Optimale Versuchspläne bei zweifach klassifizierten Beobachtungsmodellen

Von V. KUROTSCHKA[1])

Zusammenfassung: Bei Beobachtungsmodellen der Form

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + Z_{ijk} \quad (i = 1, \ldots, N; \quad j = 1, \ldots, M; \quad k = i, \ldots, n_{ij})$$

mit Beobachtungsbeschränkungen durch Vorgabe von

$$n_{i\cdot} = \sum_{j=1}^{M} n_{ij} \quad (i = 1, \ldots, N) \quad \text{und} \quad n_{\cdot j} = \sum_{i=1}^{N} n_{ij} \quad (j = 1, \ldots, M)$$

werden die Versuchspläne $\left\{n_{ij}^* := \frac{n_{i\cdot} n_{\cdot j}}{n}\right\}$ als einzige optimale nachgewiesen, d. h. sie minimieren die Verallgemeinerten Varianzen der besten Schätzfunktionen für die unbekannten Parameterklassen $\{\alpha_i\}$, $\{\beta_j\}$ bzw. $\{\mu, \alpha_i, \beta_j\}$ und maximieren gleichmäßig die Gütefunktionen der entsprechenden F-Teste. Als optimale Versuchspläne bei gewissen schwächeren Beobachtungsbeschränkungen ergeben sich Spezialfälle von $\{n_{ij}^*\}$.

1. Problemstellung und Übersicht

Bei zweifach klassifizierten Beobachtungsmodellen der Form

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + Z_{ijk} \quad (i = 1, \ldots, N; \quad j = 1, \ldots, M; \quad k = 1, \ldots, n_{ij}), \tag{1.1}$$

wobei

μ, α_i, β_j unbekannte interessierende Konstanten (Parameter)
Z_{ijk} unabhängige normalverteilte „Fehler" mit $E(Z_{ijk}) = o$ und $\operatorname{Var}(Z_{ijk}) = \sigma^2$ und
Y_{ijk} die Beobachtungsgrößen sind,

bestehen in der Praxis häufig folgende Beobachtungsbeschränkungen:

Zu fest vorgegebenen natürlichen Zahlen

$n_{i.}$ (Beobachtungsumfang in der i'ten Gruppe der einen Klasse),
$n_{.j}$ (Beobachtungsumfang der j'ten Gruppe der anderen Klasse) und
n (Gesamtbeobachtungsumfang) mit

$$\sum_{i=1}^{N} n_{i.} = \sum_{j=1}^{M} n_{.j} = n$$

---

[1]) Dr. Viktor KUROTSCHKA, Department of Statistics, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan 48104.

soll gelten:

$$\sum_{i=1}^{N} n_{ij} = n_{.j} \, (j = 1, \ldots, M) \quad \text{und} \quad \sum_{j=1}^{M} n_{ij} = n_{i.} \, (i = 1, \ldots, N) \tag{1.2}$$

und infolgedessen

$$\sum_{i,j=1}^{N,M} n_{ij} = n\,.$$

In dieser Arbeit wird untersucht, wie man durch geeignete Wahl der n_{ij} unter den Bedingungen (1.2), oder kurz des „Versuchsplanes $\{n_{ij}\}$", die statistischen Auswertungen von (1.1) möglichst günstig gestalten kann, d.h. wie man „optimale" Versuchspläne $\{n_{ij}\}$ sinnvoll charakterisieren kann und wie solche Versuchspläne im einzelnen aussehen.

Die interessierenden Aussagen bei diesem Modell (1.1) sind Schätzungen aller sinnvollen [SCHEFFE, S. 13ff.] Linearkombinationen der Gesamtheit der Parameter $q := \{\mu, \alpha_i, \beta_j\}$ und damit insbesondere auch der einzelnen Teilklassen $\alpha := \{\alpha_i\}$ und $\beta := \{\beta_j\}$, sowie Entscheidungen über die Hypothesen H_a und H_b, welche die Gleichheit der Einflüsse der durch „i" bzw. „j" gekennzeichneten Klassen beschreiben. Dabei werden die nach der Methode der kleinsten Quadrate gewonnenen erwartungstreuen Schätzfunktionen mit kleinster Varianz und zum Testen der Hypothesen H_a und H_b die in der Varianzanalyse entwickelten, unter gewissen Gesichtspunkten optimalen F-Teste (bzw. χ^2-Teste, falls σ^2 bekannt ist) verwendet. Deshalb erscheint es vernünftig, diejenigen Versuchspläne $\{n_{ij}\}$ als vorteilhaft auszuzeichnen, welche die obigen Verfahren in Abhängigkeit des Versuchsplanes optimieren, d.h. welche die Verallgemeinerten Varianzen der Systeme der betrachteten Schätzfunktionen minimieren, bzw. die Gütefunktionen der zugrunde gelegten Teste gleichmäßig maximieren.

Dabei stellt es sich erfreulicherweise heraus, daß die Versuchspläne der Form $\left\{n_{ij}^* := \frac{n_{i.} n_{.j}}{n}\right\}$, die eine einfache Berechnung der interessierenden Schätz- und Testgrößen ermöglichen [KENDALL, STUART, S. 17], allen diesen Optimalitätsforderungen genügen und in diesem Sinne die besten sind. Auf Schwierigkeiten wegen der möglichen Nichtganzzahligkeit der n_{ij}^* wird im Abschnitt 5 (wo ein erweitertes Beobachtungsmodell eingeführt wird) eingegangen. In Abschnitt 6 werden Optimalitätsaussagen über Versuchspläne bei schwächeren Beobachtungsbeschränkungen als (1.2) gemacht.

Bereits 1943 hat WALD die oben beschriebenen Optimalitätskriterien für Versuchspläne bei allgemeinen linearen Modellen angeführt. Die Forderung an Versuchspläne, die Gütefunktionen von F-Testen für lineare Hypothesen in allen unbekannten Parametern gleichmäßig zu maximieren, erschien ihm aber als undurchführbar. Er schlug nach einer genaueren Motivierung als „Kompromiß" vor, diejenigen Versuchspläne als „effizient" zu bezeichnen, welche die Verallgemeinerte Varianz der besten erwartungstreuen Schätzfunktionen für die unbekannten Parameter minimieren,und zeigte, daß die Lateinischen, die Lateinisch-Griechischen und analoge höher klassifizierte Versuchsanordnungen „effiziente" Versuchspläne sind. Weitere Untersuchungen über optimale Versuchspläne bei linearen Modellen und insbesondere bei Regressionsmodellen sind dann in einer Reihe von Arbeiten von verschiedenen Autoren angestellt worden. Eine umfangreiche Literaturübersicht findet man z. B. in KARLIN und STUDDEN, KIEFER [1958; 1959]. Die vorliegende Arbeit ist unabhängig davon auf eine Anregung von Herrn Professor Dr. D. MORGENSTERN entstanden. Für diese Anregung und für viele wertvolle Ratschläge, sowohl in bezug auf den Inhalt als auch auf die Form der Darstellung, schulde ich Herrn Professor Dr. D. MORGENSTERN sehr großen Dank.

2. Optimalitätskriterien für Versuchspläne

Wegen der besseren Übersichtlichkeit und der einfacheren Anwendung der allgemeinen Theorie der linearen Modelle ist es zweckmäßig das Beobachtungsmodell (1.1) in Vektorform zu schreiben und dabei im Gegensatz zu der üblichen Normierung „$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i = o$ und $\sum_{j=1}^{M} \beta_j = o$" die Normierung „$\alpha_N = o$ und $\beta_M = o$" zu wählen, die der Auswahl der folgenden Maximalsysteme schätzbarer Funktionen der interessierenden Parameterklassen $q := (\mu, \alpha_1, \ldots, \alpha_N, \beta_1, \ldots, \beta_M)'$, $\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_N)'$ und $\beta := (\beta_1, \ldots, \beta_M)'$ entspricht: $p := (\mu + \alpha_N + \beta_M, \alpha_1 - \alpha_N, \ldots, \alpha_{N-1} - \alpha_N, \beta_1 - \beta_M, \ldots, \beta_{M-1} - \beta_M)' =: (m, a_1, \ldots, a_{N-1}, b_1, \ldots, b_{M-1})$, $a := (a_1 \ldots, a_{N-1})$ bzw. $b := (b_1, \ldots, b_{M-1})$.

Setzt man

$$\begin{aligned} y &:= (Y_{111}, \ldots, Y_{11n_{11}}, Y_{121}, \ldots, Y_{12n_{12}}, Y_{131}, \ldots \quad \ldots, Y_{NMn_{NM}})' \\ z &:= (Z_{111}, \ldots \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \ldots, Z_{NMn_{NM}})', \end{aligned}$$

so erhält man durch Vergleich von (1.1) und $y = Bp + z$ die Koeffizientenmatrix B dank der gewählten Normierung in besonders einfacher Gestalt (s. Schema auf nächster Seite).

Auch die Hypothesen über die Gleichheit der Einflüsse der einzelnen Klassen lassen sich sehr einfach formulieren durch:

$$H_a : a = o \quad \text{und} \quad H_b : b = o$$

Die hier interessierenden Verallgemeinerten Varianzen V_p, V_a und V_b der erwartungstreuen Schätzvektoren mit kleinster Varianz $\hat{p} = \hat{p}(y)$ für $p, \hat{a} = \hat{a}(y)$ für a bzw. $\hat{b} = \hat{b}(y)$ für b sind definitionsgemäß gleich den Determinanten der Kovarianzmatrizen $K_{\hat{p}}$ von $\hat{p}$, $K_{\hat{a}}$ von $\hat{a}$ bzw. $K_{\hat{b}}$ von $\hat{b}$, also

$$V_p := \det K_{\hat{p}}, \quad V_a := \det K_{\hat{a}}, \quad V_b := \det K_{\hat{b}}.$$

$$
B' = \begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc}
n_{11} \; + & n_{12} + \ldots + & n_{1M-1} + & n_{1M} \; + & n_{21} \; + & n_{22} \; \ldots + & n_{MN}
\end{array} \\
\left[\begin{array}{ccccccc}
1\ldots1 & 1\ldots1 \;\ldots & 1\ldots1 & 1\ldots1 & 1\ldots1\ldots & 1\ldots1 \;\ldots & 1\ldots1 \\
1\ldots1 & 1\ldots1 & 1\ldots1 & 1\ldots1 & 0\ldots0 & 0\ldots0. & 0\ldots0 \\
0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 1\ldots1 & 1\ldots1 & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & 0\ldots0 & 0\ldots0 & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \ldots & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 \\
1\ldots1 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 1\ldots1 & 0\ldots0 & 0\ldots0 \\
0\ldots0 & 1\ldots1 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 1\ldots1 & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & 0\ldots0 & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & 0\ldots0 & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \ldots & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \ldots & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
\cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot \; \cdot \\
0\ldots0 & 0\ldots0 & 1\ldots1 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0 & 0\ldots0
\end{array}\right]
\end{array}
\begin{array}{c}
\\ 1 \\ \\ \\ + \\ \\ N-1 \\ \\ \\ \\ + \\ \\ \\ M-1 \\ \\ = \\ \\ N+M-1
\end{array}
$$

Führt man noch die Gütefunktionen $E_a(\varphi)$ und $E_b(\psi)$ der F-Teste*) φ und ψ zum Prüfen der Hypothesen H_a bzw. H_b zu einem beliebigen, aber festen Niveau α ein, so lassen sich folgende Optimalitätseigenschaften für Versuchspläne $\{n_{ij}\}$ definieren, wenn man beachtet, daß alle eben eingeführten Größen vom Versuchsplan $\{n_{ij}\}$ abhängen:

Definition 1:

Ein Versuchsplan $\{n_{ij}^*\}$ soll Determinanten-optimal heißen bzgl.

a) des Parametersystems p, oder kurz D_p-optimal, wenn

$$V_p(\{n_{ij}^*\}) = \inf_{\{n_{ij}\}} V_p(\{n_{ij}\}),$$

b) des Parametersystems a, oder kurz D_a-optimal, wenn

$$V_a(\{n_{ij}^*\}) = \inf_{\{n_{ij}\}} V_a(\{n_{ij}\}),$$

c) des Parametersystems b, oder kurz D_b-optimal, wenn

$$V_b(\{n_{ij}^*\}) = \inf_{\{n_{ij}\}} V_b(\{n_{ij}\}).$$

Der Kürze wegen soll ein Versuchsplan D-optimal genannt werden, wenn er alle diese Eigenschaften a) – c) besitzt.

---

*) Hier ist unterstellt worden, daß die Varianz σ^2 im Modell (1.1) nicht bekannt ist. Bei bekannten σ^2 sind die F-Teste durch die entsprechenden χ^2-Teste zu ersetzen. Alle Ergebnisse und Schlußweisen bleiben bei dieser Ersetzung, wie man leicht verfolgen kann, gültig.

Definition 2: Ein Versuchsplan $\{n_{ij}^*\}$ soll gleichmäßig optimal heißen bzgl.

a) der Hypothese H_a oder kurz G_a-optimal, wenn

$$E_a \varphi(\{n_{ij}^*\}) = \sup_{\{n_{ij}\}} E_a \varphi(\{n_{ij}\}) \quad \text{für alle} \quad a \in \mathbb{R}^{N-1},$$

b) der Hypothese H_b, oder kurz G_b-optimal, wenn

$$E_b \psi(\{n_{ij}^*\}) = \sup_{\{n_{ij}\}} E_b \psi(\{n_{ij}\}) \quad \text{für alle} \quad b \in \mathbb{R}^{M-1}.$$

Versuchspläne, die sowohl G_a- als auch G_b-optimal sind, sollen G-optimal genannt werden.

Obwohl die Optimalitätskriterien für $\{n_{ij}\}$ bei speziell ausgewählten Maximalsystemen schätzbarer Funktionen $p = p(q)$, $a = a(\alpha)$ und $b = b(\beta)$ formuliert wurden, hängen sie von dieser speziellen Auswahl nicht ab, d. h. die D_p-, D_a- und D_b-optimalen Versuchspläne minimieren die Verallgemeinerten Varianzen beliebiger Maximalsysteme der entsprechenden Parameterklassen q, α und β, wie folgender Hilfssatz zeigt:

Hilfssatz 2.1:
Die Verallgemeinerten Varianzen von beliebigen maximalen Systemen schätzbarer Funktionen der Parameter μ, α_i, β_j unterscheiden sich von V_p nur um einen von dem Versuchsplan $\{n_{ij}\}$ unabhängigen Faktor.

Beweis:
Ist $p^* = p^*(q)$ ein weiteres Maximalsystem von schätzbaren Funktionen der Parameter μ, α_i, β_j, so folgt aus der Tatsache, daß die schätzbaren Funktionen des Modells (1.1) linear in den m, a_i, b_j sind, nach den Rechenregeln über lineare Basistransformationen, daß $p^* = Tp$ ist mit T eindeutig bestimmt, $\det T \neq 0$ und T unabhängig von $\{n_{ij}\}$. Den Beweis vervollständigt die Beziehung:

$$V_{p^*} = \det K_{\hat{p}^*} = \det(T' K_{\hat{p}} T) = (\det T)^2 \cdot \det K_{\hat{p}} = (\det T)^2 \, V_p.$$

Ein entsprechender Hilfssatz für die Teilsysteme a und b läßt sich analog beweisen.

Die Definition der G-Optimalität von $\{n_{ij}\}$ ist offensichtlich unabhängig von einer speziellen Normierung des Modells.

3. Notwendige und hinreichende Bedingungen für optimale Versuchspläne

Um handliche Kriterien für die Berechnung von optimalen Versuchsplänen zu erhalten, werden die folgenden vier Hilfssätze bewiesen, welche zeigen, wie die für die Optimalitätseigenschaften relevanten Größen vom Versuchsplan abhängen:

Hilfssatz 3.1:
Es läßt sich $V_p = V_p(\{n_{ij}\})$ darstellen in der Form:

$$V_p = \frac{\sigma^{2(N+M-1)}}{\left(\prod_{i=1}^{N} n_{i.}\right) \det H_{M-1}(\{n_{ij}\})} = \frac{\sigma^{2(N+M-1)}}{\left(\prod_{j=1}^{M} n_{.j}\right) \det H_{N-1}(\{n_{ij}\})},$$

mit

$$H_{M-1}(\{n_{ij}\}) := \left(\left(n_{.j}\delta_{jj'} - \sum_{i=1}^{N} \frac{n_{ij}n_{ij'}}{n_{i.}}\right) \; j,j' = 1, \dots, M-1\right)$$

und entsprechend

$$H_{N-1}(\{n_{ij}\}) := \left(\left(n_{i.}\delta_{ii'} - \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{ij}n_{i'j}}{n_{.j}}\right) \; i,i' = 1, \dots, N-1\right),$$

insbesondere gilt also

$$\det H_{M-1}(\{n_{ij}\}) = \frac{\prod_{j=1}^{M} n_{.j}}{\prod_{i=1}^{N} n_{i.}} \det H_{N-1}(\{n_{ij}\}).$$

Beweis:

Es gilt nach der allgemeinen Theorie der linearen Modelle:

$$K_{\hat{p}} = \sigma^2 (B'B)^{-1} \quad \text{und somit} \quad V_p = \frac{\sigma^{2(M+N-1)}}{\det(B'B)} =: \frac{\sigma^{2(M+N-1)}}{\det A}.$$

Die Matrix $A := B'B$ läßt sich in diesem Fall besonders einfach ausrechnen. Das Element $a_{rs}(r,s = 1,2,\dots,N+M-1)$ aus A erhält man, wenn man in der r-ten Spalte von B die Einsen in allen denjenigen Zeilen aufaddiert, in denen auch in der s-ten Spalte Einsen stehen. Wegen der Symmetrie von $B'B = A$ braucht man das nur für $r \leqslant s$ durchzuführen und erhält so:

$$A = \begin{pmatrix}
n & n_{1.} \;\dots\dots\; n_{N-1.} & n_{.1} \;\dots\; n_{.M-1} \\
n_{1.} & n_{1.} \; 0 \dots 0 & n_{11} \dots n_{1M-1} \\
\vdots & 0 \; \ddots \quad \vdots & \vdots \qquad \vdots \\
\vdots & \vdots \quad \ddots \; 0 & \vdots \qquad \vdots \\
n_{N-1.} & 0 \dots 0 \; n_{N-1.} & n_{N-1\,1} \dots n_{N-1\,M-1} \\
n_{.1} & n_{11} \dots\dots n_{N-1\,1} & n_{.1} \; 0 \dots 0 \\
\vdots & \vdots \qquad \vdots & 0 \; \ddots \quad \vdots \\
\vdots & \vdots \qquad \vdots & \vdots \quad \ddots \; 0 \\
n_{.M-1} & n_{1M-1} \dots n_{N-1\,M-1} & 0 \dots 0 \; n_{.M-1}
\end{pmatrix},$$

woraus sich durch elementare Zeilen- und Spaltenumformungen ergibt:

$$\det A = \det \begin{pmatrix} ((n_{i.}\delta_{ii'})) & ((n_{ij})) \\ ((n_{ij})) & ((n_{.j}\delta_{jj'})) \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} i,i' = 1,\dots,N \\ j,j' = 1,\dots,M-1. \end{matrix}$$

Benutzt man zur weiteren Vereinfachung von det A die Formel*):

$$\det\begin{pmatrix} E & F \\ C & D \end{pmatrix} = \det(E)\,\det(D - CE^{-1}F),$$

so erhält man

$$\det A = \det((n_{i.}\delta_{ii'})_{ii'})\det\left(\left(n_{.j}\delta_{jj'} - \sum_{i=1}^{N}\frac{n_{ij}n_{ij'}}{n_{i.}}\right)_{jj'}\right) \quad \begin{matrix} i,i' = 1,\dots,N \\ j,j' = 1,\dots,M-1. \end{matrix}$$

$= \left(\prod_{i=1}^{N} n_{i.}\right)\det H_{M-1}(\{n_{ij}\})$, was die erste Darstellung von V_p beweist. Eine analoge Umformung zum Beweis der zweiten Darstellung erübrigt sich wegen der Symmetrie des Modells (1.1) in „i" und „j".

Hilfssatz 3.2:

Die Verallgemeinerten Varianzen V_a und V_b lassen sich durch folgende Formeln beschreiben:

$$V_a = \frac{\sigma^{2(N-1)}}{\det H_{N-1}(\{n_{ij}\})} \quad \text{und} \quad V_b = \frac{\sigma^{2(M-1)}}{\det H_{M-1}(\{n_{ij}\})}.$$

Beweis:

Setzt man $K_{\hat{p}} = \sigma^2 A^{-1} = :((\sigma^2 a^{rs})r,s = 1,\dots,N + M-1)$, dann ist

$$V_a = \det((\sigma^2 a^{rs})r,s = 2,\dots,N).$$

Da nach den Berechnungsformeln [GANTMACHER, S. 20] für Hauptminoren inverser Matrizen gilt:

$$\det((a^{rs})r,s = 2,\dots,N) = \frac{\det((a_{rs})r,s = 1,N+1,\dots,N+M-1)}{\det A}$$

und nach Definition von A^{-1}:

$$\det((a_{rs})r,s = 1,N+1,\dots,N+M-1) = \det\begin{pmatrix} n & n_{.1} & \dots & n_{.M-1} \\ n_{.1} & n_{.1} & 0 \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ n_{.M-1} & 0 & \dots 0 & n_{.M-1} \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^{M} n_{.j},$$

folgt

$$V_a = \sigma^{2(N-1)}\det((a^{rs})r,s = 2,\dots,N) = \frac{\sigma^{2(N-1)}\prod_{j=1}^{M} n_{.j}}{\det A} = \frac{\sigma^{2(N-1)}}{\det H_{N-1}(\{n_{ij}\})}$$

aus Hilfssatz 3.1.

---

*) Vgl. z. B. SCHEFFE, S. 405, II 17 (die dort angegebenen Voraussetzungen über die Teilmatrizen E, F, C und D sind hier erfüllt).

Für V_b gilt die Behauptung wegen der Symmetrie in a und b.

Bezeichnet man mit $\delta_a^2(\{n_{ij}\})$ und $\delta_b^2(\{n_{ij}\})$ die Nichtzentralitätsparameter der F-Verteilungen der Testgrößen der F-Teste zur Hypothese H_a bzw. H_b, so läßt sich folgendes Kriterium für G_a- und G_b-optimale Versuchspläne formulieren:

Hilfssatz 3.3:

Ein Versuchsplan $\{n_{ij}^*\}$ ist genau dann G_a-optimal, wenn

$$\delta_a^2(\{n_{ij}^*\}) = \sup_{\{n_{ij}\}} \delta_a^2(\{n_{ij}\}) \quad \text{für alle} \quad a \in \mathbb{R}^{N-1},$$

bzw. G_b-optimal, wenn

$$\delta_b^2(\{n_{ij}^*\}) = \sup_{\{n_{ij}\}} \delta_b^2(\{n_{ij}\}) \quad \text{für alle} \quad b \in \mathbb{R}^{M-1}.$$

Beweis:

Für die F-Teste φ^* bei $\{n_{ij}^*\}$ und φ bei $\{n_{ij}\}$ zum Prüfen der Hypothese H_a: $a = 0$ gegen $\bar{H}_a$: $a \neq 0$ zum gleichen Niveau α erhält man die kritische Größe k aus:

$$F_{N-1, n-N-M-1}(k) = 1 - \alpha,$$

so daß für die Gütefunktionen der betrachteten Teste gilt:

$$E_a(\varphi^*) = 1 - F_{N-1, n-N-M+1, \delta_a^2(\{n_{ij}^*\})}(k)$$

und

$$E_a(\varphi) = 1 - F_{N-1, n-N-M+1, \delta_a^2(\{n_{ij}\})}(k).$$

Man sieht, daß diese nur über die Nichtzentralitätsparameter vom Versuchsplan abhängen und im Nichtzentralitätsparameter isoton sind, denn die Familie der nichtzentralen F-Verteilungen $\{F_{n,m,\delta^2}(x); \delta^2 \in \mathbb{R}^+\}$ hat [LEHMANN, S. 314; WITTING, S. 84] einen monotonen Likelihoodquotienten in x, woraus folgt [LEHMANN, S. 74, Lemma 2(ii); WITTING, S. 86, Satz 2.31c], daß für $\delta_1^2 > \delta_2^2$ stets $F_{n,m,\delta_1^2}(x) \leqslant F_{n,m,\delta_2^2}(x)$ mit $F_{n,m,\delta_1^2}(x) \not\equiv F_{n,m,\delta_2^2}(x)$ ist. Beachtet man noch die Gleichmäßigkeitsaussage in dem Parametersystem a, so erhält man daraus bereits das behauptete Kriterium. Entsprechend überlegt man sich die Aussage über die G_b-Optimalität.

Hilfssatz 3.4:

Die Abhängigkeit der Nichtzentralitätsparameter δ_a^2 und δ_b^2 von dem Versuchsplan $\{n_{ij}\}$ drückt sich in der Form aus:

$$\sigma^2 \delta_a^2 = \sigma^2 \delta_a^2(\{n_{ij}\}) = a' H_{N-1}(\{n_{ij}\}) a$$

und

$$\sigma^2 \delta_b^2 = \sigma^2 \delta_b^2(\{n_{ij}\}) = b' H_{M-1}(\{n_{ij}\}) b.$$

Beweis:

Die Nichtzentralitätsparameter δ^2 und δ_b^2 lassen sich am einfachsten nach der folgenden Formel [MORGENSTERN, S. 211] berechnen:

$$\sigma^2 \delta_H^2 = \operatorname*{Min}_{p \in L_H} \sum_{\nu=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{s} c_{\nu i}(p_i - p_i^0) \right)^2 . \tag{3.2}$$

Dabei bedeutet hier „$p \in L_H$" im Fall $H = H_a$, daß in $p = (m, a_1, \ldots, a_{N-1}, b_1, \ldots, b_{M-1})'$ die Komponenten a_i Null gesetzt werden. Die Koeffizienten $c_{\nu i}$ ($i = 1, \ldots, N + M - 1 = : s$; $v = 1, \ldots, n$) entsprechen den Koeffizienten der Matrix B und die Parameter p_i den Komponenten des Vektors p, während der obere Index „^{0}" die „wahren" Parameter auszeichnen soll. Damit nimmt die Formel (3.2) für $H_a : a = 0$ die folgende Gestalt an:

$$\sigma^2 \delta_{a^0}^2 = \operatorname*{Min}_{\{p; a_i = 0\}} \sum_{j=1}^{M} \sum_{i=1}^{N} n_{ij}(m + a_i + b_j - m^0 - a_i^0 - b_j^0)^2 .$$

Der Ausdruck

$$S_a : = \sum_{j=1}^{M} \sum_{i=1}^{N} n_{ij}(m + b_j - m^0 - a_i^0 - b_j^0)^2 \tag{3.3}$$

nimmt als positive Summe voneinander unabhängiger Quadrate genau ein Minimum an. Deshalb sind die Bedingungen

$$\frac{\partial S_a}{\partial m} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial S_a}{\partial b_j} = 0, \quad j = 1, \ldots, M-1$$

notwendig und hinreichend für das Eintreten des Minimums und besagen:

$$m + b_j = m^0 + b_j^0 \sum_{i=1}^{N-1} \frac{n_{ij}}{n_{.j}} a_i^0 \qquad j = 1, 1, \ldots, M-1,$$

$$m = m^0 + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{n_{iM}}{n_{.M}} a_i^0 .$$

Diese M Gleichungen eingesetzt in (2.3) ergeben nach Formel (2.2)

$$\begin{aligned}
\sigma^2 \delta_{a^0}^2 &= \sum_{j=1}^{M} \sum_{i=1}^{N} n_{ij} \left(\sum_{i'=1}^{N-1} \frac{n_{i'j}}{n_{.j}} a_{i'}^0 - a_i^0 \right)^2 \\
&= \sum_{i,j=1}^{N,M} n_{ij} \left(\sum_{i'=1}^{N-1} \frac{n_{i'j}}{n_{.j}} a_{i'}^0 \right)^2 - 2 \cdot \sum_{i,j=1}^{N,M} n_{ij} \sum_{i'=1}^{N-1} \frac{n_{i'j}}{n_{.j}} a_i^0 a_{i'}^0 + \sum_{i,j=1}^{N,M} n_{ij} (a_i^0)^2 \\
&= \sum_{j=1}^{M} n_{.j} \sum_{i,i'=1}^{N-1} \frac{n_{i'j} n_{ij}}{n^2_{.j}} a_i^0 a_{i'}^0 - 2 \sum_{j=1}^{M} \sum_{i,i'=1}^{N-1} \frac{n_{i'j} n_{ij}}{n_{.j}} a_i^0 a_{i'}^0 + \sum_{i,i'=1}^{N-1} \delta_{ii'} n_{i.} a_i^0 a_{i'}^0 \\
&= \sum_{i,i'=1}^{N-1} \left(\delta_{ii'} n_{i.} - \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{ij} n_{i'j}}{n_{.j}} \right) a_i^0 a_{i'}^0 \quad \text{also} \quad \sigma^2 \delta_{a^0}^2 = a^{0'} H_{N-1}(\{n_{ij}\}) a^0 .
\end{aligned}$$

Wegen der Symmetrie in a und b gilt die entsprechende Form für δ_b^2.

Aus diesen Hilfssätzen folgen*) nun unmittelbar für die weiteren Berechnungen wichtige Kriterien für optimale Versuchspläne.

*) Als Nebenergebnisse erhält man für die Kovarianzmatrizen $K_{\hat{a}}$ und $K_{\hat{b}}$ wegen $\sigma^2 \delta_a^2 = a' K_{\hat{a}}^{-1} a$ und $\sigma^2 \delta_b^2 = b' K_{\hat{b}}^{-1} b$ die folgenden Formeln: $K_{\hat{a}} = H_{N-1}^{-1}(\{n_{ij}\})$ und $K_{\hat{b}} = H_{M-1}^{-1}(\{n_{ij}\})$.

Satz 3.1:

Ist ein Versuchsplan $\{n_{ij}^*\}$ D_p- oder D_a- oder D_b-optimal, dann ist er bereits D-optimal; dafür ist notwendig und hinreichend, daß

$$\det H_{N-1}(\{n_{ij}^*\}) = \sup_{\{n_{ij}\}} \det H_{N-1}(\{n_{ij}\})$$

oder

$$\det H_{M-1}(\{n_{ij}^*\}) = \sup_{\{n_{ij}\}} \det H_{M-1}(\{n_{ij}\})$$

Satz 3.2:

Ein Versuchsplan $\{n_{ij}^*\}$ ist genau dann G_a-optimal, wenn

$$a' H_{N-1}(\{n_{ij}^*\})\, a = \sup_{\{n_{ij}\}} a' H_{N-1}(\{n_{ij}\})\, a$$

und entsprechend G_b-optimal, wenn

$$b' H_{M-1}(\{n_{ij}^*\})\, b = \sup_{\{n_{ij}\}} b' H_{M-1}(\{n_{ij}\})\, b.$$

Es läßt sich jetzt auch sehr einfach eine Beziehung zwischen D- und G-optimalen Versuchsplänen herleiten, die später einen einfachen Nachweis der D-Optimalität ermöglicht:

Satz 3.3:

Ist ein Versuchsplan G_a- oder G_b-optimal, dann ist er auch D-optimal.

Beweis:

Die Behauptung folgt aus Satz 3.1 und Satz 3.2 sofort nach bekannten Beziehungen zwischen quadratischen Formen und den Determinanten der dazugehörigen Matrizen oder aus der folgenden Integralbeziehung:

$$\int_{R^{N-1}} \exp\{-a' H_{N-1}(\{n_{ij}\})a\} \quad da = \text{const.}\, \{\det H_{N-1}(\{n_{ij}\})\}^{-\frac{1}{2}},$$

die bekanntlich für beliebige positiv definite Matrizen H gilt.

4. Existenz und Eindeutigkeit optimaler Versuchspläne

Um erste Anhaltspunkte über optimale Versuchspläne zu erhalten, kann man zur Maximierung der interessierenden Determinanten und quadratischen Formen unter den Nebenbedingungen (1.2) die Methode der LAGRANGEschen Faktoren zu Hilfe nehmen und für den Augenblick die Forderung der Ganzzahligkeit der n_{ij} aufgeben, was nur dann für den Versuchsplan Konsequenzen hat, wenn die daraus ermittelten Bedingungen seine Ganzzahligkeit gefährden. Dieser Fall wird im Abschnitt 5 noch näher besprochen.

Nimmt bei der obigen Annahme die Determinante von $H_{M-1}(\{n_{ij}\})$ unter den („reduzierten“) Nebenbedingungen

$$\sum_{i=1}^{N} n_{ij} = n_{.j}\, (j = 1,2,\ldots,M-1), \ \sum_{j=1}^{M} n_{ij} = n_{i.}\, (i = 1,2,\ldots,N-1), \ \sum_{i,j=1}^{N,M} n_{ij} = n$$

ein Maximum an, dann muß für die Größen n_{ij} und gewisse Konstante $\lambda_i (i = 1, \ldots, N-1)$, $\mu_j (j = 1, \ldots, M-1)$ und κ gelten:

$$\frac{\partial}{\partial n_{\rho\sigma}}\left[\det H_{M-1}(\{n_{ij}\}) + \sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i \left(\sum_{j=1}^{M} n_{ij} - n_{i\cdot}\right) + \sum_{j=1}^{M-1} \mu_j \left(\sum_{i=1}^{N} n_{ij} - n_{\cdot j}\right) + \kappa \left(\sum_{i,j=1}^{N,M} n_{ij} - n\right)\right] = 0 \tag{4.1}$$

für alle $\rho = 1, \ldots, N$ und alle $\sigma = 1, \ldots, M$ und die Nebenbedingungen (1.2).

Die dabei auftretenden partiellen Ableitungen von $\det H_{M-1}(\{n_{ij}\})$ erhält man folgenderweise: Setzt man

$$h_{jj'} := n_{\cdot j}\,\delta_{jj'} - \sum_{i=1}^{N} \frac{n_{ij} n_{i'j}}{n_{i\cdot}},$$

dann ergibt die Kettenregel der Differentiation nach $n_{\rho\sigma} \begin{pmatrix} \rho = 1, \ldots, N \\ \sigma = 1, \ldots, M \end{pmatrix}$:

$$\frac{\partial \det H_{M-1}(\{n_{ij}\})}{\partial n_{\rho\sigma}} = \sum_{j,j'=1}^{M-1} \frac{\partial \det H_{M-1}(\{n_{ik}\})}{\partial h_{jj'}} \cdot \frac{\partial h_{jj'}}{\partial n_{\rho\sigma}}.$$

Sei $H_{jj'}$ das algebraische Komplement von $h_{jj'}$, dann gilt wegen $\dfrac{\partial \det H_{M-1}(\{n_{ij}\})}{\partial h_{jj'}} = H_{jj'}$ weiter: $\dfrac{\partial \det H_{M-1}(\{n_{ij}\})}{\partial n_{\rho\sigma}}$

$$= \sum_{j,j'=1}^{M-1} -H_{jj'} \frac{\partial \left(n_{\cdot j}\delta_{jj'} - \sum_{i=1}^{N} \frac{n_{ij} n_{ij'}}{n_{i\cdot}}\right)}{\partial n_{\rho\sigma}} = \sum_{j,j'=1}^{M-1} -H_{jj'} \frac{n_{\rho j}\delta_{j'\sigma} + n_{\rho j'}\delta_{j\sigma}}{n_{\rho\cdot}}$$

$$= \sum_{j,j'=1}^{M-1} -H_{jj'} \frac{n_{\rho j}\delta_{j'\sigma}}{n_{\rho.}} + \sum_{j,j'=1}^{M-1} -H_{jj'} \frac{n_{\rho j'}\delta_{j\sigma}}{n_{\rho.}} = \sum_{j=1}^{M-1} -H_{j\sigma} \frac{n_{\rho j}}{n_{\rho.}} + \sum_{j'=1}^{M-1} -H_{\sigma j'} \frac{n_{\rho j'}}{n_{\rho.}}$$

$$= \sum_{j=1}^{M-1} -2H_{j\sigma} \frac{n_{\rho j}}{n_{\rho.}},$$

wenn man die Symmetrie der Matrix $((H_{jj'})j,j' = 1, \ldots, M-1)$ beachtet. Damit erhält man für das Gleichungssystem (4.1) das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
-2\sum_{j=1}^{M-1} H_{j\sigma}\frac{n_{\rho j}}{n_{\rho.}} + \lambda_\rho + \mu_\sigma + \kappa &= 0 \qquad && \rho = 1, \ldots, N-1 \\ &&& \sigma = 1, \ldots, M-1 \\
-2\sum_{j=1}^{M-1} H_{j\sigma}\frac{n_{Nj}}{n_{N.}} + \mu_\sigma + \kappa &= 0 && (\rho = N) \\ &&& \sigma = 1, \ldots, M-1 \\
\lambda_\rho + \kappa &= 0 && \rho = 1, \ldots, N-1 \\ &&& (\sigma = M) \\
\kappa &= 0 && (\rho = N) \\ &&& (\sigma = M),
\end{aligned}$$

so daß sich die Bedingungsgleichungen reduzieren zu:

$$\sum_{j=1}^{M-1} H_{j\sigma} \frac{n_{\rho j}}{n_{\rho.}} = \mu_\sigma \qquad \begin{aligned}\rho &= 1,2,\ldots,N\\ \sigma &= 1,2,\ldots,M-1\end{aligned} \tag{4.2}$$

und die Gleichungen der Nebenbedingungen.
Das Gleichungssystem (4.2) ist äquivalent mit

$$\sum_{j=1}^{M-1} H_{j\sigma}\left(\frac{n_{\rho j}}{n_{\rho.}} - \frac{n_{\rho' j}}{n_{\rho'.}}\right) = 0 \qquad \begin{aligned}\rho,\rho' &= 1,2,\ldots,N\\ \sigma &= 1,2,\ldots,M-1\end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem wird von Größen n_{ij} gelöst, für die

$$\frac{n_{\rho j}}{n_{\rho.}} - \frac{n_{\rho' j}}{n_{\rho'.}} = 0 \text{ für alle } \rho,\rho' = 1,\ldots,N \text{ und } j = 1,\ldots,M-1 \text{ gilt.} \tag{4.3}$$

Aus (4.3) folgt für die Werte n_{ij} nach Ausnutzung der Gleichungen über die Nebenbedingungen

$$n_{ij} = \frac{n_{i.}n_{.j}}{n} \text{ für alle } i = 1,2,\ldots,N \text{ und alle } j = 1,2,\ldots,M.$$

Diese Lösung $\left\{n_{ij}^* := \frac{n_{i.}n_{.j}}{n}\right\}$ ist auch die einzige der Bedingungsgleichungen (4.2), die für ein Maximum von $\det H_{M-1}(\{n_{ij}\})$ in Frage kommt, denn es ist

$$\sup_{\{n_{ij}\in\mathbb{R}\}} \det H_{M-1}(\{n_{ij}\}) \geqslant \sup_{\{n_{ij}\in\mathbb{N}\}} \det H_{M-1}(\{n_{ij}\}) \geqslant \det H_{M-1}(\{n_{ij}\}) \underset{n_{ij}\in\mathbb{N}}{>} 0$$

d. h.
für maximierende Größen n_{ij} ist die Matrix $H_{M-1}(\{n_{ij}\})$ nicht singulär und mit ihr auch die Matrix $((H_{jj'})j,j' = 1,\ldots,M-1)$ der algebraischen Komplemente ihrer Elemente. Das Gleichungssystem (4.2) besitzt also für diesen Fall genau eine Lösung, nämlich die triviale (4.3), d. h. $\{n_{ij}^*\}$ ist das einzige System, das den entwickelten Bedingungen für das Maximum von $\det H_{N-1}(\{n_{ij}\})$ genügt.

Völlig analog dazu lassen sich auch für ein System von Extremalwerten $\{n_{ij}^*\}$ der quadratischen Form $a' H_{N-1}(\{n_{ij}\})\, a$ die LAGRANGEschen Gleichungen aufstellen. Diese reduzieren sich zu dem folgenden System:

$$\sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{n_{i\sigma}}{n_{.\sigma}} - \frac{n_{i\sigma'}}{n_{.\sigma'}}\right) a_i a_p = 0 \qquad (\rho = 1,\ldots,N-1\,;\ \ \sigma,\sigma' = 1,\ldots,M), \tag{4.4}$$

das ebenfalls $\left\{n_{ij}^* := \frac{n_{i.}n_{.j}}{n}\right\}$ als Lösung besitzt, und zwar für jedes $a\in\mathbb{R}^{N-1}$, wie es im Hinblick auf die G_a-Optimalität interessiert.

Auch hier gilt: $\{n_{ij}^*\}$ ist das einzige System, das die Gleichungen (4.4) für alle $a\in\mathbb{R}^{N-1}$ löst. Denn ein System $\{n_{ij}\}$, welches das Gleichungssystem (4.4) für alle $a \neq 0$ löst, muß (4.4) insbesondere für jedes $a^{(\rho)} := (0,\ldots,0,a_\rho,0,\ldots,0)' \neq 0 (\rho = 1,\ldots,N-1)$ lösen. Für $a^{(\rho)}$ reduziert sich aber das Gleichungssystem (4.4) zu:

$$\frac{n_{\rho\sigma}}{n_{.\sigma}} - \frac{n_{\rho\sigma'}}{n_{.\sigma'}} = 0 \qquad (\rho = 1,\ldots,N-1;\ \sigma,\sigma' = 1,\ldots,M),$$

was zusammen mit den Nebenbedingungen (1.2) besagt, daß die Form $\{n_{ij}^*\}$ für eine Lösung von (4.4) für alle $a^{(\rho)} \neq 0 (\rho = 1,2,\dots,N-1)$ und erst recht für alle $a \in \mathbb{R}^{N-1}$ auch notwendig ist.

Die Symmetrie der Lösung $\{n_{ij}^*\}$ in i und j erübrigt die analogen Betrachtungen für $b' H_{M-1}(\{n_{ij}\}) b$.

Sind die Größen $\frac{n_{i.} n_{.j}}{n}$ für alle $i = 1,\dots,N$ und alle $j = 1,\dots,M$ ganze Zahlen, so stellt $\{n_{ij}^*\}$ einen Versuchsplan des Modells (1.1) dar. Für diesen lassen sich die aus den obigen Überlegungen vermuteten Optimalitätseigenschaften beweisen:

Satz 4.1:

Ein Versuchsplan der Form $\{n_{ij}^*\}$ ist G-optimal und damit D-optimal und auch der einzige, der diese Eigenschaften hat.

Beweis:

Nach den eben gewonnenen Ergebnissen*) genügt es zu beweisen, daß für alle Versuchspläne $\{n_{ij}\}$ und alle Parameter $a \neq 0$ die Ungleichung

$$\delta_a^2(\{n_{ij}\}) \leq \delta_a^2(\{n_{ij}^*\}) \tag{4.5}$$

gilt, und zwar mit dem Gleichheitszeichen genau dann für alle

$$a \neq 0, \text{ wenn } \{n_{ij}\} = \{n_{ij}^*\}.$$

Diese Ungleichung (4.5) ist mit jeder der folgenden äquivalent:

$$a' H_{N-1}(\{n_{ij}\})\, a \leq a' H_{N-1}(\{n_{ij}^*\})\, a$$

$$\sum_{i,i'=1}^{N-1} \left(\delta_{ii'} n_{i.} - \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{ij} n_{i'j}}{n_{.j}}\right) a_i a_{i'} \leq \sum_{i,i'=1}^{N-1} \left(\delta_{ii'} n_{i.} - \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{i.} n_{.j} n_{i'.} n_{.j}}{n_{.j} n^2}\right) a_i a_{i'}$$

$$\sum_{i,i'=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{ij} n_{i'j}}{n_{.j}} a_i a_{i'} \geqslant \sum_{i,i'=1}^{N-1} \frac{n_{i.} n_{i'.}}{n} a_i a_{i'}$$

$$\sum_{j=1}^{M} \frac{1}{n_{.j}} \left(\sum_{i=1}^{N-1} n_{ij} a_i\right)^2 \geqslant \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^{N-1} n_{i.} a_i\right)^2 \tag{4.6}$$

und diese mit der Ungleichung von CAUCHY-SCHWARZ

$$\sum_{j'=1}^{M} x_{j'}^2 \sum_{j=1}^{M} y_j^2 \geqslant \left(\sum_{j=1}^{M} x_j y_j\right)^2, \tag{4.7}$$

wenn man setzt:

$$x_j := \sqrt{n_{.j}} \quad \text{und} \quad y_j := \frac{1}{\sqrt{n_{.j}}} \sum_{i=1}^{N-1} n_{ij} a_i .$$

---

*) Vgl. auch Hilfssatz 3.3 und Satz 3.3.

Da das Gleichheitszeichen in (4.7) genau dann steht, wenn ein $\lambda \neq 0$ existiert mit $x_j = \lambda y_j$ für alle $j = 1, \ldots, M$, tritt das Gleichheitszeichen in (4.6) und somit in (4.5) genau für die $n_{ij} (i = 1, \ldots, N; j = 1, \ldots, M)$ ein, für die

$$\sqrt{n_{.j}} = \frac{\lambda}{\sqrt{n_{.j}}} \sum_{i=1}^{N-1} n_{ij} a_i \, (\lambda \neq 0), \; j = 1, \ldots, M,$$

also

$\frac{1}{\lambda} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{n_{ij}}{n_{.j}} a_i$ für alle $a \neq 0$ und alle $j = 1, 2, \ldots, M$ erfüllt ist.

Diese Bedingungen für die Größen n_{ij} lassen sich auch in der Form schreiben:

$$\sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{n_{ij}}{n_{.j}} - \frac{n_{ij'}}{n_{.j'}} \right) a_i = 0 \qquad j, j' = 1, \ldots, M.$$

Da dieses Gleichungssystem für alle $a \in \mathbb{R}^{N-1}$ gelten muß, also nur $\{n_{ij}^*\}$ als Lösung besitzt, ist auch die Eindeutigkeitsaussage bewiesen.

5. Modifiziertes Beobachtungsmodell mit nichtganzzahligen Versuchsplänen

Wie bereits im Abschnitt 1 erwähnt wurde, besitzen die Versuchspläne $\{n_{ij}^*\}$ den Vorteil, daß sie im Gegensatz zu anderen Versuchsplänen $\{n_{ij}\}$ eine bequeme Darstellung der interessierenden Schätzfunktionen $\hat{\mu}(y)$, $\hat{\alpha}_i(y)$, $\hat{\beta}_j(y)$ der unbekannten Parameter μ, α_i, β_j ermöglichen. Es gilt [SCHEFFE, S. 119] nämlich bei $\{n_{ij}^*\}$:

$$\hat{\mu}(y) = \frac{1}{n} Y_{...}, \; \hat{\alpha}_i(y) = \frac{1}{n_{i.}} Y_{i..} - \frac{1}{n} Y_{...} \quad \text{und} \quad (i = 1, \ldots, N)$$

$$\hat{\beta}_j(y) = \frac{1}{n_{.j}} Y_{.j.} - \frac{1}{n} Y_{...} \qquad (j = 1, \ldots, M).$$

Man sieht, daß alle Schätzfunktionen nur über die aggregierten Größen $Y_{ij.}$ von den Einzelbeobachtungen Y_{ijk} abhängen. Das bietet einen Ansatzpunkt zur Interpretation der Versuchsvorschrift für den Fall, daß die Größen n_{ij}^* keine ganzen Zahlen sind:

Man kann $Y_{ij.}$ als Gesamtbeobachtung in der Zelle (i,j) deuten und $\{n_{ij}\}$ anstatt als Anzahl der Einzelbeobachtungen(-versuche) einfach als Menge der Versuchssubstanz (des Beobachtungsmaterials) in der Zelle (i,j), was keine ganze Zahl zu sein braucht, wie z. B. bei Gewichten, Flächen, Massen usw. Diese Überlegung veranlaßt den Übergang vom Modell (1.1) zu dem folgenden, das durch Summation über k entsteht:

$$Y_{ij.} = n_{ij}(\mu + \alpha_i + \beta_j) + Z_{ij.} \qquad (i = 1, \ldots, N; \; j = 1, \ldots, M) \tag{5.1}$$

Man überzeugt sich sofort (z. B. durch das Aufstellen der Normalgleichungen zu (1.1), bzw. der Formel (3.2)), daß die Verallgemeinerten Varianzen des Systems von Schätzfunktionen $\hat{m}(y)$, $\hat{a}_i(y)$, $\hat{b}_j(y)$ sowie die Nichtzentralitätsparameter zu H_a und H_b des Modells (5.1) mit denen des Modells (1.1) übereinstimmen*). Damit sind aber auch die Optimalitätsforderungen an die Versuchspläne für beide Modelle identisch. Da aber im Modell (5.1) auch nichtganzzahlige Größensysteme $\{n_{ij}\}$ einen Sinn haben, also Versuchspläne darstellen, läßt sich der Satz 4.1 für das Modell (5.1) verschärfen und man erhält:

Satz 5.1:

Für das Beobachtungsmodell

$$Y_{ij.} = n_{ij}(\mu + \alpha_i + \beta_j) + Z_{ij.} \qquad (i = 1,\dots,N;\ j = 1,\dots,M),$$

bei dem

$Y_{ij.}$ die Gesamtbeobachtung in der Zelle (i,j),

μ, α_i, β_j die unbekannten Einflüsse der Zelle (i,j) pro Mengeneinheit der Beobachtungssubstanz,

n_{ij} die Menge der Versuchssubstanz in der Zelle (i,j) und

$Z_{ij.}$ unabhängige normalverteilte „Fehler" mit $E(Z_{ij.}) = o$ und $\operatorname{Var}(Z_{ij.}) = n_{ij}\sigma^2$

darstellen, existiert bei allen Beschränkungen des Beobachtungsmaterials der Form (1.2) stets ein gleichmäßig bester Versuchsplan und nur einer, nämlich $\{n_{ij}^*\}$. Der Versuchsplan $\{n_{ij}^*\}$ ist auch der einzige D-optimale Versuchsplan dieses Modells.

Dieser Satz und das Modell (5.1) heben aber die Schwierigkeit nicht auf, die entsteht, wenn das Beobachtungsmaterial diskret, d. h. n_{ij} tatsächlich die Anzahl von Versuchen darstellt, und die n_{ij}^* nicht alle ganzzahlig sind. Für diesen Fall bietet der Satz 4.1 nur einen Anhaltspunkt für eine gute Versuchsplanung: Man kann z. B. etwaige Rundungen an n_{ij}^* im Einklang mit den Nebenbedingungen (1.2) vornehmen. Diese „approximativ besten" Versuchspläne stellen aber „ebensowenig Einbuße an Güte" des Verfahrens dar, zumindest für große Werte n_{ij}^*, wie diejenigen, die im kontinuierlichen Fall entstehen, wenn man allzulange Dezimalzahlen rundet. Für kleine Werte n_{ij}^* kann man sich durch „Probieren" helfen, d. h. z. B. durch Aufstellen eines geeigneten Programms für elektronische Rechenmaschinen, das D-optimale Versuchspläne, die ja trivialerweise stets existieren, ermittelt, indem es diejenigen der endlich vielen Größensysteme $\{n_{ij}\}$ bei Nebenbedingungen $\{n_{i.}, n_{.j}\}$ aussortieren läßt, für die der $H_{N-1}(\{n_{ij}\})$ den größten Wert annimmt. Dabei können mehrere D-optimale Versuchspläne auftreten, während ein gleichmäßig optimaler Versuchsplan überhaupt nicht zu existieren braucht.

Für die Situationen mit schwächeren Beobachtungsbeschränkungen, wie sie im nächsten Abschnitt 6 behandelt werden, überträgt sich alles oben Erwähnte wörtlich.

---

*) Man beachte, daß der Nenner der Testgröße bei dem Modell (5.1) anders ist als bei dem Modell (1.1), was aber die hier interessierenden Fragestellungen nicht berührt.

6. Optimale Versuchspläne bei schwächeren Beobachtungsbeschränkungen

Die eben gewonnenen Ergebnisse lassen sich auch auf Situationen übertragen, bei denen die Beobachtungsbeschränkungen schwächer sind als die anfangs formulierten. Die praktisch interessanten Fälle, die nur durch Vorgabe von $\{n_{i.}\}$ oder $\{n_{.j}\}$ oder überhaupt nur durch Vorgabe des Gesamt-Stichprobenumfangs n gekennzeichnet*) sind, lassen sich folgendermaßen behandeln:

Da $\{n_{ij}^*\}$ für jede Vorgabe von $\{n_{i.}, n_{.j}\}$ im besprochenen Sinn optimal ist, kann man für die Optimalität des Versuchsplanes relevanten Größen an der Stelle $\{n_{ij}^*\}$ jetzt in Abhängigkeit der noch freien Randbedingungen $\{n_{.j}\}$ bzw. $\{n_{i.}\}$ bzw. $\{n_{i.}, n_{.j}\}$ studieren.

Zur Bestimmung der Verallgemeinerten Varianzen V_a, V_b und V_p an der Stelle $\{n_{ij}^*\}$ genügt es nach Hilfssatz 3.1 und 3.2 die Determinante von $H_{N-1}(\{n_{ij}\})$ an der Stelle $\{n_{ij}^*\}$ zu berechnen.

Durch Einsetzung von $\{n_{ij}^*\}$ und durch elementare Zeilen- und Spaltenumformungen ergibt sich:

$$\det H_{N-1}(\{n_{ij}^*\}) = \prod_{i=1}^{N-1} n_{i.} \det\left(\left(\delta_{ii'} - \frac{n_{i.}}{n}\right) i,i' = 1,\ldots,N-1\right)$$

$$= \prod_{i=1}^{N-1} n_{i.} \det \begin{bmatrix} \left(1-\frac{n_{1.}}{n}\right) & \left(-\frac{n_{2.}}{n}\right) & \cdots & \left(-\frac{n_{N-1.}}{n}\right) \\ \left(-\frac{n_{1.}}{n}\right) & \left(1-\frac{n_{2.}}{n}\right) & \cdots & \left(-\frac{n_{N-1.}}{n}\right) \\ \vdots & & & \vdots \\ \left(-\frac{n_{1.}}{n}\right) & \cdots & \cdots & \left(1-\frac{n_{N-1.}}{n}\right) \end{bmatrix}$$

$$= \prod_{i=1}^{N-1} n_{i.} \det \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1-\sum_{i=1}^{N-1} \frac{n_{i.}}{n} \end{bmatrix}$$

$$= \left(\prod_{i=1}^{N-1} n_{i.}\right)\left(1-\sum_{i=1}^{N-1} \frac{n_{i.}}{n}\right) = \left(\frac{1}{n}\prod_{i=1}^{N-1} n_{i.}\right)\left(n-\sum_{i=1}^{N-1} n_{i.}\right) = \frac{1}{n}\prod_{i=1}^{N} n_{i.}$$

und damit nach Hilfssatz 3.1 und 3.2:

---

*) Die speziellen Einzelfälle, bei denen nur ein Teil der Randsummen der einen oder der anderen oder beider Klassen vorgegeben ist, lassen sich, wie man verfolgen kann, durch völlig gleiche Schlüsse erledigen.

$$V_p = \frac{n\sigma^{2(N+M-1)}}{\prod_{i=1}^{N} n_{i.} \prod_{j=1}^{M} n_{.j}}, \qquad V_a = \frac{n\sigma^{2(N-1)}}{\prod_{i=1}^{N} n_{i.}}, \qquad V_b = \frac{n\sigma^{2(M-1)}}{\prod_{i=1}^{M} n_{.j}}. \tag{6.1}$$

Da ein Produkt positiver Faktoren mit vorgegebener Summe seinen größten Wert annimmt, wenn die Faktoren alle einander gleich sind, folgt aus (6.1) und der D-Optimalität von $\{n_{ij}^*\}$, daß die Verallgemeinerten Varianzen V_a, V_b und V_p die kleinstmöglichen Werte annehmen bei $\{n_{ij}^*\}$ und bei Randsummen $\{n_{i.}^* := \frac{n}{N}, n_{.j}\}$, $\{n_{i.}, n_{.j}^* := \frac{n}{M}\}$ bzw. $\{n_{i.}^*, n_{.j}^*\}$.

Diesen Sachverhalt kann man auch so formulieren:

Satz 6.1:

Bestehen Beschränkungen des Beobachtungsmaterials nur durch Vorgabe von $\{n_{.j}\}$ oder $\{n_{i.}\}$ oder überhaupt nur von n, dann sind die Versuchspläne

$$\left\{\frac{n_{.j}}{N}\right\}, \left\{\frac{n_{i.}}{M}\right\} \quad \text{bzw.} \quad \left\{\frac{n}{NM}\right\}$$

die bestmöglichen, und zwar in dem Sinn, daß sie die kleinstmöglichen Werte für die Verallgemeinerten Varianzen V_a, V_b bzw. V_p sichern.

Diese Versuchspläne sind ferner gleichmäßig besser als alle anderen bei vorgegebenen Randsummen $\{n_{i.}^*, n_{.j}\}$, $\{n_{i.}, n_{.j}^*\}$ bzw. $\{n_{i.}^*, n_{.j}^*\}$.

Bemerkung:

Eine zum ersten Teil dieses Satzes analoge Aussage über die Gütefunktionen der interessierenden F-Teste, d. h., daß die speziellen Randsummen $\{\frac{n}{N}, n_{.j}\}$ und $\{n_{i.}, \frac{n}{M}\}$ die Nichtzentralitätsparameter $\delta_a^2(\{n_{ij}^*\})$ bzw. $\delta_b^2(\{n_{ij}^*\})$ in allen $a \in \mathbb{R}^{N-1}$ bzw. $b \in \mathbb{R}^{M-1}$ gleichmäßig vergrößern, ist nur für $N = 2$ bzw. $M = 2$, d. h. für verallgemeinerte Zwei-Stichproben-Probleme, richtig.

Beweis:

Zu zeigen genügt, daß nur für $N = 2$ die Ungleichung $\delta_a^2(\{n_{ij}^*\}) \leqslant \delta_a^2\left(\left\{\frac{n_{.j}}{N}\right\}\right)$ für alle $a \neq 0$ und alle $\{n_{i.}\}$ gilt, während das Gleichheitszeichen genau dann steht, wenn $n_{i.}^* = n_{i.}$ für alle $i = 1, \dots, N$ ist.

Die Ungleichung ist nach Hilfssatz 2.4 äquivalent mit:

$$\sum_{i,i'=1}^{N-1} \left(n_{i.}\delta_{ii'} - \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{i.}n_{.j}n_{i'.}n_{.j}}{n_{.j}n^2} \right) a_i a_{i'} \leqslant \sum_{i,i'=1}^{N-1} \left(\frac{n}{N}\delta_{ii'} - \sum_{j=1}^{M} \frac{n_{.j}^2}{n_{.j}N^2} \right) a_i a_{i'}$$

und diese mit

$$\sum_{i=1}^{N-1} n_{i.}a_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{N-1} n_{i.}a_i\right)^2 \leqslant \frac{n}{N}\sum_{i=1}^{N-1} a_i^2 - \frac{n}{N^2}\left(\sum_{i=1}^{N-1} a_i\right)^2. \tag{6.2}$$

Die obige Behauptung wird in zwei Teilen bewiesen:

a) Beweis für $N = 2$.

Für $N = 2$ reduziert sich (6.2) zu

$$n_{1.}a_1^2 - \tfrac{1}{n}n_{1.}^2 a_{1.}^2 \leqslant \tfrac{n}{2}a_1^2 - \tfrac{n}{4}a_1^2,$$

was wegen $a_1 = a \neq 0$, also $a_1^2 > 0$, äquivalent ist mit

$$n_{1.} - \frac{n_{1.}^2}{n} \leqslant \frac{n}{4}, \quad \text{d. h. mit} \quad n_{1.}\cdot(n-n_{1.}) \leqslant \frac{n^2}{4}.$$

Diese Ungleichung folgt aber aus der Ungleichung

$$n^2 = (n_{1.}+n_{2.})^2 = n_{1.}^2 + n_{2.}^2 + 2n_{1.}n_{2.} \geqslant 4n_{1.}\,n_{2.} = 4n_{1.}(n-n_{1.}),$$

die richtig ist wegen

$$0 \leqslant (n_{1.}-n_{2.})^2 = n_{1.}^2 + n_{2.}^2 - 2n_{1.}n_{2.}\,. \tag{6.3}$$

Da das Gleichheitszeichen in (6.3) nur für $n_{1.} = n_{2.}$ gilt, d. h. für $n_{i.} = n_{i.}^*$ $(i = 1,2)$, ist die Behauptung für $N = 2$ vollständig bewiesen.

b) Gegenbeispiel für $N \geqslant 3$.

Bei $N \geqslant 3$ kann man sich auf $n \geqslant 4$ beschränken, da für $n = 3$ nur die einzigen Randsummen $n_i = 1 = \frac{n}{N} = n_i^*$ möglich sind, so daß nichts zu beweisen ist.

Das Bestehen der Ungleichung (6.2) führt für $N \geqslant 3$ und $n \geqslant 4$ z. B. für $a := (a_1, o, \ldots, o) \neq 0$ und $\{\tilde{n}_{i.}\} := \{\tilde{n}_{1.} := \frac{n}{N} + 1, \tilde{n}_{2.}, \ldots, \tilde{n}_{N.}\}$ verträglich mit (1.2) zum Widerspruch:

Die Ungleichung (6.2) besagt für dieses Beispiel:

$$\left(\frac{n}{N}+1\right) - \frac{1}{n}\left(\frac{n^2}{N^2} + 2\frac{n}{N} + 1\right) \leqslant \frac{n}{N} - \frac{n}{N^2}, \quad \text{woraus folgt, daß}$$

$$1 - \frac{2}{N} - \frac{1}{n} \leqslant 0$$

gelten soll, was aber wegen $N \geqslant 3$ und $n \geqslant 4$ nicht sein kann.

Literatur

GANTMACHER, F. R.: Matrizenrechnung I, Berlin 1965.

KARLIN, S., and W. J. STUDDEN: Optimal experimental designs, Ann. Math. Stat., **37**, 1966, 783–815.

KENDALL, M. G., and A. STUART: The advanced theory of statistics III, London 1966.

KIEFER, J.: On the nonrandomized optimality and the randomized nonoptimality of symmetrical designs, Ann. Math. Stat., **29**, 1958, 675–699.

–: Optimum experimental designs, J. Royal Stat. Soc. Ser. B, **21**, 1959, 273–319.

LEHMANN, E.: Testing statistical hypotheses, New York 1959.

MORGENSTERN, D.: Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung und Mathematische Statistik, Heidelberg 1964.

SCHEFFE, H.: Analysis of variance, New York 1959.

WALD, A.: On the efficient design of statistical investigations, Ann. Math. Stat., **14**, 1943, 134–140.

WITTING, H.: Mathematische Statistik, Stuttgart 1966.