \tau)} \right) \\ &\quad \text{und } \left(w = 1 \text{ oder } a\mathbf{1}_{[\tau, 1]} \leq (1-w) \frac{d\xi_2}{d\lambda} \leq b\mathbf{1}_{[\tau, 1]} \right) \\ &\iff w \in [w_u, w_o] \text{ und } \left(w = 0 \text{ oder } \xi_1 \in \Upsilon \left[\frac{a}{w}\mathbf{1}_{[-1, \tau)}, \frac{b}{w}\mathbf{1}_{[-1, \tau)} \right] \right) \\ &\quad \text{und } \left(w = 1 \text{ oder } \xi_2 \in \Upsilon \left[\frac{a}{1-w}\mathbf{1}_{[\tau, 1]}, \frac{b}{1-w}\mathbf{1}_{[\tau, 1]} \right] \right). \end{aligned}$$

Seien

$$\begin{aligned} f_1(x) &= (\mathbf{1}_{[-1, \tau)}(x), (x - \tau)^-, \dots, ((x - \tau)^-)^{k/2-1})^\top, \quad x \in \mathcal{E} = [-1, 1], \\ f_2(x) &= (\mathbf{1}_{[\tau, 1]}(x), (x - \tau)^+, \dots, ((x - \tau)^+)^{k/2-1})^\top, \quad x \in \mathcal{E} = [-1, 1], \end{aligned}$$

und $M_i(\xi) = \int_{\mathcal{E}} f_i f_i^\top d\xi \in \mathbb{R}^{k/2 \times k/2}$, ξ endliches Maß.

a) Sei ξ gemäß (5.4) dargestellt. Wir haben

$$(\mathbf{c}^\top M(\xi)^- \mathbf{c})^{-1} = (\mathbf{c}_1^\top M_1(w\xi_1)^- \mathbf{c}_1)^{-1}$$

mit $w \frac{d\xi_1}{d\lambda} \leq b\mathbf{1}_{[-1, \tau)}$. Damit $(\mathbf{c}_1^\top M_1(w\xi_1)^- \mathbf{c}_1)^{-1}$ so groß wie möglich wird, muss w so groß wie möglich sein, also $w = w_o$. Ist ξ \mathbf{c} -optimal im vollen Change-Point-Modell, so folgt wegen

$$(\mathbf{c}^\top M(\xi)^- \mathbf{c})^{-1} = w_o (\mathbf{c}_1^\top M_1(\xi_1)^- \mathbf{c}_1)^{-1},$$

dass ξ_1 \mathbf{c}_1 -optimal für die Polynomregression zum Grad $k/2 - 1$ von ξ_1 .

b) Analog zu a).

c) Sei ξ gemäß (5.4) dargestellt. Wegen $\mathbf{c} \in [M(\xi)]$ folgt $w \in (0, 1)$. Es gilt

$$\begin{aligned} (\mathbf{c}^\top M(\xi)^- \mathbf{c})^{-1} &= (\mathbf{c}^\top M(w\xi_1 + (1-w)\xi_2)^- \mathbf{c})^{-1} \\ &= \left(\frac{1}{w} \mathbf{c}_1^\top M_1(\xi_1)^- \mathbf{c}_1 + \frac{1}{1-w} \mathbf{c}_2^\top M_2(\xi_2)^- \mathbf{c}_2 \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Aus der Optimalität von ξ folgt, dass $\eta \mapsto \mathbf{c}^\top M(\eta)^- \mathbf{c}$, $\eta \in \Upsilon[a, b]$ minimal für $\eta = \xi$ ist. Daher folgt, dass $\eta_i \mapsto \mathbf{c}_i^\top M_i(\eta_i)^- \mathbf{c}_i$ minimal für $\eta_i = \xi_i$ ist ($i = 1, 2$).

d) Sei ξ gemäß (5.4) dargestellt. Die Determinante von $M(\xi)$ zerfällt in zwei Teildeterminanten:

$$\det(M(\xi)) = w^{k/2} \det(M_1(\xi_1)) \cdot (1-w)^{k/2} \det(M_2(\xi_2)).$$

Aus der Optimalität von ξ folgt, dass $\eta \mapsto \det M(\eta)$, $\eta \in \Upsilon[a, b]$, maximal für $\eta = \xi$ ist. Daher folgt $w \in (0, 1)$ und $\eta_i \mapsto \det M_i(\eta_i)$ ist maximal für $\eta_i = \xi_i$ ($i = 1, 2$). \square

Im nachfolgenden Korollar betrachten wir speziell konstante Schranken $a \equiv \alpha, b \equiv \beta$. Weiter transformieren wir die beiden Teilbereiche $[-1, \tau), [\tau, 1]$ jeweils auf ganz $[-1, 1]$. Bei der \mathbf{c} -Optimalität interessieren wir uns hier speziell für $\mathbf{c} = \mathbf{e}_{k/2}$, $\mathbf{c} = \mathbf{e}_k$, $\mathbf{c} = \mathbf{e}_k - \mathbf{e}_{k/2}$.

Sei $\mathbf{e}_{k/2}^{(k/2)} = (0, \dots, 0, 1)^\top \in \mathbb{R}^{k/2}$ der letzte Einheitsvektor in $\mathbb{R}^{k/2}$.

Korollar 5.4 Sei das volle Change-Point-Modell (5.2) mit $k \geq 4$, k gerade, $\tau \in (-1, 1)$ gegeben und sei $a \equiv \alpha, b \equiv \beta < \infty$. Die affinen Transformationen V_1, V_2 seien

$$\begin{aligned} V_1 : [-1, \tau] &\rightarrow [-1, 1], & x &\mapsto \frac{2}{1+\tau}x + \frac{1-\tau}{1+\tau}, \\ V_2 : [\tau, 1] &\rightarrow [-1, 1], & x &\mapsto \frac{2}{1-\tau}x - \frac{1+\tau}{1-\tau}. \end{aligned}$$

Seien $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2 \in \mathbb{R}^{k/2} \setminus \{\mathbf{0}_{k/2}\}$ und

$$w_u := \max \left\{ \frac{\alpha(1+\tau)}{2}, 1 - \frac{\beta(1-\tau)}{2} \right\} \in [0, 1), \quad w_o := \min \left\{ \frac{\beta(1+\tau)}{2}, 1 - \frac{\alpha(1-\tau)}{2} \right\} \in (0, 1].$$

a) Sei ξ ein $\mathbf{e}_{k/2}$ -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b] \cap \mathcal{S}(\mathbf{e}_{k/2})$ für das volle Change-Point-Modell. Dann gilt $\xi([-1, \tau)) = w_o$ und das Bildmaß von $\frac{1}{w_o} \xi|_{[-1, \tau)}$ unter der Abbildung V_1 ist ein $\mathbf{e}_{k/2}^{(k/2)}$ -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{(1+\tau)\alpha}{2w_o}, \frac{(1+\tau)\beta}{2w_o} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.

b) Sei ξ ein \mathbf{e}_k -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b] \cap \mathcal{S}(\mathbf{e}_k)$ für das volle Change-Point-Modell. Dann gilt $\xi([-1, \tau)) = w_u$ und das Bildmaß von $\frac{1}{1-w_u} \xi|_{[\tau, 1]}$ unter der Abbildung V_2 ist ein

$\mathbf{e}_{k/2}^{(k/2)}$ -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{(1-\tau)\alpha}{2(1-w_u)}, \frac{(1-\tau)\beta}{2(1-w_u)} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.

c) Sei $\mathbf{c} = \mathbf{e}_k - \mathbf{e}_{k/2}$ und ξ ein \mathbf{c} -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b] \cap \mathcal{S}(\mathbf{c})$ für das volle Change-Point-Modell.

Dann gilt $w := \xi([-1, \tau]) \in [w_u, w_o] \cap (0, 1)$ und das Bildmaß von $\frac{1}{w}\xi|_{[-1, \tau]}$ unter der Abbildung V_1 ist ein $\mathbf{e}_{k/2}^{(k/2)}$ -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{(1+\tau)\alpha}{2w}, \frac{(1+\tau)\beta}{2w} \right]$, das Bildmaß von $\frac{1}{1-w}\xi|_{[\tau, 1]}$ unter der Abbildung V_2 ist ein $\mathbf{e}_{k/2}^{(k/2)}$ -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{(1-\tau)\alpha}{2(1-w)}, \frac{(1-\tau)\beta}{2(1-w)} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.

d) Sei ξ ein D -optimaler Versuchsplan in $\Upsilon[a, b]$ für das volle Change-Point-Modell.

Dann gilt $w := \xi([-1, \tau]) \in [w_u, w_o] \cap (0, 1)$ und das Bildmaß von $\frac{1}{w}\xi|_{[-1, \tau]}$ unter der Abbildung V_1 ist der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{(1+\tau)\alpha}{2w}, \frac{(1+\tau)\beta}{2w} \right]$, das Bildmaß von $\frac{1}{1-w}\xi|_{[\tau, 1]}$ unter der Abbildung V_2 ist der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon \left[\frac{(1-\tau)\alpha}{2(1-w)}, \frac{(1-\tau)\beta}{2(1-w)} \right]$ für die Polynomregression vom Grad $k/2 - 1$ auf $[-1, 1]$.

Beweis: Seien $\xi_1, \xi_2 \in \Xi$ mit $\text{eSupp}(\xi_1) \subseteq [-1, \tau)$, $\text{eSupp}(\xi_2) \subseteq [\tau, 1]$ und $\tilde{\xi}_i$ das Bildmaß von ξ_i unter der Abbildung V_i . Die Behauptungen folgen aus Satz 5.3 wegen

$$\begin{aligned} \forall x \in [-1, \tau) : \frac{\alpha}{w} \leq \frac{d\xi_1}{d\tilde{\lambda}}(x) \leq \frac{\beta}{w} &\iff \forall x \in [-1, 1] : \frac{(1+\tau)\alpha}{2w} \leq \frac{d\tilde{\xi}_1}{d\tilde{\lambda}}(x) \leq \frac{(1+\tau)\beta}{2w}, \\ \forall x \in [\tau, 1] : \frac{\alpha}{1-w} \leq \frac{d\xi_2}{d\tilde{\lambda}}(x) \leq \frac{\beta}{1-w} &\iff \forall x \in [-1, 1] : \frac{(1-\tau)\alpha}{2(1-w)} \leq \frac{d\tilde{\xi}_2}{d\tilde{\lambda}}(x) \leq \frac{(1-\tau)\beta}{2(1-w)} \end{aligned}$$

und Bemerkung 4.1. □

Betrachtet man statt dem vollen Change-Point-Modell f mit (5.2) das umparametrisierte Modell g mit (5.3), so macht Korollar 5.4 c) eine Aussage über die \mathbf{e}_k -Optimalität in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ im Modell g mit (5.3).

Beispiel 5.5 Sei

$$f(x) = (\mathbf{1}_{[-1, \tau)}(x), (x - \tau)^-, \mathbf{1}_{[\tau, 1]}(x), (x - \tau)^+)^T, \quad x \in \mathcal{E} = [-1, 1], \quad (5.5)$$

also das volle Change-Point-Modell (5.2) mit $k = 4$. Der \mathbf{e}_2 - und der D -optimale Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ für die Geradenregression ist nach Satz 4.24 gegeben durch

$$\tilde{\xi} = \beta \tilde{\lambda} - (\beta - \alpha) \mathbf{1}_{(-\gamma, \gamma)} \cdot \tilde{\lambda}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{\beta-\alpha}$. Sei $\mathbf{c} = \mathbf{e}_4 - \mathbf{e}_2$. Die \mathbf{c} - und D -optimalen Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ für das Modell (5.5) haben nach Korollar 5.4 die Gestalt

$$\xi = \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{((\tau-1)/2-\gamma_1, (\tau-1)/2+\gamma_1) \cup ((\tau+1)/2-\gamma_2, (\tau+1)/2+\gamma_2)} \cdot \tilde{\lambda}$$

mit γ_1, γ_2 so, dass $\gamma_1 + \gamma_2 = \frac{\beta-1}{\beta-\alpha}$.

Aus Symmetrie-Gründen können wir den \mathbf{c} - und D -optimalen Versuchsplan in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ für $\tau = 0$ explizit angeben. Es ist für beide Optimalitätskriterien:

$$\xi = \beta\tilde{\lambda} - (\beta - \alpha)\mathbf{1}_{((\tau-1)/2-\gamma, (\tau-1)/2+\gamma) \cup ((\tau+1)/2-\gamma, (\tau+1)/2+\gamma)} \cdot \tilde{\lambda}$$

mit $\gamma = \frac{\beta-1}{2(\beta-\alpha)}$.

Es bleibt, noch im Falle $\tau \neq 0$ den Parameter γ_1 zu bestimmen. Dazu benötigen wir

$$\begin{aligned} m_{10} &:= \int_{-1}^1 \mathbf{1}_{[-1, \tau)} d\xi = \frac{\beta(1+\tau)}{2} - (\beta - \alpha)\gamma_1, \\ m_{11} &:= \int_{-1}^1 (x - \tau)^- d\xi = -\frac{\beta(1+\tau)^2}{4} + \frac{(\beta - \alpha)(1+\tau)\gamma_1}{2}, \\ m_{12} &:= \int_{-1}^1 ((x - \tau)^-)^2 d\xi = \frac{\beta(1+\tau)^3}{6} - \frac{(\beta - \alpha)(1+\tau)^2\gamma_1}{4} - \frac{(\beta - \alpha)\gamma_1^3}{3}, \\ m_{20} &:= \int_{-1}^1 \mathbf{1}_{[\tau, 1]} d\xi = \frac{\beta(1-\tau)}{2} - (\beta - \alpha)\gamma_2, \\ m_{21} &:= \int_{-1}^1 (x - \tau)^+ d\xi = \frac{\beta(1-\tau)^2}{4} - \frac{(\beta - \alpha)(1-\tau)\gamma_2}{2}, \\ m_{22} &:= \int_{-1}^1 ((x - \tau)^+)^2 d\xi = \frac{\beta(1-\tau)^3}{6} - \frac{(\beta - \alpha)(1-\tau)^2\gamma_2}{4} - \frac{(\beta - \alpha)\gamma_2^3}{3}. \end{aligned}$$

Damit kann man

$$\begin{aligned} (\mathbf{c}^\top M(\xi)^{-1} \mathbf{c})^{-1} &= (\mathbf{e}_2^\top M_1(w\xi_1)^{-1} \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2^\top M_2((1-w)\xi_2)^{-1} \mathbf{e}_2)^{-1} \\ &= \left(\frac{m_{10}}{m_{10}m_{12} - m_{11}^2} + \frac{m_{20}}{m_{20}m_{22} - m_{21}^2} \right)^{-1} \end{aligned}$$

und

$$\det M(\xi) = \det \begin{pmatrix} m_{10} & m_{11} & 0 & 0 \\ m_{11} & m_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{20} & m_{21} \\ 0 & 0 & m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} m_{10} & m_{11} \\ m_{11} & m_{12} \end{pmatrix} \cdot \det \begin{pmatrix} m_{20} & m_{21} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

ausrechnen und das γ_1 , das den jeweiligen Ausdruck maximiert, zumindest numerisch bestimmen.

Dabei ist wegen $w := \xi([-1, \tau)) = m_{10}$ die Einschränkung $w \in [w_u, w_o]$ äquivalent zu

$$\gamma_1 \in \left[\frac{(1+\tau)\beta}{2(\beta-\alpha)} - \frac{w_o}{\beta-\alpha}, \frac{(1+\tau)\beta}{2(\beta-\alpha)} - \frac{w_u}{\beta-\alpha} \right].$$

α	β	τ	c-Optimalität					D-Optimalität				
			γ_1	c_1	c_2	c_3	c_4	γ_1	c_1	c_2	c_3	c_4
0	1.25	-0.8	0.0003	-0.900	-0.900	-0.100	0.300	0	-	-	-0.1	0.3
0	1.25	-0.4	0.0148	-0.715	-0.685	0.115	0.485	0	-	-	0.1	0.5
0	2	-0.8	0.0008	-0.901	-0.899	-0.399	0.599	0	-	-	-0.4	0.6
0	2	-0.4	0.0484	-0.748	-0.652	-0.152	0.752	0.0841	-0.784	-0.616	-0.116	0.716
0	5	-0.8	0.0036	-0.904	-0.896	-0.696	0.896	0.0241	-0.924	-0.876	-0.676	0.876
0	5	-0.4	0.1648	-0.865	-0.535	-0.335	0.935	0.2054	-0.905	-0.495	-0.295	0.895
0.5	1.25	-0.8	0.0005	-0.900	-0.900	-0.233	0.433	0	-	-	-0.233	0.433
0.5	1.25	-0.4	0.0255	-0.726	-0.674	-0.008	0.608	0	-	-	-0.033	0.633
0.5	2	-0.8	0.0013	-0.901	-0.899	-0.565	0.765	0	-	-	-0.567	0.767
0.5	2	-0.4	0.0810	-0.781	-0.619	-0.286	0.886	0.1327	-0.833	-0.567	-0.234	0.834
0.5	5	-0.8	0.0078	-0.908	-0.892	-0.781	0.981	0.0382	-0.938	-0.862	-0.751	0.951
0.5	5	-0.4	0.2095	-0.909	-0.491	-0.379	0.979	0.2365	-0.936	-0.464	-0.352	0.952
0.9	1.25	-0.8	0.0011	-0.901	-0.899	-0.613	0.813	0	-	-	-0.614	0.814
0.9	1.25	-0.4	0.0655	-0.766	-0.634	-0.349	0.949	0.1244	-0.824	-0.576	-0.290	0.890
0.9	2	-0.8	0.0091	-0.909	-0.891	-0.8	1	0.0091	-0.909	-0.891	-0.8	1
0.9	2	-0.4	0.2091	-0.909	-0.491	-0.4	1	0.2166	-0.917	-0.483	-0.392	0.992
0.9	5	-0.8	0.0756	-0.976	-0.824	-0.8	1	0.0756	-0.976	-0.824	-0.8	1
0.9	5	-0.4	0.2756	-0.976	-0.424	-0.4	1	0.2756	-0.976	-0.424	-0.4	1

Tabelle 5.1: WERTE γ_1 UND $c_1 = (\tau - 1)/2 - \gamma_1, c_2 = (\tau - 1)/2 + \gamma_1, c_3 = (\tau + 1)/2 - \gamma_2, c_4 = (\tau + 1)/2 + \gamma_2$ DES **c**- UND **D**-OPTIMALEN VERSUCHSPLANS IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR DIE VOLLE CHANGE-POINT-REGRESSION

Für die Werte $\alpha \in \{0, 0.5, 0.9\}, \beta \in \{1.25, 2, 5\}$ und $\tau \in \{-0.8, -0.4\}$ ist γ_1 sowohl für die **c**-Optimalität mit $\mathbf{c} = \mathbf{e}_4 - \mathbf{e}_2$ als auch für die **D**-Optimalität in Tabelle 5.1 berechnet. Ebenso sind die Grenzen $c_1 = (\tau - 1)/2 - \gamma_1, c_2 = (\tau - 1)/2 + \gamma_1, c_3 = (\tau + 1)/2 - \gamma_2, c_4 = (\tau + 1)/2 + \gamma_2$ der Bereiche mit maximaler Masse β angegeben.

Wie bereits am Anfang dieses Kapitels beschrieben, können wir auch das umparametrisierte Modell

$$g(x) = (1, x - \tau, -\mathbf{1}_{[-1, \tau)}(x) + \mathbf{1}_{[\tau, 1]}(x), |x - \tau|)^T, \quad x \in \mathcal{E} = [-1, 1], \quad (5.6)$$

betrachten. Die angegebenen **D**-optimalen Versuchspläne sind auch **D**-optimal für dieses Modell. Die angegebenen **c**-optimalen Versuchspläne sind \mathbf{e}_4 -optimal für dieses umparametrisierte Modell.

Wie bei der \mathbf{e}_k -Optimalität für die Polynomregression in Kapitel 4 können wir auch die \mathbf{e}_4 -optimalen Versuchspläne für das Modell (5.6) grafisch veranschaulichen, indem wir die Funktion $g_4(x) = |x - \tau|$ in $L^2(\xi)$ auf $[g_1, g_2, g_3]$ projizieren. In Abbildung 5.4 sind für $(\alpha, \beta) \in \{(0, 1.25), (0.5, 2), (0.9, 5)\}$ und $\tau = -0.4$ die \mathbf{e}_4 -optimalen Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ für das Modell g mit (5.6) (d.h. die \mathbf{c} -optimalen Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \beta]$ für das Modell f mit (5.5)) grafisch veranschaulicht. Die Abbildung 5.5 zeigt entsprechend die D -optimalen Versuchspläne in $\Upsilon[\alpha, \beta]$.

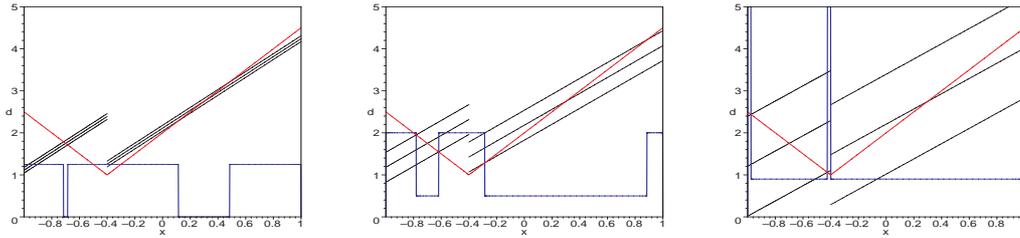


Abbildung 5.4: VOLLE CHANGE-POINT-REGRESSION MIT $k = 4$: $\tilde{\lambda}$ -DICHTE (BLAU) DES $(\mathbf{e}_4 - \mathbf{e}_2)$ -OPTIMALEN VERSUCHSPANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR $\tau = -0.4$ UND $\alpha = 0, \beta = 1.25$ (LINKS), $\alpha = 0.5, \beta = 2$ (MITTE), $\alpha = 0.9, \beta = 5$ (RECHTS); FUNKTION $g_4(x) = f_4(x) - f_2(x) = |x - \tau|$ (ROT; ZUR BESSEREN DARSTELLUNG MIT $5/2$ MULTIPLIZIERT UND UM 1 NACH OBEN VERSCHOBEN), $\text{pr}_{[g_1, g_2, g_3]}^{L^2(\xi^*)} g_4$ (DÜNN SCHWARZ) UND DIE BEIDEN FUNKTIONEN $\text{pr}_{[g_1, g_2, g_3]}^{L^2(\xi^*)} g_4 \pm \text{const}$, DIE DEN OPTIMALEN VERSUCHSPAN BESTIMMEN (FETT SCHWARZ)

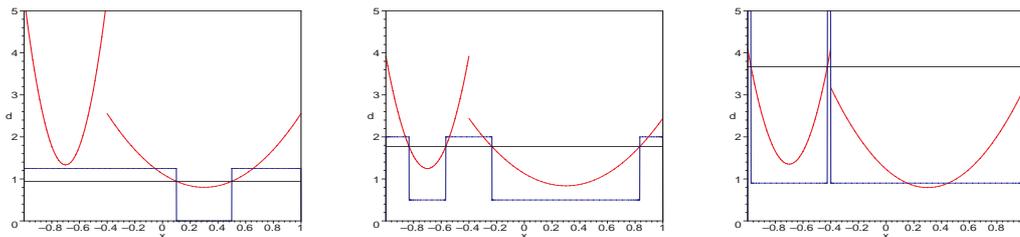


Abbildung 5.5: VOLLE CHANGE-POINT-REGRESSION MIT $k = 4$: $\tilde{\lambda}$ -DICHTE (BLAU) DES D -OPTIMALEN VERSUCHSPANS ξ^* IN $\Upsilon[\alpha, \beta]$ FÜR $\tau = -0.4$ UND $\alpha = 0, \beta = 1.25$ (LINKS), $\alpha = 0.5, \beta = 2$ (MITTE), $\alpha = 0.9, \beta = 5$ (RECHTS); VARIANZFUNKTION $d(x, \xi^*)$ (ROT; ZUR BESSEREN DARSTELLUNG MIT $1/2$ MULTIPLIZIERT) UND DIE KONSTANTE, DIE DEN OPTIMALEN VERSUCHSPAN BESTIMMEN (FETT SCHWARZ)

Kapitel 6

Ein Anwendungsbeispiel

In einem Versuch soll die Auswirkung von Blumendünger auf das Keimen und das Wachstum von Gartenkresse (*Lepidium sativum*) untersucht werden. Hierzu soll der mittlere Kresse-Ertrag fünfeinhalb Tage nach Aussaat in Abhängigkeit von der Düngerkonzentration im Gießwasser bestimmt werden. Von Interesse ist dabei der Bereich von 0 bis 1.2% Düngeranteil im Gießwasser.

Wir säen in insgesamt $n \in \mathbb{N}$ Pflanz-Schalen jeweils zehn Kressesamen aus. Die Schale Nummer i ($1 \leq i \leq n$) gießen wir mit der Düngerkonzentration $x_i \in [0, 1.2]$ (in % Dünger) und messen nach fünfeinhalb Tagen den Gesamtertrag Y_i an Kresse (in mg).

Aufgrund von Vorversuchen geht man davon aus, dass eine quadratische Regressionsfunktion den Zusammenhang zwischen Düngerkonzentration und mittlerem Kresse-Ertrag hinreichend genau beschreibt. Wir nehmen daher das lineare Modell

$$Y_i = \theta_1 + x_i\theta_2 + x_i^2\theta_3 + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (6.1)$$

an, wobei ε_i unabhängig identisch verteilt mit $E\varepsilon_i = 0$, $V(\varepsilon_i) = \sigma^2$ und die Parameter $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \sigma^2$ unbekannt seien.

Das Hauptziel der Untersuchung ist eine möglichst gute Schätzung des Parametervektors $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)^\top$. $\boldsymbol{\theta}$ soll mit dem Kleinste-Quadrate-Schätzer $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ geschätzt werden. Die Versuchspunkte x_i sollen so gewählt werden, dass die Determinante der Kovarianzmatrix des Kleinste-Quadrate-Schätzers $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ möglichst klein ist, d.h. es soll ein D -optimaler Versuchsplan verwendet werden.

Die Vorversuche haben unter etwas anderen Bedingungen stattgefunden, z.B. viereinhalb statt fünfeinhalb Tage Wachstumszeit, unkontrollierbare Unterschiede bei Temperatur und Lichteinstrah-



Abbildung 6.1: GESÄTE GARTENKRESSE

lung, fünfzehn statt zehn Samen pro Schale, Gießwasserzuführung anders. Daher will man mit wenigstens einem Drittel der Versuche kontrollieren, ob das Lineare Modell (6.1) den Zusammenhang zwischen Dünger und Ertrag auch unter diesen Bedingungen hinreichend genau beschreibt.

Wir suchen also den D -optimalen Versuchsplan für quadratische Regression in der Menge $\Upsilon[\alpha, \infty]$ mit $\alpha = 1/3$. Nach Beispiel 4.18 und linearer Transformation von $[-1, 1]$ auf $[0, 1.2]$ ist dieser gegeben durch

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1}{3} \cdot \tilde{\lambda} + \frac{10 + \sqrt{195}}{90} \cdot \delta_0 + \frac{20 - \sqrt{195}}{45} \cdot \delta_{0.6} + \frac{10 + \sqrt{195}}{90} \cdot \delta_{1.2} \\ &\approx 0.333 \cdot \tilde{\lambda} + 0.266 \cdot \delta_0 + 0.134 \cdot \delta_{0.6} + 0.266 \cdot \delta_{1.2}. \end{aligned}$$

Die zu ξ gehörende Verteilungsfunktion ist

$$F_0(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \frac{10 + \sqrt{195}}{90} + \frac{5}{18} \cdot x, & x \in [0, 0.6), \\ \frac{50 - \sqrt{195}}{90} + \frac{5}{18} \cdot x, & x \in [0.6, 1.2), \\ 1, & x \geq 1.2. \end{cases}$$

Für den Versuch haben wir $n = 81$ Pflanz-Schalen zur Verfügung. Wir müssen also nun einen Versuchsplan $\xi_{81} \in \Xi_{81}$ bestimmen, der ξ möglichst nahe kommt. Dazu verwenden wir das Verfahren (2.7) aus Kapitel 2. Wir bestimmen zunächst die Umkehrfunktion Q_0 zur Verteilungsfunktion F_0 . Diese ist gegeben durch

$$Q_0(x) = \begin{cases} 0, & x < \frac{10+\sqrt{195}}{90}, \\ -\frac{10+\sqrt{195}}{25} + \frac{18}{5} \cdot x, & x \in \left[\frac{10+\sqrt{195}}{90}, \frac{25+\sqrt{195}}{90} \right), \\ 0.6, & x \in \left[\frac{25+\sqrt{195}}{90}, \frac{65-\sqrt{195}}{90} \right), \\ -\frac{50-\sqrt{195}}{25} + \frac{18}{5} \cdot x, & x \in \left[\frac{65-\sqrt{195}}{90}, \frac{80-\sqrt{195}}{90} \right), \\ 1.2, & x \geq \frac{80-\sqrt{195}}{90}. \end{cases}$$

Die Versuchspunkte x_i von $\xi_{81} = \frac{1}{81} \sum_{i=1}^{81} \delta_{x_i}$ sind dann

$$x_i = Q_0\left(\frac{i-1}{81-1}\right), \quad i = 1, \dots, 81.$$

Es ergibt sich:

$$x_i = \begin{cases} 0, & i = 1, \dots, 22, \\ \frac{9i-89-8\sqrt{195}}{200}, & i = 23, \dots, 35, \\ 0.6, & i = 36, \dots, 46, \\ \frac{9i-409+8\sqrt{195}}{200}, & i = 47, \dots, 59, \\ 1.2, & i = 60, \dots, 81. \end{cases}$$

Die Ergebnisse des Gartenkresse-Versuchs sind in Tabelle 6.1 aufgelistet. In Abbildung 6.2 sind die Ergebnisse geplottet und die geschätzte Regressionsfunktion ist eingezeichnet. Sie ist

$$y = 201.61 - 55.46 \cdot x - 13.2 \cdot x^2, \quad x = \text{Dünger in } \%, y = \text{Ertrag in } mg.$$

Wir haben unsere Versuchspunkte so gewählt, dass die Modellvoraussetzung der quadratischen Regression überprüft werden kann. Als Test für die Hypothese

$$H_0 : \text{Es liegt ein quadratisches Regressionsmodell vor}$$

wählen wir den F -Test, den wir verwenden können, da wir jeweils etliche Beobachtungen an den Stellen $x = 0, x = 0.6, x = 1.2$ haben. Wie bereits in Abschnitt 3.1.1 angegeben ist die Teststatistik

$$LT_2 = \frac{n-d}{d-k} \frac{\|\text{pr}_{U_0^\perp \cap U} Y\|^2}{\|\text{pr}_{U^\perp} Y\|^2},$$

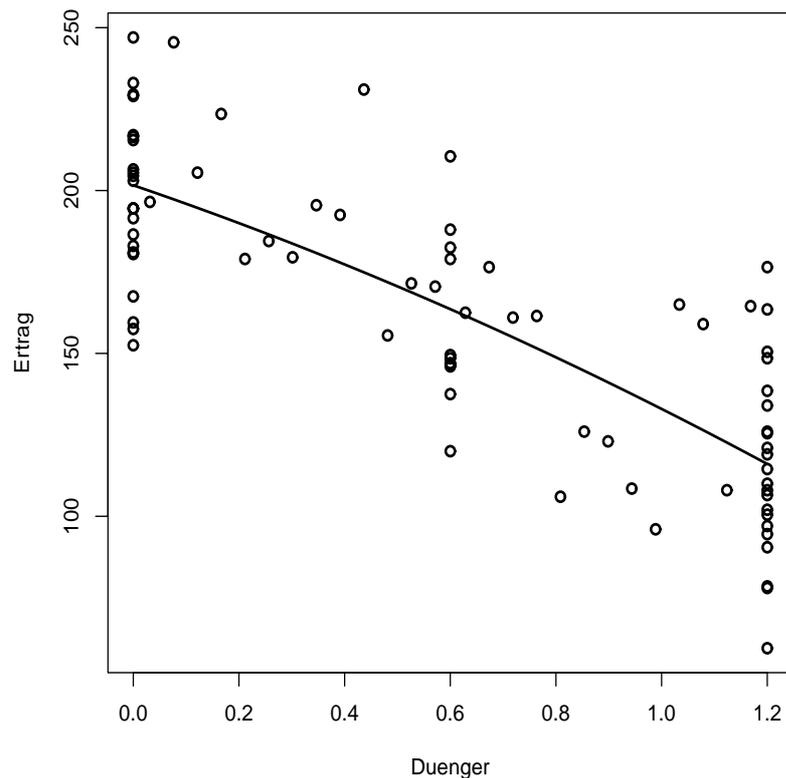


Abbildung 6.2: ERGEBNISSE DES GARTENKRESSE-VERSUCHS UND GESCHÄTZTE REGRESSIONSFUNKTION

wobei U_0 der Unterraum von \mathbb{R}^n ist, der von den Vektoren $(f_j(x_i))_{i=1,\dots,n}, j = 1, \dots, k$ erzeugt wird, U der Unterraum von \mathbb{R}^n , der von den Vektoren $(\mathbf{1}_{\{x_i\}}(x))_{i=1,\dots,n}, x \in \mathcal{E}$ erzeugt wird und $d = \dim(U)$. Setzen wir unsere Daten ein, erhalten wir

$$LT_2 = \frac{81 - 29}{29 - 3} \cdot \frac{17689.26}{38380.11} \approx 0.9218.$$

Wir nehmen an, dass die Fehler näherungsweise normalverteilt sind. Unter Normalverteilungsannahme und unter H_0 hat die Statistik LT_2 eine F -Verteilung mit Freiheitsgraden $d - k = 26$ und $n - d = 52$. Dieser F -Test hat damit einen p -Wert von 0.579. Die Hypothese der quadratischen Regression kann also zu keinem vernünftigen Niveau abgelehnt werden.

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Dünger x_i	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Ertrag Y_i	215.5	233.0	203.0	159.5	181.0	229.0	180.5	194.5	229.5	217.0
i	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Dünger x_i	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Ertrag Y_i	194.5	191.5	183.0	206.5	216.5	167.5	152.5	247.0	205.5	157.5
i	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Dünger x_i	0.000	0.000	0.031	0.076	0.121	0.166	0.211	0.256	0.301	0.346
Ertrag Y_i	204.5	186.5	196.5	245.5	205.5	223.5	179.0	184.5	179.5	195.5
i	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
Dünger x_i	0.391	0.436	0.481	0.526	0.571	0.600	0.600	0.600	0.600	0.600
Ertrag Y_i	192.5	231.0	155.5	171.5	170.5	146.5	146.0	147.0	149.5	210.5
i	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
Dünger x_i	0.600	0.600	0.600	0.600	0.600	0.600	0.629	0.674	0.719	0.764
Ertrag Y_i	179.0	188.0	148.5	137.5	182.5	120.0	162.5	176.5	161.0	161.5
i	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
Dünger x_i	0.809	0.854	0.899	0.944	0.989	1.034	1.079	1.124	1.169	1.200
Ertrag Y_i	106.0	126.0	123.0	108.5	96.0	165.0	159.0	108.0	164.5	163.5
i	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
Dünger x_i	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200
Ertrag Y_i	114.5	102.0	148.5	126.0	119.0	100.5	150.5	78.0	134.0	121.0
i	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
Dünger x_i	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200	1.200
Ertrag Y_i	176.5	90.5	108.0	59.5	97.0	138.5	94.5	106.5	110.0	125.5
i	81									
Dünger x_i	1.200									
Ertrag Y_i	78.5									

Tabelle 6.1: ERGEBNISSE DES GARTENKRESSE-VERSUCHS (DÜNGERANTEIL IM GIESSWASSER IN %, ERTRAG IN mg)



Abbildung 6.3: KEIMENDE GARTENKRESSE



Abbildung 6.4: GARTENKRESSE VOR DER ERNTE

Anhang A

Tschebyschev-Polynome

Im Folgenden werden die Definition und später benötigte Aussagen zu Tschebyschev-Polynomen zusammengestellt. Umfassende Darstellungen von Tschebyschev-Polynomen und ihre Eigenschaften finden sich z.B. in Rivlin (1990).

Definition A.1 (*Tschebyschev-Polynom*) Das Tschebyschev-Polynom vom Grad $n \in \mathbb{N}$ ist definiert durch

$$T_n(x) := \cos(n \arccos(x)), \quad x \in [-1, 1].$$

Die Tschebyschev-Polynome bis zum Grad 5 sind in Tabelle A.1 angegeben, siehe auch die Tabelle in Pukelsheim (1993), Seite 226. In Abbildung A.1 sind sie skizziert.

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1, \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x, \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \\ T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x \end{aligned}$$

Tabelle A.1: TSCHEBYSCHEV-POLYNOME $T_n, n = 0, 1, \dots, 5$

Lemma A.2 (*Eigenschaften von Tschebyschev-Polynomen*) Tschebyschev-Polynome haben folgende Eigenschaften:

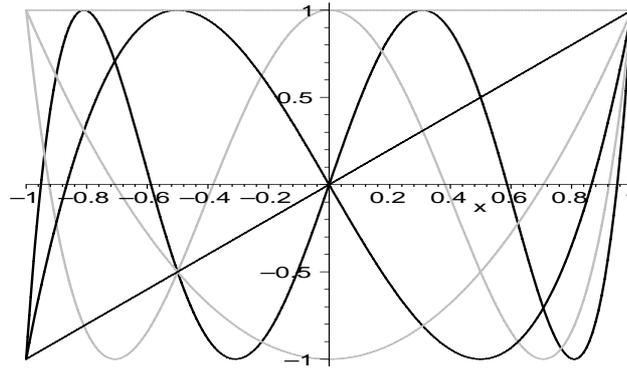


Abbildung A.1: TSCHEBYSCHEV-POLYNOME $T_n, n = 0, 1, \dots, 5$ (GRAU FÜR n GERADE, SCHWARZ FÜR n UNGERADE)

a) Tschebyschev-Polynome sind orthogonal in $L^2(1/\sqrt{1-x^2} \cdot \lambda)$:

$$\int_{-1}^1 T_m(x) \cdot T_n(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \quad \text{für } n, m \in \mathbb{N}, n \neq m. \quad (\text{A.1})$$

b) Es gilt

$$\int_{-1}^1 T_n(x)^2 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} \pi, & n = 0, \\ \frac{\pi}{2}, & n > 0. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

c) Symmetrie:

$$T_{2n}(x) = T_{2n}(-x), \quad T_{2n-1}(x) = -T_{2n-1}(-x), \quad n \in \mathbb{N}.$$

d) Koeffizienten:

$$T_n(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^j \frac{n}{n-j} \binom{n-j}{j} 2^{n-2j-1} x^{n-2j}. \quad (\text{A.3})$$

e) Die Nullstellen von $T_n(x)$ sind

$$\cos\left(\frac{(2n-1-2j)\pi}{2n}\right), \quad j = 0, \dots, n-1.$$

Die Extremalstellen sind

$$x_j := \cos\left(\frac{(n-j)\pi}{n}\right), \quad j = 0, \dots, n$$

und $T_n(x_j) = (-1)^{n-j}$.

f) Für $m, n \in \mathbb{N}$ gilt

$$T_m(x)T_n(x) = \frac{1}{2}(T_{m+n}(x) + T_{|m-n|}(x)), \quad x \in [-1, 1]. \quad (\text{A.4})$$

g) Für $n \geq 2$ gilt

$$\int_c^d T_n(x) dx = \frac{1}{2} \left[\frac{T_{n+1}(x)}{n+1} - \frac{T_{n-1}(x)}{n-1} \right]_c^d. \quad (\text{A.5})$$

h) Für die Lagrange-Polynom $L_i^{(n)}(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$, $0 \leq i \leq n$, $n \in \mathbb{N}$ mit den Stützstellen x_j aus e) gilt:

$$L_i^{(n)}(x) = \frac{2}{n} \nu_i \sum_{j=0}^n \nu_j T_j(x_i) T_j(x) \quad (\text{A.6})$$

mit $\nu_j = 1/2$, falls $j \in \{0, n\}$, $\nu_j = 1$, sonst.

i) Diskrete Orthogonalität. Seien x_j wie in e) und sei $\nu_j = 1/2$, falls $j \in \{0, n\}$, $\nu_j = 1$, sonst.

Dann gilt für $i, m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$:

$$\sum_{j=0}^n \nu_j T_i(x_j) T_m(x_j) = \begin{cases} n, & \text{falls } i+m, |i-m| \in \{0, 2n, 4n, \dots\}, \\ n/2, & \text{falls entweder } i+m \in \{0, 2n, 4n, \dots\} \\ & \text{oder } |i-m| \in \{0, 2n, 4n, \dots\}, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Beweis: a) Siehe Rivlin (1990), Seite 35.

b) Siehe Rivlin (1990), Seite 35.

c) Siehe Rivlin (1990), Seite 5.

d) Siehe Rivlin (1990), Seite 37 (siehe auch Pukelsheim (1993), Seite 226f).

e) Siehe Rivlin (1990), Seite 6f.

f) Aufgabe 1.1.3 in Rivlin (1990).

g) Aufgabe 1.1.4 in Rivlin (1990).

h) Aufgabe 1.5.19 in Rivlin (1990).

i) Aufgabe 1.5.28 in Rivlin (1990). Für $0 \leq i, m \leq n-1$ ist der Beweis in Schwarz (1988), Seite 176, zu finden. □

Anhang B

Legendre-Polynome

Im Folgenden werden die Definition und später benötigte Aussagen zu Legendre-Polynomen zusammengestellt. Umfassende Darstellungen von Legendre-Polynomen und ihre Eigenschaften finden sich ebenso wie die Beweise der nachfolgenden Aussagen z.B. in Freud (1969), Szegö (1959) und Koepf (1998).

Definition B.1 (*Legendre-Polynom*) Das Legendre-Polynom vom Grad $n \in \mathbb{N}$ ist definiert durch (Rodriguessa Formel)

$$P_n(x) := \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(1-x^2)^n], \quad x \in [-1, 1].$$

Die Legendre-Polynome bis zum Grad 5 sind in Tabelle B.1 angegeben, siehe auch die Tabelle in Pukelsheim (1993), Seite 214. In Abbildung B.1 sind sie skizziert.

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \\ P_1(x) &= x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \\ P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \\ P_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x) \end{aligned}$$

Tabelle B.1: LEGENDRE-POLYNOME $P_n, n = 0, 1, \dots, 5$

Lemma B.2 (*Eigenschaften von Legendre-Polynomen*) Legendre-Polynome haben folgende Eigenschaften:

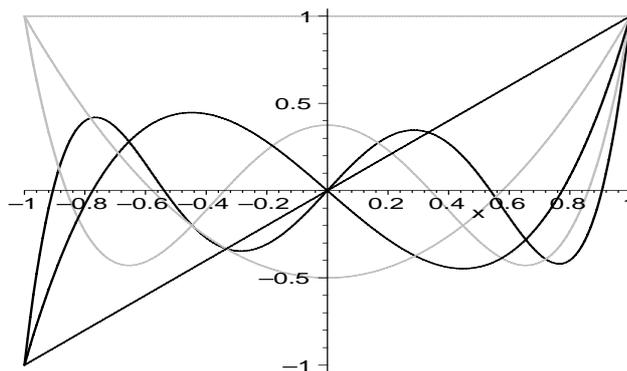


Abbildung B.1: LEGENDRE-POLYNOME $P_n, n = 0, 1, \dots, 5$ (GRAU FÜR n GERADE, SCHWARZ FÜR n UNGERADE)

a) Legendre-Polynome sind orthogonal in $L^2(\lambda)$:

$$\int_{-1}^1 P_m(x) \cdot P_n(x) dx = 0 \quad \text{für } n, m \in \mathbb{N}, n \neq m.$$

b) Für das Integral über $P_m \cdot P_n$ mit $m = n$ gilt

$$\int_{-1}^1 P_n(x)^2 dx = \frac{2}{2n+1}, \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\}. \quad (\text{B.1})$$

c) Symmetrie:

$$P_n(x) = (-1)^n P_n(-x), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.2})$$

d) Bestimmte Funktionswerte:

$$P_n(-1) = (-1)^n, \quad P_{2n}(0) = 0, \quad P_n(1) = 1, \quad |P_n(x)| < 1, \quad x \in (-1, 1), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.3})$$

Ableitungen an den Rändern:

$$P'_n(-1) = \frac{1}{2}(-1)^{n-1}n(n+1), \quad P'_n(1) = \frac{1}{2}n(n+1), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.4})$$

e) Koeffizienten:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{j=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^j \binom{n}{j} \binom{2n-2j}{n} x^{n-2j}. \quad (\text{B.5})$$

f) Die Nullstellen von $P_n(x)$ auf $(0, 1]$ liegen im Intervall

$$\left(\cos \left(\frac{2i}{2n+1} \pi \right), \cos \left(\frac{2i-1}{2n+1} \pi \right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor.$$

g) *Identitäten für Legendre-Polynome und ihre Ableitungen. Es gilt für alle $x \in [-1, 1]$:*

$$P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x) - (2n+1)P_n(x) = 0, \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{d}{dx}((1-x^2)P'_n(x)) + n(n+1)P_n(x) = 0, \quad (\text{B.7})$$

$$xP'_n(x) - P'_{n-1}(x) - nP_n(x) = 0, \quad (\text{B.8})$$

$$P'_n(x) - xP'_{n-1}(x) - nP_{n-1}(x) = 0, \quad (\text{B.9})$$

$$(1-x^2)P''_n(x) - 2xP'_n(x) + n(n+1)P_n(x) = 0, \quad (\text{B.10})$$

$$(1-x^2)P''_n(x) + (n-1)xP'_n(x) - (n+1)P'_{n-1}(x) = 0, \quad (\text{B.11})$$

$$(1-x^2)P''_{n-1}(x) - (n+1)xP'_{n-1}(x) + (n-1)P'_n(x) = 0, \quad (\text{B.12})$$

$$n(P_{n-1}(x) - xP_n(x)) - (1-x^2)P'_n(x) = 0, \quad (\text{B.13})$$

$$n(xP_{n-1}(x) - P_n(x)) - (1-x^2)P'_{n-1}(x) = 0. \quad (\text{B.14})$$

h) *Summen von Legendre-Polynomen:*

$$\sum_{j=0}^n (2j+1) \cdot P_j(x) = (n+1) \frac{P_n(x) - P_{n+1}(x)}{1-x}. \quad (\text{B.15})$$

i) *Für das Integral über $(P'_n)^2$ gilt*

$$\int_{-1}^1 P'_n(x)^2 dx = n(n+1), \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\}. \quad (\text{B.16})$$

Beweis: a) Siehe Freud (1969), Seite 39.

b) Siehe Freud (1969), Seite 39.

c) Siehe Szegö (1959), Seite 59.

d) Siehe Szegö (1959), Seite 58f, Formel (4.21.7) auf Seite 63 und Seite 162.

e) Siehe Koepf (1998), Seite 1 sowie nachfolgende Diskussion.

f) Siehe Szegö (1959), Seite 121.

g) In Szegö (1959) findet sich der Beweis von (B.7) auf Seite 61, von (B.6), (B.8) und (B.9) auf Seite 85, von (B.10) auf Seite 60f. Die Aussage (B.11) ergibt sich durch Kombination von (B.8) und (B.10), die Aussage (B.12) durch Kombination von (B.9) und (B.10), die Aussagen (B.13) und (B.14) durch Kombination von (B.8) und (B.9).

h) Siehe Szegö (1959), Seite 83, Formel (4.7.18).

i) Beweis durch vollständige Induktion.

Der Induktionsanfang für $n = 0$ und $n = 1$ ist klar.

Induktionsschritt ($n - 2 \rightarrow n$): Formel (B.6) impliziert

$$\int_{-1}^1 P_n'(x)^2 dx = \int_{-1}^1 P_{n-2}'(x)^2 dx + 2(2n-1) \int_{-1}^1 P_{n-2}'(x)P_{n-1}(x) dx + (2n-1)^2 \int_{-1}^1 P_{n-1}(x)^2 dx.$$

Da $P_{n-2}'(x)$ ein Polynom vom Grade $n-3$ ist und sich als Linearkombination von P_0, P_1, \dots, P_{n-3} darstellen lässt, folgt aus a), dass $\int_{-1}^1 P_{n-2}'(x)P_{n-1}(x) dx = 0$ ist. Mit der Induktionsvoraussetzung und Formel (B.1) erhalten wir

$$\int_{-1}^1 P_n'(x)^2 dx = (n-2)(n-1) + 2(2n-1) = n(n+1).$$

□

Symbolverzeichnis

$[\cdot]$	8	f	5, 10
$ \cdot $	63	$F_n(x)$	16
$\mathbf{0}_m$	8	$\mathcal{F}_{v,c}$	59
$\mathbf{1}_A(x)$	16	$\mathcal{G}(\xi, \mathbf{c})$	38
$\mathbf{1}_i$	73	I_m	9
a	67	K	7
α	72	k	5
\tilde{a}	72	$\text{Konv}(\mathcal{C})$	22
b	67	$L^2(\xi)$	39
$B(g, \xi)$	58	$L_i^{(m)}$	84, 147
$\mathcal{B} \mathcal{E}$	29	λ	27
β	109	λ^k	34
$c(x, \xi)$	20	$\tilde{\lambda}$	67
$c_k(x, \xi)$	93	LT_i	58
$C[\mathcal{E}]$	20	$M(\Xi)$	21
$d(x, \xi)$	13, 20	$M(\tilde{\Xi})$	21
$d_k(x, \xi)$	99	$M(\xi)$	7, 15
$d_k(x, y, \xi)$	93	$(y)^-$	131
δ_x	7	M^-	9
$\text{diag}(p_1, \dots, p_m)$	29	$\overline{\mathcal{M}}$	25
d/dx	101	n	5
$d\eta/d\lambda$	66	$NND(m)$	18
\mathcal{E}	5, 9	$O(\cdot)$	15
\mathbf{e}_j	39	P_m	46, 148
$\mathbf{e}_j^{(m)}$	134	$PD(m)$	11
$\text{Eff}_\Psi(\xi)$	54	$(y)^+$	47
$\text{Ellipse}(M)$	33	pr_V	58
ε	6	$\text{pr}_V^{L^2(\xi)}$	40
ε_i	5	Ψ	14
$\text{eSupp}(\xi)$	27	ψ	11
		Q_0	17
		R	73

\mathcal{R}	34
R_n	17
\tilde{R}_n	15
$\text{Rand}(\mathcal{R})$	36
$\rho(\mathbf{v})$	35
$\text{ri}\mathcal{M}$	25
s	7
$\mathcal{S}(K)$	17
$\tilde{\mathcal{S}}(K)$	15
$\mathcal{S}_n(K)$	8
σ^2	5
\xrightarrow{st}	16
$\text{Supp}(\xi)$	27
$\mathcal{T}(\mathbf{v})$	36
T_m	84, 145
\tilde{T}_m	87
$\boldsymbol{\theta}$	5
θ_i	6
$\hat{\boldsymbol{\theta}}$	6
Υ	21
$\Upsilon[a, b]$	67
$\Upsilon[a, \infty]$	67
Υ_n	23
$w \cdot \xi$	59
X	6
x_i	5
Ξ	17
Ξ_n	7
Ξ^+	20
$\tilde{\Xi}$	15
\mathbf{Y}	6
Y_i	5

Literaturverzeichnis

- [1] Arnold, S.F. (1981). *The theory of linear models*. Wiley, New York.
- [2] Bader, G. (1997). *Konvergenzraten endlicher Borelmaße basierend auf schwacher Konvergenz*. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe.
- [3] Biedermann, S., Dette, H. (2001). Optimal designs for testing the functional form of a regression via nonparametric estimation techniques. *Statist. Probab. Lett.* **52**, 215-224.
- [4] Billingsley, P. (1968). *Convergence of probability measures*. Wiley, New York.
- [5] Bischoff, W. (1993). On D -optimal designs for linear models under correlated observations with an application to a linear model with multiple response. *J. Statist. Planning and Inference* **37**, 69-80.
- [6] Bischoff, W. (1995). Determinant formulas with applications to designing when the observations are correlated. *Ann. Inst. Statist. Math.* **47**, 385-399.
- [7] Bischoff, W., Miller, F. (2000). Asymptotically optimal tests and optimal designs for testing the mean in regression models with applications to change-point problems. *Ann. Inst. Statist. Math.* **52**, 658-679.
- [8] Cook, D., Fedorov, V.V. (1995). Constrained optimization of experimental design (mit Diskussion). *Statistics* **26**, 129-178.
- [9] Cook, D., Wong, W.K. (1994). On the equivalence of constrained and weighted designs in multiple objective design problems. *J. Amer. Statist. Assoc.* **89**, 687-692.
- [10] Dette, H. (1993). Bayesian D -optimal and model robust designs in linear regression models. *Statistics* **25**, 27-46.

-
- [11] Dette, H., Franke, T. (2000). Constrained D - and D_1 -optimal designs for polynomial regression. *Ann. Statist.* **28**, 1702-1727.
- [12] Dette, H., Melas, V.B. (2001). Optimal designs for estimating individual coefficients in Fourier regression models. Preprint.
- [13] Dette, H., Melas, V.B., Biedermann, S. (2002). A functional-algebraic determination of D -optimal designs for trigonometric regression models on a partial circle. *Statist. Probab. Lett.* **58**, 389-397.
- [14] Dette, H., Studden, W.J. (1997). *The theory of canonical moments with applications in statistics, probability, and analysis*. Wiley, New York.
- [15] Elfving, G. (1952). Optimum allocation in linear regression theory. *Ann. Math. Statist.* **23**, 255-262.
- [16] El-Krunz, S.M., Studden, W.J. (1991). Bayesian optimal designs for linear regression models. *Ann. Stat.* **19**, 2183-2208.
- [17] Elstrodt, J. (1996). *Maß- und Integrationstheorie*. Springer, Berlin.
- [18] Federov, V.V. (1972). *Theory of optimal experiments*. Academic Press, New York.
- [19] Fedorov, V.V. (1989). Optimal design with bounded density: optimization algorithms of the exchange type. *J. Statist. Plan. Inf.* **22**, 1-13.
- [20] Freud, G. (1969). *Orthogonale Polynome*. Birkhäuser, Basel und Stuttgart.
- [21] Friede, T., Miller, F., Bischoff, W., Kieser, M. (2001). A note on change point estimation in dose-response trials. *Comp. Statist. Data Analysis* **37**, 219-232.
- [22] Guest, P.G. (1958). The spacing of observations in polynomial regression. *Ann. Math. Statist.* **29**, 294-299.
- [23] Heuser, H. (1992). *Funktionalanalysis*. Teubner, Stuttgart.
- [24] Hewitt, E., Stromberg, K. (1969). *Real and abstract analysis*. Springer, Berlin.
- [25] Hoel, P.G. (1958). Efficiency problems in polynomial estimation. *Ann. Math. Statist.* **29**, 1134-1145.

- [26] Hoel, P.G. (1965). Minimax designs in two dimensional regression. *Ann. Math. Statist.* **36**, 1097-1106.
- [27] Karlin, S.J., Studden, W.J. (1966). *Tchebycheff systems: with applications in analysis and statistics*. Interscience, New York.
- [28] Kiefer, J. (1959). Optimum experimental design (with discussion). *J. R. Statist. Soc. B* **21**, 272-319.
- [29] Kiefer, J. (1974). General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Ann. Statist.* **2**, 849-879.
- [30] Kiefer, J., Wolfowitz, J. (1959). Optimum designs in regression problems. *Ann. Math. Statist.* **30**, 271-294.
- [31] Kiefer, J., Wolfowitz, J. (1960). The equivalence of two extremum problems. *Can. J. Math.* **12**, 363-366.
- [32] Koepf, W. (1998). *Hypergeometric summation. An algorithmic approach to summation and special function identities*. Vieweg, Braunschweig.
- [33] Krafft, O. (1978). *Lineare statistische Modelle und optimale Versuchspläne*. Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen.
- [34] Krafft, O., Schäfer, M. (1992). *D*-optimal designs for a multivariate regression model. *J. of Multivariate Anal.* **42**, 130-140.
- [35] Lancaster, P., Tismenetsky, M. (1985). *The theory of matrices*. Academic press, Orlando.
- [36] Läuter, E. (1974). Experimental design in a class of models. *Math. Operationsforsch. u. Statist.* **5**, 379-398.
- [37] Läuter, E. (1976). Optimal multipurpose designs for regression models. *Math. Operationsforsch. u. Statist.* **7**, 51-68.
- [38] Pukelsheim, F. (1980). On linear regression designs which maximize information. *J. Statist. Plan. Inf.* **4**, 339-364.
- [39] Pukelsheim, F. (1981). On *c*-optimal design measures. *Math. Operationsforsch. Statist.* **12**, 13-20.

-
- [40] Pukelsheim, F. (1993). *Optimal design of experiments*. Wiley, New-York.
- [41] Pukelsheim, F., Rieder, S. (1992). Efficient rounding of approximate designs. *Biometrika* **79**, 763-770.
- [42] Rivlin, T.J. (1990). *Chebyshev polynomials*. Wiley, New York.
- [43] Rockafellar, R.T. (1970). *Convex Analysis*. Princeton.
- [44] Schwarz, H.R. (1988). *Numerische Mathematik*. Teubner, Stuttgart.
- [45] Sibson, R. (1972). Discussion of paper by H.P.Wynn. *J. R. Statist. Soc. B* **34**, 181-183.
- [46] Silvey, S.D. (1972). Discussion of paper by H.P.Wynn. *J. R. Statist. Soc. B* **34**, 174-175.
- [47] Silvey, S.D. (1980). *Optimal design*. Chapman and Hall, London.
- [48] Smith, K. (1918). On the standard deviations of adjusted and interpolated values of an observed polynomial function and its constants and the guidance they give towards a proper choice of the distribution of observations. *Biometrika* **12**, 1-85.
- [49] Stigler, S.M. (1971). Optimal experimental design for polynomial regression. *J. Amer. Statist. Ass.* **55**, 311-318.
- [50] Stigler, S.M. (1974). Gergonne's 1815 paper on the design and analysis of polynomial regression experiments. *Hist. Math.* **1**, 431-447.
- [51] Studden, W.J. (1980). D_s -optimal designs for polynomial regression using continued fractions. *Ann. Statist.* **8**, 1132-1141.
- [52] Szegő, G. (1959). *Orthogonal polynomials*. American Mathematical Society, New York.
- [53] Wald, A. (1943). On the efficient design of statistical investigations. *Ann. Math. Stat.* **14**, 134-140.
- [54] Webster, R. (1994). *Convexity*. Oxford University Press. Oxford.
- [55] Wiens, D.P. (1991). Designs for approximately linear regression: Two optimality properties of uniform design. *Statist. Probab. Lett.* **12**, 217-221.
- [56] Wong, W.K. (1993). G-optimal designs for multi-factor experiments with heteroscedastic errors. *J. Stat. Plann. Inference*, **40**, 127-133.

- [57] Wong, W.K., Cook, R.D. (1993). Heteroscedastic G-optimal designs. *J. R. Statist. Soc. B*, **55**, 871-880.
- [58] Wu, H. (2002). Optimal designs for first-order trigonometric regression on a partial cycle. *Stat. Sinica* **12**, 917-930.
- [59] Wynn, H. (1982). Optimum submeasures with applications to finite population sampling. *Statistical decision theory and related topics III*, Academic Press, New York, 485-495.

Lebenslauf

Persönliche Daten:

Name: Frank Miller
Geboren: 17.01.1971 in Rastatt
Eltern: Walter und Anna Miller
Familienstand: seit 16.07.1998 verheiratet mit Sabine Miller geb. Paasch

Schulbildung:

1977-1981 Grundschule in Gaggenau-Ottenau
1981-1990 Goethe-Gymnasium Gaggenau
08.05.1990 Abiturprüfung

Studium:

Okt. 1991-Feb. 1998 Studium der Mathematik an der Universität Karlsruhe
24.02.1998 Diplomprüfung in Mathematik

Tätigkeiten und Berufstätigkeit:

Juli 1990-Sept. 1991 Zivildienst bei der Arbeiterwohlfahrt Rastatt
Okt. 1993-März 1994 Wissenschaftliche Hilfskraft am Mathematischen Institut II der Universität Karlsruhe
Juli 1995-Sept. 1995 Praktikum bei der Daimler Benz AG, Stuttgart
Okt. 1995-Sept. 1997 Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Mathematische Stochastik der Universität Karlsruhe
Seit 01.03.1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mathematische Stochastik der Universität Karlsruhe