arXiv:2301.02859v1 [stat.ME] 7 Jan 2023

D-最优和近似 *D*-最优的球上二元响应精确设计

Martin Radloff[†] 和 Rainer Schwabe[‡]

摘要： 本文将 Radloff 和 Schwabe（2019a）的结果推广到一类特殊的对称强度函数。这类函数包括采用 logit 和 probit 链接的二元响应模型。为确定 k维球上两个非退化轨道的位置和权重，通常需要求解一个三方程组。利用对称性，可将该方程组简化为单个方程。另一个结果是，支撑点的数量可以减少到最小值。这些具有最少支撑点的设计效率很高。所得结果可推广到任意椭球设计区域。

关键词和短语： 二元响应模型， *D*-最优性， k维球，logit 和 probit 模型，多元回归模型，单形。

1. 引言

球形设计空间可出现在工程学或物理学问题中，在这类问题里，模型的有效性可假定成立于目标值周围的球形区域。因此，早期文献已研究球形设计空间上的（线性）模型，例如 Kiefer（1961）和 Farrell 等人（1967）讨论了球上的多项式回归。此后的一些论文也继续探讨了这些思想，但研究重点同样仅限于线性问题。例如，Lau（1988）利用典范矩在 k维单位球上拟合多项式。Dette 等人（2005，2007）和 Hirao 等人（2015）则使用调和多项式和泽尼克多项式，在单位圆盘（二维单位球）、三维及 k维单位球上进行拟合。另一方面，广义线性模型也已得到充分研究，并应用于实际问题。例如，Ford 等（1992）和 Biedermann 等（2006）已研究过一维区间上的 logit 和 probit 模型。但似乎尚无文献将这两个主题结合起来。

在我们的论文 Radloff 和 Schwabe（2019b）中，我们首次将非线性或广义线性模型与球形设计区域结合起来。我们在后续论文 Radloff 和 Schwabe（2019a）中，将这些结果扩展到了更广泛的非线性模型。

[†]通讯作者：Martin Radloff，数学随机学研究所，奥托·冯·格里克大学，邮政信箱 4120，39016 马格德堡，德国，martin.radloff@ovgu.de
[‡]Rainer Schwabe，数学随机学研究所，奥托·冯·格里克大学，邮政信箱 4120，39016 马格德堡，德国，rainer.schwabe@ovgu.de

为便于理解，我们将从模型描述开始，并简要概述迄今为止的研究发现。接着，我们将考察一类特殊的强度函数，这类函数可以降低寻找（局部） D-最优设计的复杂度。随后，我们将通过在球上构建高效设计，解决最优设计通常并非精确设计这一问题。

2. 一般模型描述

正如 Radloff 和 Schwabe（2019年b）以及 Radloff 和 Schwabe（2019a）所述，我们描述了单位球 $\mathbb{B}_k = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^k$ 上两类特殊线性和非线性模型的（局部） D-最优设计，其中单位球的维度为 ak: $x_1^2 + \ldots + x_k^2 \leq 1\}$ 且满足 $k \in \mathbb{N}$。在此，我们仅关注（非线性）多元回归模型，这意味着线性预测子为

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{\beta} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k$$

回归函数为 $\boldsymbol{f}\colon \mathbb{B}_k \to \mathbb{R}^{k+1}, \boldsymbol{x} \mapsto (1, x_1, \ldots, x_k)^\top$，参数向量为$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k)^\top \in \mathbb{R}^{k+1}$。单个支持点（或基本）信息矩阵应可表示为以下形式

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

具有强度（或效率）函数 λ，该函数仅取决于线性预测子 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{\beta}$的值。这些单支撑点（或基本）信息矩阵是具有独立观测的（广义）设计 ξ 的信息矩阵的基础

$$\boldsymbol{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}) = \int \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\beta})\, \xi(\mathrm{d}\boldsymbol{x}) = \int \lambda\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{\beta}\big)\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^\top \xi(\mathrm{d}\boldsymbol{x})\ .$$

这里，广义设计指设计区域 $\mathbb{B}_k$上的任意概率测度。这些信息矩阵可用于定义（局部） D-最优性，这是试验设计理论中最受欢迎的准则之一。若设计 $\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0}$ 的正则信息矩阵为 $\boldsymbol{M}(\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0}, \boldsymbol{\beta}^0)$，则称其为（局部） D-最优（在 $\boldsymbol{\beta}^0$处），当且仅当对设计空间上的所有适当概率测度 ξ（此处为$\mathbb{B}_k$），均有 $\det(\boldsymbol{M}(\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0}, \boldsymbol{\beta}^0)) \geq \det(\boldsymbol{M}(\xi, \boldsymbol{\beta}^0))$。这一最优性准则可解释为最小化（渐近）置信椭球的体积。

3. 先前结果

在 Radloff和Schwabe（2016年）中，我们陈述了有关等变性和不变性的结果。通过以类似的方式旋转设计空间 $\mathbb{B}_k$ —— k 维单位球——以及参数空间$\mathbb{R}^{k+1}$，多重回归问题的线性预测子可化简为

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{\beta} = \beta_0 + \beta_1 x_1 \quad \text{and} \quad \beta_1 \geq 0\ . \tag{3.1}$$

利用固定 x_1 的旋转不变性，这意味着对 $O(k)$ 中所有保持 x_1 分量不变的正交变换均不变；因此，（局部） D-最优（广义）设计 ξ^* 可分解（$\xi^* = \xi_1^* \otimes \eta$）为定义在 $[-1, 1]$ 上、针对 x_1 的边际概率测度 ξ_1^*，以及给定 x_1 的概率核 η。对于固定的 x_1，核 $\eta(x_1, \cdot)$ 是

半径为 $\sqrt{1-x_1^2}$ 的（$k-1$）维球面上的均匀分布——即位置 x_1 处的轨道。

因此，多维问题可归结为一维边际问题。只需确定各轨道的位置及其权重。要得到精确设计，必须将均匀轨道离散化，例如使用正则单纯形。

在我们的第一篇论文——Radloff 和 Schwabe（2019b）——中，我们从强度函数属于单调函数类的模型入手。这类模型已在一维情形下得到研究，例如 Konstantinou 等（2014）的工作；Schmidt 和 Schwabe（2017）则研究了多维长方体或正交象限上的情形。这些作者给出了强度函数 λ 的以下四个条件：

(A1) λ 在 $\mathbb{R}$ 上为正，且二阶连续可微。

(A2) 一阶导数 λ' 在 $\mathbb{R}$ 上为正。

(A3) $u = \frac{1}{\lambda}$ 的二阶导数 u'' 在 $\mathbb{R}$上是单射。

(A4) 函数 $\frac{\lambda'}{\lambda}$ 是非递增的。

条件 **(A2)** 是“单调强度函数类”这一名称的由来。此类的强度函数必须始终满足 **(A1)** 至 **(A3)**。**(A4)** 是确保唯一性的附加条件。为简洁起见，

$$q(x_1) = \lambda(\beta_0 + \beta_1 x_1)$$

采用这种记法，性质 **(A1)**、**(A2)**、**(A3)** 和 **(A4)** 分别对应于 q（当 $\beta_1 > 0$ 时），反之亦然。强度函数为 $q_P(x_1) = \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1)$ 的泊松回归、负二项回归，以及带删失的特殊比例风险模型（参见 Schmidt 和 Schwabe（2017））均满足这四个条件。

若 $\beta_1 = 0$，则强度函数 q 始终为常数。这会得到一个（局部）D-最优设计，正如在线性模型中所见。在 Pukelsheim（1993，第 15.12 节）中，此类设计由正则单纯形的各顶点构成，顶点权重相等；该单纯形内接于单位球面，即设计空间的边界。单纯形的朝向任意。为方便读者，现重述 Radloff 和 Schwabe（2019年b）中关于 $\beta_1 > 0$ 的主要结果。

定理 1。对于满足条件$(\mathrm{A1})$-$(\mathrm{A3})$ 且具有强度函数的多重回归问题(3.1)，存在一个（局部） D-最优设计，其中一个支撑点为$(1, 0, \ldots, 0)^\top$，其余 k 支撑点为一个可任意旋转的$(k-1)$维正则单纯形的顶点，该单纯形最大限度地内接于 k维单位球与一个具有 $x_1 = x_{12}^*$的超平面的交集中。

- 对于 $k \geq 2$ 位置 $x_{12}^* \in (-1,1)$ 是

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

  如果还满足$(\mathrm{A4})$，则解 x_{12}^* 是唯一的。

- 对于 $k=1$，位置 $x_{12}^* \in [-1,1)$ 是以下方程的解之一

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

如果这样的解存在于 $[-1,1)$中，否则为 $x_{12}^* = -1$。如果还满足 $(\mathrm{A}4)$，则该解 x_{12}^* 是唯一的。

该设计采用等权重，权重为 $\frac{1}{k+1}$。 —

需要注意的是，对于固定的 $\boldsymbol{\beta}$，该定理无需在整个实数轴 $\mathbb{R}$上满足 (A1) 至 (A4)。只需在球内满足这些条件，并且分别对 q 满足 $x_1 \in [-1,1]$ 、对 λ满足$[\beta_0-\beta_1, \beta_0+\beta_1]$即可。但该模型始终必须在整个实数轴上满足这些条件。

在我们的第二篇论文——Radloff 和 Schwabe（2019a）——中，条件 (A2) 和 (A3) 被 (A2′) 和 (A3′) 所替代，并增加了第五个性质 (A5)。

(A2′) λ 是单峰的，其众数为 $c^{(\mathrm{A}2')}{}_{\lambda} \in \mathbb{R}$。

(A3′) 存在一个阈值 $c^{(\mathrm{A}3')}{}_{\lambda} \in \mathbb{R}$，使得 $u = \frac{1}{\lambda}$ 的二阶导数 u'' 在 $(-\infty, c^{(\mathrm{A}3')}{}_{\lambda}\,-\,]$ 上是单射，且在 $[c_\lambda^{(\mathrm{A}3')}, \infty)$ 上也是单射。

(A5) $u = \frac{1}{\lambda}$ 在 $z \to \infty$时渐近地支配 z^2。

在此语境下，条件 (A2′) 表示存在一个 $c^{(\mathrm{A}2')}{}_{\lambda} \in \mathbb{R}$，使得 λ' 在 $(-\infty, c^{(\mathrm{A}2')\lambda})$ 上为正，在 $(c^{(\mathrm{A}2')\lambda}, \infty)$ 上为负。因此，只有一个局部最大值，且它同时也是全局最大值。因此，满足 (A1)、(A2′) 和 (A3′) 的强度函数类称为单峰强度函数类。

事实上，(A2) 或 (A3) 并不分别蕴含 (A2′) 或 (A3′)。如前所述，我们只关注单位球以及区间 $x_1 \in [-1,1]$（当 q 时）或 $[\beta_0-\beta_1, \beta_0+\beta_1]$（当 λ 时）。因此，在我们的特殊情形下，利用任意一个 $c_\lambda > \beta_0+\beta_1$，即可将 (A2) 和 (A3) 转化为 (A2′) 和 (A3′)；这意味着 c_q 位于区间 $[-1,1]$ 之外，并且只考虑函数的一个分支。

性质 (A5) 意味着

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

这意味着 $u(z) = \frac{1}{\lambda z()}$ 趋于(±) 无穷大的速度快于 z^2（当 $z \to \infty$ 时）。

与 (A1) 至 (A4) 一样，条件 (A2′)、(A3′) 和 (A5) 可以在强度函数 λ 与其简写形式 q 之间相互转换（当 $\beta_1 > 0$ 时），反之亦然——类似地，$c_q^{(\cdot)} = \frac{c_\lambda^{(\cdot)} - \beta_0}{\beta_1}$ 与 (·) 对应时为 (A2′)、(A3′) 或空。

logit模型的强度函数为

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

并且 probit 模型具有

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

其密度函数 ϕ 和标准正态分布的累积分布函数 Φ。这两个模型均满足全部五个条件 (A1)、(A2′)、(A3′)、(A4)、(A5)，并且共享一个共同的 $c^{(\mathrm{A2}')}_{\lambda} = c^{(\mathrm{A3}')}{}_{\lambda} = 0$，记作 $c_\lambda = 0$。类似地，对于 q，$c_q = -\frac{\beta_0}{\beta_1}$。

除了这两个模型之外，其他模型（例如互补对数-对数模型，参见 Ford 等（1992））的强度函数为 $\lambda_{\mathrm{comp\,log\,log}}(z) = \exp(2z)\exp(\exp(z))-1$，在 $c^{(\mathrm{A2}')}_{\lambda} \approx 0.466011$ 和 $c^{(\mathrm{A3}')}_{\lambda} \approx 0.049084$的条件下满足全部五个条件，但在此模型中，众数 $c^{(\mathrm{A2}')}{}_{\lambda}$ 与阈值 $c^{(\mathrm{A3}')}{}_{\lambda}$ 并不重合。

我们证明，如果（简洁的）强度函数 q 满足 (A1)、(A2′)、(A3′) 和 (A5)，则（局部）D-最优设计 $\xi^* = \xi_1^* \otimes \eta$ 恰好集中在两个轨道上，而这两个轨道正是边际设计 ξ_1^*的支撑点。证明思路基于 Biedermann 等（2006）和 Konstantinou 等（2014）的工作。

下一个定理是我们第二篇论文——Radloff 和 Schwabe（2019a）——的主要结果，现为方便读者而转载。该定理刻画了最优边际设计 ξ_1^* 的两个支撑点的位置。

定理 2. 对于满足$(\mathrm{A1})$、$(\mathrm{A2}')$、$(\mathrm{A3}')$ 和$(\mathrm{A5})$ 的强度函数 q，简化问题(3.1) 在 $k \geq 2$ 和 $\beta_1 > 0$ 条件下有一个（局部） D-最优边际设计 ξ_1^*，其恰有两个支撑点 x_{11}^* 和 x_{12}^*，满足 $x_{11}^* > x_{12}^*$，权重为 $w_1 = \xi_1^*(x_{11}^*)$ 和 $w_2 = \xi_1^*(x_{12}^*)$。

有 *3* 种情形：

(a) *If* $c_q^{(\mathrm{A2}')} > 1$ *and* $c_q^{(\mathrm{A3}')} \notin [-1,1]$, *then* $x_{11}^* = 1$, $w_1 = \frac{1}{k+1}$, $w_2 = \frac{k}{k+1}$ *and* $x_{12}^* \in (-1,1)$ *is solution of*

$$\frac{q'(x_{12}^*)}{q(x_{12}^*)} = \frac{2\,(1+kx_{12}^*)}{k\,(1-{x_{12}^*}^2)}\ . \tag{3.2}$$

如果还满足 ***(A4)***，则解 x_{12}^* 唯一。

(b) 如果 $c^{(\mathrm{A2}')_q} < -1$ 且 $c^{(\mathrm{A3}')_q} \notin [-1,1]$，那么 $x_{12}^* = -1$、$w_1 = \frac{k}{k+1}$、$w_2 = \frac{1}{k+1}$ 和 $x_{11}^* \in (-1,\ 1)$ 是以下问题的解

$$\frac{q'(x_{11}^*)}{q(x_{11}^*)} = \frac{2\,(-1+kx_{11}^*)}{k\,(1-{x_{11}^*}^2)}\ . \tag{3.3}$$

此外，如果满足 ***(A4)***，则解 x_{11}^* 是唯一的。

(c) 否则 $c^{(\mathrm{A2}')_q} \in [-1,1]$ 或 $c^{(\mathrm{A3}')_q} \in [-1,1]$。
设 $x, y \in \mathbb{R}$（其中 $x > y$，且 $\alpha \in \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$）是方程组的解：

$$\frac{q'(x)}{q(x)} + \frac{2}{x-y} + (k-1)\,\frac{q'(x)\,(1-x^2)\,(\frac{1}{2}-\alpha) + q(x)\,(-2\,x)\,(\frac{1}{2}-\alpha)}{q(x)\,(1-x^2)\,(\frac{1}{2}-\alpha) + q(y)\,(1-y^2)\,(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \tag{3.4}$$

$$\frac{q'(y)}{q(y)} - \frac{2}{x-y} + (k-1)\,\frac{q'(y)\,(1-y^2)\,(\frac{1}{2}+\alpha) + q(y)\,(-2\,y)\,(\frac{1}{2}+\alpha)}{q(x)\,(1-x^2)\,(\frac{1}{2}-\alpha) + q(y)\,(1-y^2)\,(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \tag{3.5}$$

$$\frac{1}{\frac{1}{2}-\alpha} - \frac{1}{\frac{1}{2}+\alpha} + (k-1)\,\frac{q(x)\,(1-x^2) - q(y)\,(1-y^2)}{q(x)\,(1-x^2)\,(\frac{1}{2}-\alpha) + q(y)\,(1-y^2)\,(\frac{1}{2}+\alpha)} = 0 \tag{3.6}$$

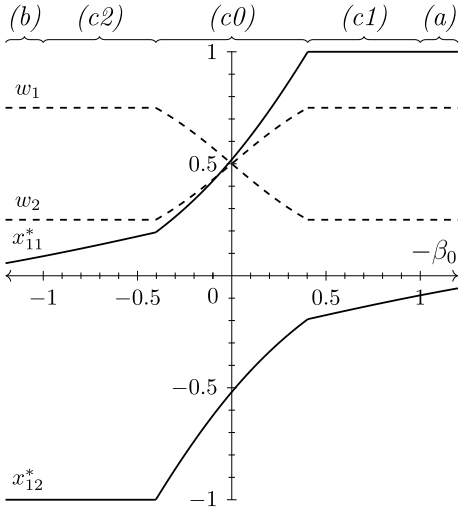


图1： $k = 3$ 和 $\beta_1 = 1$的logit模型： x_{11}^* 和 x_{12}^* （实线）以及相应权重 w_1 和 $w_2 = 1 - w_1$ （虚线）对 $-\beta_0 = -\frac{\beta_0}{\beta_1} = c_q \in [-1.2, 1.2]$的依赖关系。

(c0) 若 $x, y \in (-1, 1)$ （其中 $x > y$，且 $\alpha \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$）是方程组的解，则轨道位置为 $x_{11}^* = x$, $x_{12}^* = y$ ，对应的权重为 $w_1 = \frac{1}{2} - \alpha$和 $w_2 = \frac{1}{2} + \alpha$。

(c1) 若 $x \geq 1$和 $y \in (-1, 1)$，则 $x_{11}^* = 1$、 $w_1 = \frac{1}{k+1}$、$w_2 = \frac{k}{k+1}$和 $x_{12}^* \in (-1, 1)$ 是方程(3.2)的解。***(c2)*** 若 $y \leq -1$和 $x \in (-1, 1)$，则 $x_{12}^* = -1$、 $w_1 = \frac{k}{k+1}$、 $w_2 = \frac{1}{k+1}$和 $x_{11}^* \in (-1, 1)$ 是方程(3.3)的解。

注 1. </style}对于，无需重述整个定理，只需说明情形 (c) 中的两项主要变化。因此，权重始终为 $w_1 = w_2 = \frac{1}{2}$， 方程组 **(3.4)–(3.6)** 被替换为

$$\frac{q'(x)}{q(x)} + \frac{2}{x - y} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{q'(y)}{q(y)} - \frac{2}{x - y} = 0 \,. \tag{3.7}$$

为说明这一复杂问题，我们重新考察维度为 $k = 3$、且具有 $\beta_1 = 1$ 的 logit模型。我们（数值地）绘制了轨道位置 x_{11}^* 和 x_{12}^*，以及相应的权重 w_1 和 $w_2 = 1 - w_1$ 随 $-\beta_0 = -\frac{\beta_0}{\beta_1} = c_q$ 变化的情况，见图 1。情形 *(a)*和 *(b)*符合定理 1 以及 Radloff 和 Schwabe （2019b）的结果。情形 *(c1)* 和*(c2)* 给出了边缘极值解，分别与 *(a)* 和 *(b)*相同。因此，对于这四种情形，始终存在一个支撑点数最少的（局部） D-最优精确设计。如定理 1 所述，它由 $x_1 = -1$ 中的一个极点，或 $x_1 = 1$ ，以及一个内接于非退化轨道的（正则）单形的 k 个顶点组成。但问题情形是*(c0)* ，因为（局部） D-最优（广义）设计由两个非退化轨道组成，而且其权重很少适合离散化。在 Radloff 和 Schwabe（2019a）中，我们给出了 logit模型的两个例子（$k = 3$、 $\beta_1 = 1$），并据此导出了（近似）精确设计。

对于 $-\beta_0 = 0$ ，两个轨道位置关于 0 对称，即 $x_{11}^* = -x_{12}^* \approx 0.52$，且权重为 $\xi_1^*(x_{11}^*) = \xi_1^*(x_{12}^*) = \frac{1}{2}$。这两个轨道被离散化为两个

二维单形——总计 6 个权重相等的支撑点；见图 2（左图）。

对于 $-\beta_0 = -0.1$，它是 $x_{11}^* \approx 0.42$、$x_{12}^* \approx -0.62$ 和 $\xi_1^*(x_{11}^*) \approx 0.4297$，而 $-0.4297 \approx \frac{3}{7}$。我们采用了取整后的设计 $\xi^{\approx}$，其支撑点与 x_{11}^* 和 x_{12}^* 相同，但边际设计为 $\xi_1^{\approx}(x_{11}^*) = \frac{3}{7}$ 和 $\xi_1^{\approx}(x_{12}^*) = \frac{4}{7}$。因此，可以用二维单形的顶点（3 个点 —— 一个等边三角形）替换一个轨道，并用二维立方体或交叉多胞体的顶点（4 个点——一个正方形）替换另一个轨道。由于经过了取整，设计 $\xi^{\approx}$ 并非最优设计，但它是精确设计，且具有较高的 D 效率；该效率通过比较取整后的设计 $\xi^{\approx}$ 与最优设计 $\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0}$ 在 $\boldsymbol{\beta}^0$ 方面的表现来衡量——此处为 $p = k + 1 = 4$ 和 $\boldsymbol{\beta}^0 = (0.1, 1, 0, 0)^\top$：

$$\mathrm{Eff}_D(\xi^{\approx}, \boldsymbol{\beta}^0) = \left(\frac{\det(\boldsymbol{M}(\xi^{\approx}, \boldsymbol{\beta}^0))}{\det(\boldsymbol{M}(\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0}, \boldsymbol{\beta}^0))} \right)^{\frac{1}{p}} \approx 0.999757 \, .$$

这些设计并不十分令人满意。一方面，支撑点的数量并非最少；另一方面，只有在某些特殊情形下才有合适的有理权重，使其能够离散化，否则四舍五入会导致最优性丧失。因此，本文希望针对*(c0)* 这一情形，建立最小支撑精确设计。这些设计大多并非最优，但效率（非常）高。
不过，我们首先要将定理 2 中的三方程组简化为一个方程，该方程适用于特殊的单峰强度函数——对称单峰强度函数；例如，在采用 logit 和 probit链接的二元响应模型中就能找到这类函数。

4. 对称单峰强度函数的最优设计

Radloff 和 Schwabe（2019a）在讨论部分提出了一个有趣的观察。对于强度函数为单峰、众数与阈值重合（$c^{(\mathrm{A2}')}_{\lambda} = c^{(\mathrm{A3}')}_{\lambda} = c_\lambda$），且具有对称性的模型，两个轨道位置也以某种方式呈对称分布；本文将对此进行探究。对于一维情形，Ford等人（1992，第6.5节和第6.6节）已对此进行研究并给出证明，但该证明无法直接推广到更高维度。

定义1。 众数与阈值重合（$c^{(\mathrm{A2}')}_{\lambda} = c^{(\mathrm{A3}')}_{\lambda} = c_\lambda$）的单峰强度函数称为关于 c_λ 对称的，如果

$$\lambda(c_\lambda + z) = \lambda(c_\lambda - z)$$

对所有 $z \in \mathbb{R}$ 均成立。

logit 和 probit模型的强度函数关于 $c_\lambda = 0$ 对称。但互补对数-对数模型的单峰强度函数具有 $c^{(\mathrm{A2}')}_{\lambda} \neq c^{(\mathrm{A3}')}_{\lambda}$，因此无法对称。

引理1. 设强度函数 λ 在定理*2(c0)*的情形下关于 c_λ 对称。

- 对于给定的 $\beta_0 \neq c_\lambda$，令 r 满足

$$\frac{\lambda'(c_\lambda+r)}{\lambda(c_\lambda+r)} = -\frac{\begin{array}{c}-2\,k\,r^2\,(\beta_1^2+c^2-r^2)+(\beta_1^2-c^2-r^2)^2-4\,c^2\,r^2\\ +(\beta_1^2-c^2+r^2)\,\sqrt{(\beta_1^2-c^2-r^2)^2+4\,(k^2-1)\,c^2\,r^2}\end{array}}{(k+1)\,r\,(r+c-\beta_1)(r+c+\beta_1)(r-c+\beta_1)(r-c-\beta_1)} \tag{4.8}$$

其中 $c := c_\lambda - \beta_0$。那么

$$x = \frac{c}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}\,, \tag{4.9}$$

$$y = \frac{c}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}\,, \tag{4.10}$$

$$\alpha = \frac{-(\beta_1^2-c^2-r^2)+\sqrt{(\beta_1^2-c^2-r^2)^2+4\,(k^2-1)\,c^2\,r^2}}{4\,(k+1)\,c\,r} \tag{4.11}$$

是方程组 (3.4)–(3.6) 的解。

- 对于给定的 $\beta_0 = c_\lambda$，有 $x = \frac{r}{\beta_1}$、 $y = -\frac{r}{\beta_1}$ 和 $\alpha = 0$。这里 r 是.....的解

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} = -\frac{2\,(\beta_1^2 - k\,r^2)}{(k+1)\,r\,(\beta_1^2 - r^2)}\,. \tag{4.12}$$

注2。 对于 $k = 1$，参见注 1，令 λ 与 c_λ 对称。那么 $x = \frac{c_\lambda-\beta_0}{\beta_1} + \frac{r}{\beta_1}$ 和 $y = \frac{c_\lambda-\beta_0}{\beta_1} - \frac{r}{\beta_1}$ 中满足 r 的是.....的解

$$\frac{\lambda'(c_\lambda + r)}{\lambda(c_\lambda + r)} = -\frac{1}{r} \tag{4.13}$$

求解方程组 (3.7)。

引理1（其证明概要见附录 B）以及注2与定理 2相结合，为具有对称单峰强度函数的模型给出了（局部） *D*-最优设计。因此，我们将方程组 (3.4)–(3.6) 简化为仅包含一个方程，即方程 (4.8)。

但现在的问题是，条件（A4）是否能够像定理 1或定理 2（*a*）和（*b*）那样保证唯一解，因为定理 2（*c*），尤其是（*c0*），并未说明唯一性。不过，我们想补充一条关于此前 r 取值的注释。

注3。 由于定理 2（*c0*）中的方程组 (3.4)–(3.6) 应当存在一个关于边际设计且具有两个内部支撑点的解，因此需要 $x,\ y \in (-1,\ 1)$。所以

$$-1 < \frac{c_\lambda - \beta_0}{\beta_1} \pm \frac{r}{\beta_1} < 1$$

必须成立。这由 $\beta_1 > 0$ 推出 $r \in (-(c_\lambda - \beta_0) - \beta_1,\ -(c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)$ 和 $r \in ((c_\lambda - \beta_0) - \beta_1,\ (c_\lambda - \beta_0) + \beta_1)$。因此，这两个区间必须重叠。当 $0 < c_\lambda - \beta_0 < \beta_1$ 处于 $c_\lambda - \beta_0 > 0$ 时，以及 $-\beta_1 < c_\lambda - \beta_0 < 0$ 处于 $c_\lambda - \beta_0 < 0$ 时，都会出现这种情况。因此 $c_\lambda - \beta_0 \in (-\beta_1,\ \beta_1)$，尤其是必须满足 $\beta_1^2 > (c_\lambda - \beta_0)^2$。于是， r 位于区间 $(|c_\lambda - \beta_0| - \beta_1,\ -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$ 内。但定理 2 *(c)* 要求 $x > y$，从而$r > 0$。因此， $r \in (0,\ -|c_\lambda - \beta_0| + \beta_1)$。这尤其适用于 $\beta_0 = c_\lambda$，即 $c_\lambda - \beta_0 = 0$。因此 $r \in (-\beta_1,\ \beta_1)$。当$r > 0$ 时，它是 $r \in (0,\ \beta_1)$。

引理 2.在引理*1*的情形下，若强度函数 λ 还满足条件$(\mathrm{A4})$，则方程 (4.8) 在 $-|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1$ 上右端连续延拓，并且在 $r\in(0,\ |c_\lambda-\beta_0|+\beta_1)$ 中有唯一解。

这对 $\beta_0=c_\lambda$ 和方程 (4.12) 也成立，该方程在 $r\in(0,\beta_1)$ 中恰有一个解。

备注4。关于 $k=1$，请参见注2；对于满足 (A4) 的强度函数，(4.13) 只有一个解。

引理 2 的证明概要见附录 B。引理 2 保证在 $r\in(0,|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1)$ 中存在唯一解。但注3指出，对于定理 2 *(c0)*，我们需要 $r\in(0,-|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1)$。这意味着该唯一解可能对应于定理 2 *(c)* 的双轨道情形或单轨道单极点情形。

5. 最小支持设计

在定理 1 和定理 2*(a)*、*(b)*、*(c1)* 和*(c2)* 的情形下，这些设计始终具有估计参数向量 $\boldsymbol{\beta}$ 所需的最少支撑点数，即 $k+1$ 个支撑点。

在此处引言部分重新讨论的 Radloff 和 Schwabe（2019a）中，我们举例说明了一个在三维球上用于 logit模型、具有 $-\beta_0=0$ 和 $\beta_1=1$ 的（局部） D-最优设计。该设计由六个支撑点构成，这些点是两个正则二维单形——等边三角形——的顶点；见图 2（左图）。但这并非估计四个参数所需的最少支撑点数。因此，问题在于，能否像部分因子设计的概念那样减少支撑点的数量；例如，参见 Pukelsheim（1993，第 15.11 节）。与全因子设计使用超立方体 $[-1,1]^k$ 的所有顶点不同，部分因子设计只选取其中一定比例的特定点。对于 $k=3$

$$(-1,-1,1)^\top,(-1,1,-1)^\top,(1,-1,-1)^\top,(1,1,1)^\top$$

表示一个 2^{3-1} 部分因子设计。
在我们的问题中，我们不想从六个点中选取四个，而是想利用给定的 2^{3-1}部分因子设计中两个轨道（$x_1=-1$ 和 $x_1=1$）内由这些点（不含 x_1 分量）张成的空间的正交性。这里 span$\{(-1,\ 1)^\top,\ (1,\ -1)^\top\}\perp$span$\{(-1,\ -1)^\top,\ (1,\ 1)^\top\}$。我们的问题思路如图 2（右图）所示。两个轨道中由这些点（不含 x_1 分量）张成的空间彼此正交。所有点张成一个单形。
如上所述，具有固定 x_1 的（广义）设计 ξ 是旋转不变的——即在 $O(k)$中，关于所有不改变 x_1分量的正交变换保持不变——且其全部质量都集中在单位球面上。它可以分解为定义在 $[-1,1]$ 上的边际设计 ξ_1 和概率核η （条件设计）–，即$\xi=\xi_1\otimes\eta$。对于固定的 x_1 ,⁻核 $\eta(x_1,\ \cdot)$是在半径为 $\sqrt{1-x_1^2}$的（$k-1$）维球面上的均匀分布——即位置 x_1处的轨道。如果 $x_1\in\{-1,1\}$，则具有均匀分布的（$k-1$）维球退化为一个点，仅表示单点测度。回顾 $q(x_1)=\lambda(\beta_0+\beta_1x_1)$，相关的

信息矩阵，参见 Radloff 和 Schwabe（2019年b），为

$$\boldsymbol{M}(\xi_1 \otimes \overline{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0) = \left(\begin{array}{cc|c} \int q \,\mathrm{d}\xi_1 & \int q \,\mathrm{id}\, \mathrm{d}\xi_1 & \mathbb{O}_{2\times(k-1)} \\ \int q \,\mathrm{id}\, \mathrm{d}\xi_1 & \int q \,\mathrm{id}^2 \,\mathrm{d}\xi_1 & \\ \hline \mathbb{O}_{(k-1)\times 2} & & \frac{1}{k-1}\int q\,(1-\mathrm{id}^2)\,\mathrm{d}\xi_1\ \mathbb{I}_{k-1} \end{array}\right) \tag{5.14}$$

其中 $\boldsymbol{\beta}^0 = (\beta_0, \beta_1, 0, \ldots, 0)^\top$。
对于基于恰好两个轨道的 k 维单位球面 $\mathbb{S}_{k-1}$ 上的设计，其信息矩阵可以通过类似的方法确定。此外，均匀分布并未覆盖整个轨道，而只覆盖子球面。

引理 3。 设 ξ_1 为 x_{11} 和 x_{12} 上的两点测度，其中 $\xi_1(x_{11}) = \frac{1}{2} - \alpha$ 且 $\xi_1(x_{12}) = \frac{1}{2} + \alpha$，其中 $\alpha \in \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$。再设 $\eta(x_{11}, \cdot)$ 为 $\mathbb{S}_{m-2}\left(\sqrt{1-x_{11}^2}\right) \times \{0\}^{k-m}$ 上的均匀分布，同样地，设 $\eta(x_{12}, \cdot)$ 为 $\{0\}^{m-1} \times \mathbb{S}_{k-m-1}\left(\sqrt{1-x_{12}^2}\right)$ 上的均匀分布。那么信息矩阵为

$$\boldsymbol{M}(\xi_1 \otimes \overline{\eta}, \boldsymbol{\beta}^0) = \left(\begin{array}{cc|cc} \int q \,\mathrm{d}\xi_1 & \int q \,\mathrm{id}\, \mathrm{d}\xi_1 & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{$\mathbb{O}_{2\times(k-1)}$}} \\ \int q \,\mathrm{id}\, \mathrm{d}\xi_1 & \int q \,\mathrm{id}^2 \,\mathrm{d}\xi_1 & & \\ \hline \multirow{2}{*}{$\mathbb{O}_{(k-1)\times 2}$} & & c_1\,\mathbb{I}_{m-1} & \mathbb{O}_{(m-1)\times(k-m)} \\ & & \mathbb{O}_{(k-m)\times(m-1)} & c_2\,\mathbb{I}_{k-m} \end{array}\right) \tag{5.15}$$

与 $c_1 = \frac{1}{m-1} q(x_{11})\,(1-x_{11}^2)\,(\frac{1}{2}-\alpha)$ 和 $c_2 = \frac{1}{k-m} q(x_{12})\,(1-x_{12}^2)\,(\frac{1}{2}+\alpha)$。

现在，应使用定理 2 *(c0)* 中关于两个轨道的最优性情形，来考察信息矩阵 (5.14) 和 (5.15) 何时相同。这样，相关的两个（广义）设计都将是（局部） D-最优的。

引理 4。 当且仅当 $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{m}{k+1}$ 时，定理 *2 (c0)* 所述情形中的两个信息矩阵 (5.14) 和 (5.15) 相同。

证明见附录 B。
因此，要使两个信息矩阵一致，两个轨道都需要具有权重 $\xi_1(x_{11}) = \frac{m}{k+1}$ 和 $\xi_1(x_{12}) = \frac{k-m+1}{k+1}$。这样就可以构造一个由两个轨道组成的试验设计，其 D 最优性准则的取值相同，其中一个轨道具有 m，另一个轨道具有 $k-m+1$ 个支撑点

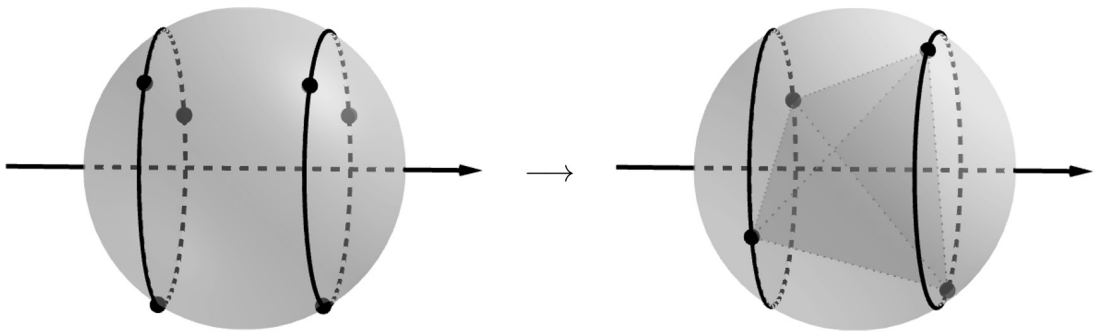


图 2： $k = 3$、 $\beta_1 = 1$ 和 $-\beta_0 = 0$的 logit模型：离散化的（局部） D-最优设计，具有 6 个或 4 个支撑点。

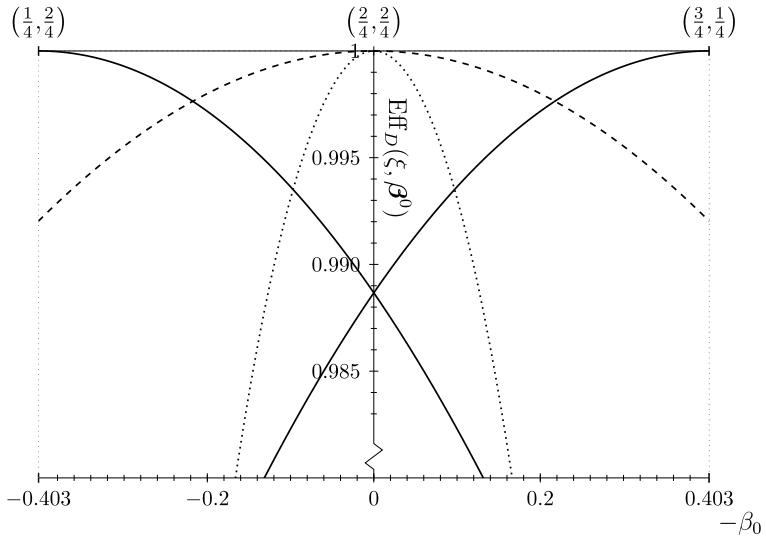


图 3：logit模型中 D-效率的比较，其中 $k=3$ 和 $\beta_1=1$：在 $-\beta_0 \in$（-0.403, 0.403）中，恰有 $k+1=4$ 个等权支撑点的设计（四舍五入）。

。这可以通过两个正则单纯形实现——一个位于维度 $m-1$ 中，另一个位于维度 $k-m$ 中。因此，这些单纯形分别是 $\mathbb{S}_{m-2}\big(\sqrt{1-x_{11}^2}\big)\times\{0\}^{k-m}$ 和 $\{0\}^{m-1}\times\mathbb{S}_{k-m-1}\big(\sqrt{1-x_{12}^2}\big)$ 上均匀分布的离散化。

设 $\boldsymbol{S}_m \in \mathbb{R}^{m\times(m+1)}$ 为一个矩阵，其列表示 $\mathbb{R}^m$中的一个m维正则单纯形的 $m+1$ 个顶点。那么矩阵的列

$$\left(\begin{array}{c|c} x_{11}\mathbb{1}_m^\top & x_{12}\mathbb{1}_{k-m+1}^\top \\ \hline \boldsymbol{R}_1\,\boldsymbol{S}_{m-1} & \mathbb{O}_{(m-1)\times(k-m+1)} \\ \hline \mathbb{O}_{(k-m)\times m} & \boldsymbol{R}_2\,\boldsymbol{S}_{k-m} \end{array}\right)$$

经过任意正交变换 $\boldsymbol{R}_1 \in O(m-1)$ 和 $\boldsymbol{R}_2 \in O(k-m)$ 后，表示这种最小支撑设计的支撑点。

$$\left(\sqrt{\frac{m+1}{m}}\,\mathbb{I}_m + \frac{1-\sqrt{m+1}}{m\sqrt{m}}\,\mathbb{1}_m\mathbb{1}_m^\top \,\middle|\, -\frac{1}{\sqrt{m}}\,\mathbb{1}_m\right) \in \mathbb{R}^{m\times(m+1)}$$

是 $\boldsymbol{S}_m$的一个示例。在此符号说明中，$\mathbb{I}_m$ 表示标准单形，它需要经过适当缩放和平移，使其与最后一个顶点 $-\frac{1}{\sqrt{m}}\,\mathbb{1}_m$ （最后一列）结合后，构成单位球面 $\mathbb{S}_{m-1}$上的正则单纯形。

最后，我们想考察 D-效率，这里取 $\boldsymbol{\beta}^0=(\beta_0,\ \beta_1,\ 0,\ \ldots\ldots,\ 0)^\top$，

$$\mathrm{Eff}_D(\xi,\boldsymbol{\beta}^0) = \left(\frac{\det(\boldsymbol{M}(\xi,\boldsymbol{\beta}^0))}{\det(\boldsymbol{M}(\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0},\boldsymbol{\beta}^0))}\right)^{\frac{1}{p}} \in [0,1]$$

对于在出现两个非退化轨道的区域内恰有 $p=k+1$ 个等权支撑点的设计。

例如，采用含有 $\beta_1=1$ 的logit模型，来确定维度 $k=3$ 和 $k=6$ 下的 D 效率。在图 3 和图4 中，仅绘出了 $-\beta_0$ 对应的区域，其中

最优设计中含有两个非退化轨道的情形（定理 2 中的情形*(c0)*），即 $-\beta_0 \in (-0.403, 0.403)$（四舍五入）对应 $k = 3$，以及 $-\beta_0 \in (-0.480, 0.480)$（四舍五入）对应 $k = 6$，均已绘出。

为此，我们将三种不同类型的精确设计与（局部）*D*-最优设计 $\xi^*_{\boldsymbol{\beta}^0}$ 进行比较。最优设计是一个具有实数权重的广义设计。因此，一般而言，它无法离散化为精确设计。

首先，将两个具有一个极点和一个轨道的最优精确设计用于比较，它们被离散化为一个规则的（$k-1$）维单形。轨道位置保持不变，并由边界值 $-\beta_0 \approx \pm 0.403$ 或 $-\beta_0 \approx \pm 0.480$ 确定。见两幅图中的实线。
其次，下一种备选方案是轨道位置与对应的、对 $-\beta_0$ （局部）最优的设计相同的设计。只有权重被舍入/调整为 $\frac{1}{k+1}$ 的整数倍。见虚线。

第三，设计权重固定为 $\frac{1}{k+1}$ 的整数倍的设计构成最后一类模型。因此，对于这些固定的设计权重，只需优化轨道的位置。通过仅使用定理 2*(c)* 中选定的权重求解方程 (3.4) 和 (3.5)，即可完成此项优化。方程 (3.6) 不予考虑。见两幅图中的虚线。

图 3 显示，对于维度 $k = 3$，在范围 $-\beta_0 \in [-0.403, 0.403]$（四舍五入）内，只有三个位置存在具有最少支撑点数——四个点——的（局部） *D*-最优设计。对于 $-\beta_0 \approx -0.403$，该设计由极点 $x^*_{12} = -1$ 和位于 x^*_{11} 处的一个轨道组成，轨道上的三个点构成等边三角形的顶点。然后，对于 $-\beta_0 = 0$，有两个轨道，每个轨道包含两个点。而在 $-\beta_0 \approx 0.403$ 处，该设计由位于 x^*_{12} 处的一个轨道组成，该轨道包含三个等权支撑点，以及极点 $x^*_{11} = 1$。在这些最优位置之间的区间内，所考虑的离散化具有相当高的效率。若直接采用从极点和轨道过渡到轨道和极点的方式，效率始终大于 0.988（实线的交点）。如果还对两个轨道之间的区域进行离散化，则效率大于 0.993（虚线与实线的交点），甚至大于 0.997（虚线与实线的交点）。

对于维度 $k = 6$，见图4，从包含极点和一个有六个支撑点的轨道，直接过渡到包含一个有六个设计点的轨道和极点的设计，效率可超过 0.986。若采用中间步骤——使用分别含有 2 和 5 个点、3 和 4 个点、4 和 3 个点以及 5 和 2 个点的两个轨道——那么只需将权重简单舍入为 $\frac{1}{k+1}$ 的整数倍，效率即可超过 0.995（点线）；若再对轨道位置进行优化，效率甚至可超过 0.999（虚线）。

6. 结论

总而言之，可以推测，仅基于$k + 1$ 个设计点（这是估计参数向量所需的最少支撑点数）就能生成效率很高的设计。更高的维度似乎可以实现 *D*-效率更高的设计，尤其是采用第三种离散化方案时。本文仅考虑了恰好包含两个轨道的设计。因此，不能排除存在效率更高的设计，甚至存在恰好由 $k + 1$ 个点支撑的（局部）最优设计。这些设计的支撑点或许并不位于轨道上，而是略有偏移。对此，以及是否存在更低的效率界，仍需进一步研究。

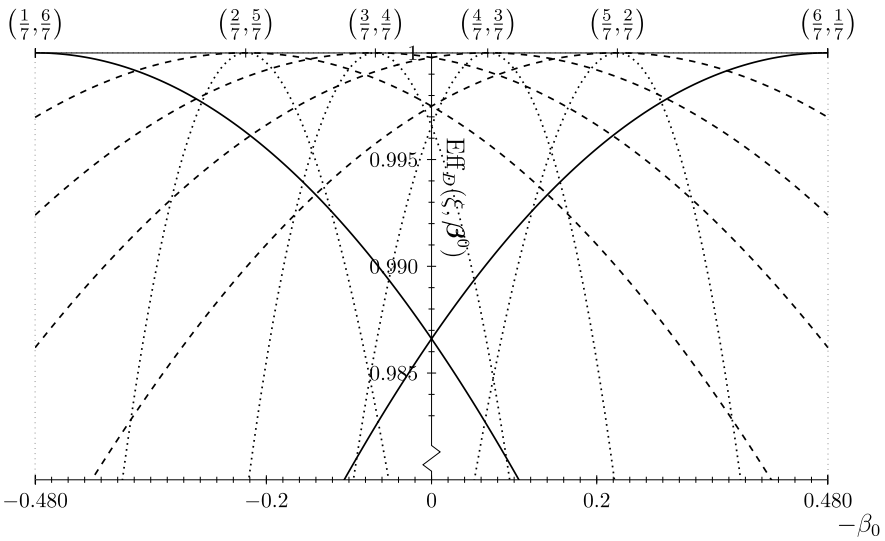


图4：在 $k=6$ 和 $\beta_1=1$条件下，logit模型的 D效率：在 $-\beta_0\in$中恰有 $k+1=7$个等权支撑点的设计比较（-0.480，0.480，四舍五入）。

另一方面，将用于确定对称单峰强度函数的（局部） D-最优设计的方程组化简为单个方程，是一项很有用的特性，也有助于降低计算成本。

未来还应考虑球上关于其他最优性准则的最优设计问题。

最后，我们想强调的是，所建立的设计并不仅适用于单位球。通过利用线性变换（例如缩放、反射和旋转）的等变性，可以将设计空间的类别扩展到具有任意半径的 k维球或任意 k维椭球。

附录A 符号说明

$\mathbb{B}_k$ k维单位球$\mathbb{B}_k(r)$ k维、半径为 r的球$\mathbb{S}_{k-1}$ 单位球面，即 $\mathbb{B}_k$的表面$\mathbb{S}_{k-1}(r)$ 半径为 r的球面，即 $\mathbb{B}_k$的表面$r($
$\mathbb{O}_k$ k)维零向量$\mathbb{O}_{k_1\times k_2}$ ($k_1\times k_2$)维零矩阵$\mathbb{1}_k$ k维全1向量$\mathbb{I}_k$ ($k\times k$)维单位矩阵 恒等函数

附录 B 证明

引理***1***的证明概要。 将 (4.9) 和 (4.10) 代入 (3.6)，并利用对称性进行简化，可得

$$\frac{-2\,\alpha\,(4\,c\,r\,\alpha+(\beta_1^2-c^2-r^2))+4\,(k-1)\,c\,r\,\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\,\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)}{\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\,\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\,(4\,c\,r\,\alpha+(\beta_1^2-c^2-r^2))}=0\ .$$

分子中有一个关于 α 的二次多项式，其两个根 $\alpha_{\mp}(r)$ 取决于 r:

$$\alpha_{\mp}(r):=\frac{-\left(\beta_1^2-c^2-r^2\right)\mp\sqrt{\left(\beta_1^2-c^2-r^2\right)^2+4\,(k+1)\,(k-1)\,c^2\,r^2}}{4\,(k+1)\,c\,r}\ .$$

现在我们考察 $\alpha_{\mp}(r)$ 随 r 变化的取值。只有 $-|c|-\beta_1$、$|c|-\beta_1$、$-|c|+\beta_1$ 或 $|c|+\beta_1$ 能满足表达式 $\alpha_{\mp}(r)=\pm\frac{1}{2}$。但是，$-|c|-\beta_1$ 和 $\dagger c|+\beta_1$ 不在 r 的相关区域内。我们有

$$\alpha_-\left(\pm(|c|-\beta_1)\right)=\pm\frac{1}{2}\,\operatorname{sign}(c)\quad\text{and}\quad\alpha_+\left(\pm(|c|-\beta_1)\right)=\mp\frac{1}{2}\,\operatorname{sign}(c)\,\frac{k-1}{k+1}\ .$$

由于 $\lim_{r\nearrow 0}\alpha_-(r)=\operatorname{sign}(c)\infty$ 且 $\lim_{r\searrow 0}\alpha_-(r)=-\operatorname{sign}(c)\infty$，根 $\alpha_-(r)$ 在区间 $r\in[|c|-\beta_1,-|c|+\beta_1]$ 内的取值仅在 $(-\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ 之外。因此，$\bar{\alpha}_-(r)$ 不是相关根。

由于 $\lim_{r\to 0}\alpha_+(r)=0$，$\alpha_+$ 中根 $r(\,r=0\,)$ 的间断点可以消除。因此，$r(-\frac{1}{2})$ 在区间 $r\in[|c|-\beta_1,-|c|+\beta_1]$ 上仅取 $(=\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ 中的值，而 $\alpha_+(r)$（即 (4.11)）是唯一的相关根。

将 (4.9) 和 (4.10) 代入 (3.4)，并将 (4.9) 和 (4.10) 代入 (3.5)，再将所得两个方程相减，并利用对称性进行化简，得到

$$\frac{(k+1)\,\lambda'(c_\lambda+r)}{\lambda(c_\lambda+r)}=-(k-1)\,\frac{-2\,r+\alpha\cdot 4\,c}{(\beta_1^2-c^2-r^2)+\alpha\cdot 4\,c\,r}-\frac{2}{r}\ .$$

将 $\alpha_+(r)$ 作为 α 代入方程 (4.8)，并经过一些化简，即可得到方程 (4.8)。
对于 $\beta_0=c_\lambda$，即 $c=c_\lambda-\beta_0=0$，将 $x=\frac{r}{\beta_1}$ 和 $y=-\frac{r}{\beta_1}$ 代入 (3.6)，并利用对称性，可直接得到 $\alpha=0$。将其代入 (3.4) 和 (3.5)，这两个方程之差即为 (4.12)。

□

引理 ***2*** 的证明思路。 这个证明涉及大量曲线描绘。我们从 $\beta_0\neq c_\lambda$ 开始。(4.8) 右端的分母在 r 中有五个根。$-|c_\lambda-\beta_0|-\beta_1<0$和 $|c_\lambda-\beta_0|-\beta_1<0$ 不在所考虑的区间 $(0,|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1)$ 内。在 $r=-|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1$ 处有一个可以消除的间断点。在 $r=0$ 和 $r=|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1$ 处有两个极点。分析这些极点在所考虑区间内的情况可知，函数值从 $-\infty$ ($r\searrow 0$) 开始，上升至 $+\infty$ ($r\nearrow|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1$)。通过精细的曲线描绘可以看出，(4.8) 的右端在 $(0,|c_\lambda-\beta_0|+\beta_1)$ 上严格单调递增。因此，它严格单调递增，并且取遍 $(-\infty,\infty)$。结合 (A4) 可知，(4.8) 的左端单调递减，因此恰有一个解。

对于 $\beta_0=c_\lambda$，我们可以指出，(4.12) 的右端在 $(0,\beta_1)$ 上也严格单调递增。因此，解只有一个。

备注4中的情形也有类似的结果。 □

引理 ***4*** 的证明。 将方程 (3.6) 等价地重新排列，可得两种形式： s

$$q(x_{12})\,(1-x_{12}^2)\,(\tfrac{1}{2}+\alpha) = q(x_{11})\,(1-x_{11}^2)\,(\tfrac{1}{2}-\alpha)\,\frac{k\,(\frac{1}{2}+\alpha)-(\frac{1}{2}-\alpha)}{k\,(\frac{1}{2}-\alpha)-(\frac{1}{2}+\alpha)} \quad \text{and}$$

$$q(x_{11})\,(1-x_{11}^2)\,(\tfrac{1}{2}-\alpha) = q(x_{12})\,(1-x_{12}^2)\,(\tfrac{1}{2}+\alpha)\,\frac{k\,(\frac{1}{2}-\alpha)-(\frac{1}{2}+\alpha)}{k\,(\frac{1}{2}+\alpha)-(\frac{1}{2}-\alpha)}\,.$$

当且仅当 $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{1}{k+1}$ 和 $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{k}{k+1}$ 时，这两个分母分别为零。但对于非退化轨道，这种情况不可能发生，因为 $\frac{1}{2} - \frac{k}{k+1} < \alpha < \frac{1}{2} - \frac{1}{k+1}$。将这两个方程代入信息矩阵 (5.14) 的对角元素，得到

$$\frac{1}{k-1}\int q\,(1-\mathrm{id}^2)\,\mathrm{d}\xi_1$$
$$= q(x_{11})\,(1-x_{11}^2)\,(\tfrac{1}{2}-\alpha)\left[\frac{1}{k-1} + \frac{1}{k-1}\cdot\frac{k\,(\frac{1}{2}+\alpha)-(\frac{1}{2}-\alpha)}{k\,(\frac{1}{2}-\alpha)-(\frac{1}{2}+\alpha)}\right]$$

and

$$\frac{1}{k-1}\int q\,(1-\mathrm{id}^2)\,\mathrm{d}\xi_1$$
$$= q(x_{12})\,(1-x_{12}^2)\,(\tfrac{1}{2}-\alpha)\left[\frac{1}{k-1}\cdot\frac{k\,(\frac{1}{2}-\alpha)-(\frac{1}{2}+\alpha)}{k\,(\frac{1}{2}+\alpha)-(\frac{1}{2}-\alpha)} + \frac{1}{k-1}\right]$$

当且仅当满足以下条件时，它们与引理3中信息矩阵 (5.15) 的对角元素完全相同

$$\frac{1}{k-1} + \frac{1}{k-1}\cdot\frac{k\,(\frac{1}{2}+\alpha)-(\frac{1}{2}-\alpha)}{k\,(\frac{1}{2}-\alpha)-(\frac{1}{2}+\alpha)} = \frac{1}{m-1} \text{ and } \frac{1}{k-1}\cdot\frac{k\,(\frac{1}{2}-\alpha)-(\frac{1}{2}+\alpha)}{k\,(\frac{1}{2}+\alpha)-(\frac{1}{2}-\alpha)} + \frac{1}{k-1} = \frac{1}{k-m}$$

而这两者都等价于 $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{m}{k+1}$。 - —— □

参考文献

Biedermann S、Dette H、Zhu W（2006）受限设计空间下剂量-反应模型的最优设计。《美国统计学会杂志》101：747–759

Dette H、Melas VB、Pepelyshev A 等（2005）利用球谐描述符进行三维形状分析的最优设计。《统计年鉴》33：2758–2788

Dette H、Melas VB、Pepelyshev A（2007）利用泽尼克多项式进行统计分析的最优设计。Statistics 41：453–470

Farrell RH、Kiefer J、Walbran A（1967）最优多变量设计。载于：《第五届伯克利数理统计与概率研讨会论文集》，第1卷：Statistics。加利福尼亚大学出版社，伯克利（加利福尼亚州），第113–138页

Ford I, Torsney B, Wu C (1992) 在构造非线性问题的局部最优设计时使用规范形式。英国皇家统计学会会刊：B辑（统计方法学）54:569–583

Hirao M, Sawa M, Jimbo M (2015年) 球上的 ϕ_p-最优可旋转设计。Sankhya A：《印度统计学杂志》77:211–236

Kiefer JC（1961年）最优试验设计 V：系统设计和可旋转设计的应用。载于：《第四届伯克利数学统计与概率学研讨会论文集》，加利福尼亚大学出版社，第381–405页

Konstantinou M、Biedermann S、Kimber A（2014年）用于双参数非线性模型的最优设计及其在生存模型中的应用。《中华统计学志》24：415–428

Lau TS（1988年）单位 q球上的 d-最优设计。《统计规划与推断杂志》19：299–315

Pukelsheim F（1993年）《试验的最优设计》。Wiley概率与统计丛书

Radloff M, Schwabe R（2016年）非线性模型试验设计中的不变性与等变性。载于：Kunert J, Müller CH, Atkinson AC（编）《mODa 11-面向模型的设计与分析进展》。Springer，第217–224页

Radloff M, Schwabe R（2019a）k维球上适用范围更广的一类非线性模型的局部 d-最优设计及其在 logit 和 probit模型中的应用。《统计论文》60：165–177

Radloff M, Schwabe R（2019年b）k维球上非线性模型的局部 d-最优设计。《统计规划与推断杂志》203：106–116 Schmidt D, Schwabe R（2017年）线性预测子驱动信息的多重回归最优设计。《中华统计学志》27：1371–1384