UNIVERSITÄT DORTMUND
FACHBEREICH STATISTIK

Der mittlere quadratische Fehler verschiedener Kalibrationsschätzer

Diplomarbeit von: Ralf Hüls
Matrikel-Nr. 22988

Dortmund, im Dezember 1996

Betreut von Prof. Dr. G. Trenkler

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einführung

Ziel dieser Arbeit ist es, verschiedene Schätzverfahren für das Problem der linearen Kalibration anhand des mittleren quadratischen Fehlers miteinander zu vergleichen.

In diesem ersten Kapitel wird zunächst das Kalibrationsproblem vorgestellt und eine Übersicht über die vorhandene Literatur gegeben. In Kapitel 2 werden die verschiedenen Kalibrationsschätzer beschrieben. In Kapitel 3 werden Ergebnisse früherer Studien zum gleichen Thema vorgestellt. Kapitel 4 enthält die Beschreibung und die Ergebnisse der eigenen Simulationsstudie.

1.1 Das Kalibrationsproblem

Die Aufgabe der Kalibration ist die Einstellung eines Meßgerätes. Um eine Meßskala zu kalibrieren, erzeugt man einen oder mehrere kontrollierte Zustände der zu messenden Größe. Diese Voreinstellung kann etwa mit Hilfe eines aufwendigen aber präzisen Meßverfahrens vorgenommen werden. Unter den kontrollierten Bedingungen werden nun die von der einzustellenden Skala gemessenen Werte abgelesen. Mit Hilfe dieser Daten wird der Zusammenhang zwischen den tatsächlichen Werten der interessierenden Größe und den abgelesenen Werten bestimmt, und später reicht das Ablesen der Skala zur Feststellung des tatsächlichen Wertes aus.

Voraussetzung der linearen Kalibration ist das Bestehen eines linearen Zusammenhangs zwischen der tatsächlichen Größe und den abgelesenen Skalenwerten. Es wird weiterhin vorausgesetzt, daß die interessierende Größe zwar fehlerfrei eingestellt werden kann, das Ablesen der Skala aber fehlerbehaftet ist. Wenn also X die tatsächlichen Werte bezeichnet, Y die abgelesenen Skalenwerte, α und β die Parameter des linearen Zusammenhangs zwischen X und Y sowie ε den Ablesefehler, so ergibt sich die Beziehung

$$Y = \alpha + \beta X + \varepsilon. \tag{1.1}$$

Zur Einstellung des Meßgerätes werden nun zunächst n Wertepaare (x_i, y_i) mit $i = 1, \ldots, n$ beobachtet, für die analog die Beziehung

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i, \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{1.2}$$

gilt. Die Ablesefehler ε_i seien als unabhängig mit Erwartungswert null und Varianz σ^2 normalverteilt vorausgesetzt. Das Intervall $[x_{(1)}, x_{(n)}]$, wobei $x_{(1)}$ das Minimum der x_i bezeichne und $x_{(n)}$ deren Maximum, heißt der Kalibrationsbereich.

Es soll nun ein Schätzer konstruiert werden, der auf den Daten aus diesem „Kalibrationsexperiment" beruht und der aus späteren Messungen $y_{01}, \ldots, y_{0m}$, die mit einem unbekannten Wert x_0 korrespondieren, diesen tatsächlich vorliegenden Wert möglichst gut schätzt.

Die Frage nach einem möglichst guten Schätzer für dieses Problem und im Zusammenhang damit auch die Frage nach geeigneten Bewertungskriterien für die verschiedenen Vorschläge hat in der Fachliteratur zu einer kontroversen Diskussion geführt. Der folgende Abschnitt unternimmt den Versuch, einen kurzen chronologischen Abriß der wichtigsten Artikel dieser Kontroverse zu geben.

1.2 Die Kontroverse um die Kalibrationsschätzer

Die älteste Arbeit, die in diesem Zusammenhang von Interesse ist, wurde von C. Eisenhardt im Jahre 1939 veröffentlicht [8]. Eisenhardt vergleicht den klassischen Schätzer (s. Abschnitt 2.1), der den unbekannten Wert mit Hilfe der KQ-Schätzer aus der Regression von Y auf X berechnet, mit der inversen Methode, bei der der gesuchte Wert aus einer Regression von X auf Y geschätzt wird (s. Abschnitt 2.2).

Eisenhardt lehnt die zweite Methode kategorisch ab, da hier die Abweichungsquadrate gerade in der Koordinatenrichtung minimiert werden, die bei den Modellvoraussetzungen als nicht fehlerbehaftet vorausgesetzt wird. Er schreibt:

> „It does not seem to be generally realized that the fitting should be done in terms of the deviations which actually represent "error." Thus when the research worker selects the X values in advance, and holds x to these values without error, and then observes the

corresponding y values, the errors are in the y values, so that even if he is interested in using observed values of Y to estimate X, he should nevertheless fit $\hat{Y} = a + bX$ and then use the inverse of this relation to estimate X, i.e. $X = (\hat{Y} - a)/b$. with the best available estimate of Y substituted for $\hat{Y}$. The situation is quite clear if one aproaches the problem from the point of view of fitting the formula to the data with proper attention to which of the variables is in error..."

Diese Sichtweise des Kalibrationsproblems setzte sich lange Zeit durch, bis R.G. Krutchkoff im Jahre 1967 die eigentliche Kontroverse auslöste [13]. Krutchkoff stellt einen Vergleich des klassischen und des inversen Schätzers anhand ihres jeweiligen mittleren quadratischen Fehlers ("mean squared error", MSE) an. Der mittlere quadratische Fehler eines Schätzers $\hat{x}$ ist definiert als $E(\hat{x} - x_0)^2$. An Hand einer Computersimulation (s. Abschnitt 3.1.1) kommt Krutchkoff zu dem Schluß, daß der inverse Schätzer dem klassischen bezüglich des MSE überlegen sei.

E.J. Williams [37] kritisiert in einer Arbeit aus dem Jahre 1969 Krutchkoffs Artikel, indem er darauf hinweist, daß der klassische Schätzer keinen definierten Erwartungswert und unendliche Varianz – damit auch unendlichen MSE – hat, der MSE des inversen Schätzers jedoch durchaus endlich ist. Die Überlegenheit des inversen Schätzers bezüglich des MSE sei also auch ohne Simulationsexperiment offensichtlich und obendrein nicht besonders bemerkenswert, da jeder Schätzer mit endlicher Varianz, sogar eine Konstante, diese Überlegenheit besäße. Williams betont weiterhin, daß kein unverzerrter Schätzer endliche Varianz habe und stellt die Eignung des MSE-Kriteriums für diesen Fall generell in Frage. Diesen Standpunkt vertritt Williams auch in einer allgemeineren Arbeit aus dem selben Jahr [38].

In einer zweiten Arbeit [15] präsentiert Krutchkoff weitere Simulationsergebnisse, die das Verhalten der Schätzer bei Extrapolation zeigen, also in Fällen, in denen der zu schätzende Wert außerhalb des Kalibrationsbereichs liegt. Krutchkoff stellt fest, daß bei Extrapolation und großem Stichprobenumfang im ersten Kalibrationsschritt der klassische Schätzer überlegen sei, hält aber an seiner Einschätzung fest, daß der inverse Schätzer im Kalibrationsbereich besser sei.

J. Berkson [4] greift den inversen Schätzer an, da dieser im Gegensatz zum klassischen Schätzer inkonsistent ist. Er stellt fest, daß die Überlegenheit des inversen Schätzers nur für einen bestimmten Bereich gilt. Außerdem stellt er durch Betrachtung des asymptotischen MSE fest, daß der inverse Schätzer für den Fall $m \to \infty$, also im Fall vieler wiederholter Messungen für Y_0, nur noch im Punkt $\bar{x}$ überlegen ist.

Ähnliche Ergebnisse erzielt auch S. Martinelle [20]. Er ermittelt, daß der Quotient $\mathrm{MSE}(\hat{X}_C)/\mathrm{MSE}(\hat{X}_I)$ symmetrisch mit Maximum bei $\bar{x}$ ist, mit $|x_0 - \bar{x}|$

fällt, und daß das Intervall, in dem der Quotient größer als 1 ist, mit $m \to \infty$ kleiner wird.

B. Hoadley [11] betrachtet das Kalibrationsproblem aus dem Blickwinkel der Bayes-Theorie und stellt unter anderem fest, daß sich der inverse Schätzer bei geeigneter A-priori-Verteilung als Bayes-Schätzer herleiten läßt. Damit unternimmt Hoadley den ersten Schritt, den Vorwurf, der inverse Schätzer sei theoretisch nicht fundiert, zu entkräften.

M. Halperin [10] definiert eine Verallgemeinerung des inversen Schätzers (s. Abschnitt 2.5) und verwendet, da der MSE problematisch ist, zum Vergleich der Schätzer das Kriterium der Pitman-Genauigkeit (s. Abschnitt 3.2.1). Er kritisiert, daß sich der inverse Schätzer nicht wie der klassische zur Konstruktion von Intervallschätzern eigne. Weiterhin kommt auch Halperin zu dem Schluß, daß der inverse Schätzer zwar in einem Intervall um $\bar{x}$ überlegen sei, dieses Intervall aber in der Praxis so klein sei, daß dem Schätzer nicht der Vorzug gegeben werden könne.

Krutchkoff gibt in einer Arbeit von 1971 auf diesen Artikel eine Antwort [17]. Er bemängelt, daß die von Halperin untersuchten Intervalle teilweise wesentlich größer seien als der Kalibrationsbereich. Krutchkoff untersucht nun auch die Pitman-Genauigkeit und präsentiert weitere Simulationsergebnisse (s. Abschnitt 3.2.3). Aus diesen Ergebnissen schließt er, daß der inverse Schätzer auch nach diesem Kriterium in den meisten untersuchten Situationen besser und im Kalibrationsbereich nie wesentlich schlechter sei, als der klassische.

G.K. Shukla [30] untersucht ebenfalls das asymptotische Verhalten des klassischen und des inversen Schätzers sowie den Einfluß des im Kalibrationsexperiment verwendeten Designs. Auch er kommt zu dem Schluß, daß der inverse Schätzer nur bei kleinen m und n in der Nähe von $\bar{x}$ überlegen sei.

L.J. Naszódi betrachtet die Verzerrung des klassischen Schätzers [21]. Um dem Problem zu begegnen, daß der klassische Schätzer bei normalverteilten Fehlertermen keinen definierten Erwartungswert hat, setzt Naszódi voraus, daß die Fehlerterme nur näherungsweise normalverteilt sind. Unter dieser Voraussetzung errechnet er die Verzerrung des klassischen Schätzers und konstruiert einen eigenen Schätzer, indem er den so ermittelten Bias vom klassischen Schätzer abzieht (s. Abschnitt 2.7). Durch ein Simulationsexperiment (s. Abschnitt 3.1.3) stellt Naszódi fest, daß der neue Schätzer in der Tat nahezu unverzerrt ist und dem klassischen Schätzer bezüglich des MSE überlegen ist. Dem inversen Schätzer gegenüber ist der Naszódi-Schätzer bezüglich des MSE unterlegen, hat aber den Vorteil der Konsistenz.

T. Lwin und J.S. Maritz [18] stellen in einem Artikel von 1980 einen weiteren Schätzer vor, der nicht linear in y_0 ist (s. Abschnitt 2.9). Das von ihnen zugrundegelegte Modell weicht allerdings von dem in Abschnitt 1.1 beschriebenen ab, da sie (X, Y) als bivariate Zufallsvariable auffassen. In einem recht begrenzten

Experiment ermitteln Lwin und Maritz, daß ihr Schätzer sowohl dem klassischen, als auch dem inversen Schätzer überlegen ist (s. Abschnitt 3.1.5). Der Schätzer kann in abgewandelter Form auch bei nicht normalverteilten Fehlern und in bestimmten Fällen bei Heteroskedastizität verwendet werden.

M.A. Ali und N. Singh [1] leiten einen "alternativen" Schätzer als gewichtetes Mittel aus dem klassischen Schätzer und $\bar{x}$ her (s. Abschnitt 2.3). Durch Betrachtung des asymptotischen MSE ermitteln sie ein optimales Gewicht. Durch weitere Betrachtungen der asymptotischen Eigenschaften sowie durch Simulationsexperimente (s. Abschnitt 3.1.4) belegen Ali und Singh, daß der alternative Schätzer in den meisten Situationen ein besseres Verhalten zeigt als der klassische und der inverse Schätzer.

Lwin und Maritz [19] leiten den inversen Schätzer als „linear compound estimator" her. Diese Methode setzt keine besonderen Verteilungsannahmen voraus und beruht nicht auf den bisherigen Regressionsansätzen. Lwin und Maritz hoffen, damit das Argument zu entkräften, der inverse Schätzer basiere auf der „falschen" Regression von X auf Y.

T.P. Turiel, G.J. Hahn und W.T. Tucker [36] stellen in einer Arbeit aus dem selben Jahr eine umfangreiche Simulationsstudie vor, in der der klassische, der inverse und der Naszódi-Schätzer bezüglich des MSE und der Pitman-Closeness verglichen werden (s. Abschnitte 3.1.6 u. 3.2.4).

S.D. Oman [22] liefert eine exakte Formel für den MSE des inversen Schätzers. Für ungerade n läßt sich diese in geschlossener Form darstellen, für gerade n bedarf es der numerischen Lösung eines Integrals.

G.K. Shukla und P. Datta [31] vergleichen den inversen Schätzer mit einer Variante des klassischen Schätzers, die endlichen MSE hat. Dies wird erreicht, indem dem eigentlichen Schätzer ein Test der Hypothese $\beta = 0$ vorausgeht. Die Schätzung wird nur dann vorgenommen, wenn die Hypothese verworfen werden kann. Ähnliche Stutzungen wurden auch schon in früheren Arbeiten durchgeführt, wobei bis dato immer willkürliche feste Werte verwandt wurden (etwa $\beta = 0.001$ bei Krutchkoff). Shukla und Datta gehen von der Tatsache aus, daß eine Betrachtung des Kalibrationsproblems überhaupt nur sinnvoll ist, wenn man annehmen kann, daß β von null verschieden ist.

S.K. Perng [25] leitet den inversen Schätzer mit Hilfe der Kreuzvalidierungsmethode her. Dieser Ansatz erfordert ebenfalls keine speziellen Verteilungsannahmen.

Anhand der Betrachtung asymptotisch kleiner Fehlerterme („small-disturbance asymptotic theory", SDA; $\sigma \to 0$) vergleichen V.K. Srivastava und N. Singh [32] den klassischen und inversen Schätzer und leiten einen Schätzer her, der bezüglich der SDA unverzerrt ist (s. Abschnitt 2.4). Im Sinne des (SD-)asymptotischen Bias ist dieser Schätzer beiden älteren Schätzern überlegen.

Bezüglich des SD-asymptotischen MSE ist dieser Schätzer dem klassischen Schätzer überlegen. Dem inversen Schätzer ist der Schätzer von Srivastava und Singh nur in bestimmten Bereichen überlegen.

Weitere Betrachtungen der SDA stellen D.S. Tracy und V.K. Srivastava [35] an. Der Halperin-Schätzer wird in den Vergleich einbezogen, und es wird eine SDA-unverzerrte Variante dieses Schätzers hergeleitet. Diese entspricht dem Naszódi-Schätzer.

R.C. Dahiya und J.J. McKeon [6] vergleichen eine Variante des Halperin-Schätzers mit dem Naszódi-Schätzer. Dahiya und McKeon leiten asymptotische Ergebnisse her und führen eine Simulationsstudie für kleine n durch (s. Abschnitt 3.1.7).

C. Hagwood [9] verwendet die Theorie der „ill-posed inverse problems“, um einen möglichst guten Schätzer herzuleiten (s. Abschnitt 2.8). Der so gefundene Schätzer wird auf seinen asymptotischen mittleren quadratischen Fehler hin untersucht und für besser befunden als der klassische Schätzer.

Umfassendere Abhandlungen zum Thema Kalibration wurden z.B. 1973 von H. Scheffé [29] und 1991 von C. Osborne [23] verfaßt.

1.3 Wichtige Notationen

Im Verlauf dieser Arbeit gelten die folgenden Notationen.

- n ist die Anzahl der im ersten Kalibrationsschritt erhobenen Datenpaare.
- x_i mit $i = 1, \ldots, n$ sind die voreingestellten Werte der unabhängigen Variable X. Der Vektor x mit $x = (x_1, \ldots, x_n)$ heißt der Designvektor.
- $x_{(1)}$, $\bar{x}$ und $x_{(n)}$ bezeichnen Minimum, Mittelwert und Maximum der x_i.
- Das Intervall $[x_{(1)}, x_{(n)}]$ heißt der Kalibrationsbereich.
- y_i mit $i = 1, \ldots, n$ sind die gemessenen Werte der abhängigen Variable Y.
- $\bar{y}$ bezeichnet den Mittelwert der y_i.
- α und β sind die Parameter der linearen Beziehung zwischen unabhängiger und abhängiger Variable. Es gilt $Y = \alpha + \beta X + \varepsilon$, bzw. $y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$.
- Der Fehlerterm ε sei hier als Normalverteilt mit Erwartungswert null und Varianz σ^2 vorausgesetzt ($\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$).

- S_{xx},S_{yy},S_{xy} und $S_{y\hat{y}}$ bezeichnen folgende Quadratsummen:

$$\begin{aligned}
S_{xx} &= \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \\
S_{yy} &= \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 \\
S_{xy} &= \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \\
S_{y\hat{y}} &= \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2
\end{aligned}$$

- $\sigma_x^2 = \frac{1}{n} S_{xx}$ ist die Varianz der x_i.
- a und b sind die KQ-Schätzer für α und β. Es gilt: $\beta = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$ und $a = \bar{y} - b\bar{x}$.
- $\hat{y}_i = a + bx_i$ sind die mit den x_i korrespondierenden Werte der abhängigen Variablen auf der geschätzten Regressionsgeraden.
- $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{(n-2)} S_{y\hat{y}}$ ist der erwartungstreue Schätzer für σ^2.
- x_0 ist der im zweiten Kalibrationsschritt zu schätzende Wert der unabhängigen Variablen. In der praktischen Anwendung ist dieser Wert unbekannt, im Simulationsexperiment wird er voreingestellt.
- m ist die Anzahl der wiederholten Messungen im zweiten Schritt.
- $y_{01}, \ldots, y_{0m}$ sind Messungen des mit x_0 korrespondierenden Wertes der abhängigen Variablen.
- $\bar{y}_0$ bezeichnet den Mittelwert der y_{0j} mit $j = 1, \ldots, m$.

Im Text werden folgende Bezeichnungen verwendet.

- *MSE* bezeichnet den mittleren quadratischen Fehler eines Schätzers $\hat{x}$, also $E(x_0 - \hat{x})^2$ bzw. die empirische Variante $\frac{1}{T} \sum_{k=1}^{T} (x_0 - \hat{x}_k)^2$, wobei T die Anzahl der Simulationsdurchgänge ist.
- *AMSE* bezeichnet den asymptotischen MSE für $n \to \infty$.
- *SD-MSE* oder MSE_{SD} bezeichnet den asymptotischen MSE für $\sigma \to 0$.
- *Bias* bezeichnet die Verzerrung eines Schätzers $\hat{x}$, also $\big(x_0 - E(\hat{x})\big)$. Zuweilen wird hiermit auch die asymptotische Verzerrung bezeichnet, was dann aus dem Text hervorgeht.

Kapitel 2

Einige Kalibrationsschätzer

In diesem Kapitel werden die verschiedenen Schätzer vorgestellt, deren Vergleich Gegenstand dieser Arbeit ist. In der Fachliteratur finden sich für einige der Schätzer die Herleitungen ihrer asymptotischen Eigenschaften. Entsprechende Ergebnisse werden in diesem Kapitel beschrieben. Am Ende des Kapitels findet sich eine Übersicht über die untersuchten Schätzer.

2.1 Der klassische Schätzer

Die augenfälligste und historisch älteste Methode, einen Schätzer für das unbekannte x_0 im Kalibrationsproblem (s. Abschnitt 1.1) zu finden, besteht darin, anhand der Beobachtungen $(x_i, y_i), i = 1 \ldots n$, nach der Methode der kleinsten Quadrate die Parameter α und β aus dem Modell in Gleichung (1.1) zu schätzen und die Geradengleichung zur Schätzung von x_0 zu verwenden.

Sind nun a und b die Kleinst-Quadrate-Schätzer für α und β, so ergibt sich der klassische Kalibrationsschätzer als

$$\hat{X}_C = \frac{\bar{y}_0 - a}{b} \qquad \text{mit} \qquad \bar{y}_0 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_{0i}. \tag{2.1}$$

Da

$$b = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} =: \frac{S_{xy}}{S_{xx}} \text{ und} \tag{2.2}$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}, \tag{2.3}$$

läßt sich der klassische Schätzer auch wie folgt schreiben:

$$\hat{X}_C = \frac{\bar{y}_0 - a}{b} = \bar{x} + \frac{S_{xx}}{S_{xy}}(\bar{y}_0 - \bar{y}). \tag{2.4}$$

2.2 Der inverse Schätzer

R. G. Krutchkoff schlägt in seinem Artikel [13] vor, das Modell (1.1) in das folgende Modell umzuschreiben:

$$X = \gamma + \delta Y + \varepsilon'. \tag{2.5}$$

Es gilt $\gamma = -\frac{\alpha}{\beta}$, $\delta = \frac{1}{\beta}$ und $\varepsilon' = -\frac{\varepsilon}{\beta}$.
Für die beobachteten Datenpaare (x_i, y_i) gilt unter dieser Modellannahme

$$x_i = \gamma + \delta y_i + \varepsilon_i', \qquad i = 1, \ldots, n. \tag{2.6}$$

Sind c und d die Kleinst-Quadrate-Schätzer für γ und δ, so ergibt sich der inverse Kalibrationsschätzer als

$$\hat{X}_I = c + d\bar{y}_0. \tag{2.7}$$

Da

$$d = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2} =: \frac{S_{xy}}{S_{yy}} \text{ und} \tag{2.8}$$

$$c = \bar{x} - d\bar{y}, \tag{2.9}$$

läßt sich der inverse Schätzer auch wie folgt schreiben:

$$\hat{X}_I = c + d\bar{y}_0 = \bar{x} + \frac{S_{xy}}{S_{yy}}(\bar{y}_0 - \bar{y}). \tag{2.10}$$

Anfangs wurde dieser Schätzer kritisiert, da seine Konstruktion theoretisch nicht fundiert erschien. Inzwischen haben jedoch mehrere Autoren theoretische Grundlagen für diesen Schätzer entwickelt. So leitet zum Beispiel Hoadley [11] diesen Schätzer als Bayes-Schätzer her.

Lwin und Maritz [19] leiten diesen Schätzer als „linear compound estimator“, Perng [25] mit Hilfe der Kreuzvalidierungsmethode („cross-validation method“) her. Diese Herleitungen erfordern keine speziellen Verteilungsannahmen.

2.3 Der Schätzer von Ali und Singh

Ali und Sing [1] schlagen einen Schätzer vor, den sie *weighted average estimator* (WAE) nennen. Er besteht aus der konvexen Kombination

$$\hat{X}_a := \lambda \hat{X}_C + (1-\lambda)\bar{x}, \qquad \lambda \in [0,1]. \tag{2.11}$$

Ali und Singh stellen fest, daß zu jedem x_0 ein optimales λ existiert, so daß der WAE einen besseren AMSE als der klassische und der inverse Schätzer hat.

Dieses Optimum ist gegeben durch

$$\lambda^* := \frac{\beta^2\delta^2}{\beta^2\delta^2+\sigma^2} \text{ mit } \delta = x_0 - \bar{x}. \tag{2.12}$$

Da dieser Term unbekannte Größen enthält, schlagen Ali und Singh vor, β durch den Parameterschätzer b, σ^2 durch die Schätzung

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2} S_{y\hat{y}} := \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 \text{ mit } \hat{y}_i = a + bx_i \tag{2.13}$$

und δ durch $(\hat{X}_C - \bar{x})$ oder $(\hat{X}_I - \bar{x})$ zu ersetzten. Da letztere Schätzung möglicherweise zu ungenau ist, schlagen Ali und Singh vor, eine weitere Schätzung mit $(\hat{X}_a - \bar{x})$ an Stelle von δ durchzuführen und diese Vorgehensweise zu wiederholen, bis eine zufriedenstellende Stabilität erreicht ist.

2.4 Der Schätzer von Srivastava und Singh

Srivastava und Singh [32] betrachten das Kalibrationsproblem unter dem Gesichtspunkt asymptotisch kleiner Fehlervarianzen („small disturbance asymptotic theory"). Die asymptotischen Eigenschaften der Schätzer für große Stichprobenumfänge, die von zahlreichen anderen Autoren betrachtet werden, halten Srivastava und Singh für weniger aussagekräftig, da in der Praxis oft nur wenige Messungen gemacht würden.

Srivastava und Singh leiten Approximationen für Bias und MSE eines gewichteten Durchschnitts aus dem klassischen und dem inversen Schätzer her:

$$\hat{X}_\lambda = \lambda \hat{X}_I + (1-\lambda)\hat{X}_C. \tag{2.14}$$

Die Approximation des Bias zur Ordnung $O(\theta^2)$ mit $\theta = \frac{\sigma}{\beta}$ beträgt gerade

$$\mathrm{Bias}_{SD}(\hat{X}_\lambda) \doteqdot \theta^2[(n-2)\lambda - 1]\frac{(\bar{x}-x_0)^2}{S_{xx}}. \tag{2.15}$$

Dieser Term wird zu null, wenn $\lambda = \frac{1}{n-2}$ ist. Damit ergibt sich ein zur Ordnung der Approximation unverzerrter Schätzer als

$$\hat{X}_{au} = \frac{\hat{X}_I + (n-3)\hat{X}_C}{n-2}. \tag{2.16}$$

Dieser Schätzer hat für $n > 2$ einen kleineren SD-MSE als $\hat{X}_C$ und für $n > 6$ einen kleineren SD-MSE als $\hat{X}_I$, falls

$$\frac{(\bar{x}-x_0)^2}{S_{xx}} > \frac{2(n+1)(n-2)}{n(n^2-9n+16)}. \tag{2.17}$$

Für $n \leq 6$ hat $\hat{X}_{au}$ immer einen kleineren SD-MSE als $\hat{X}_I$.

2.5 Der Schätzer von Halperin

M. Halperin [10] definiert eine Verallgemeinerung des inversen Schätzers wie folgt:

$$\hat{X}_H := (1-R_M)\bar{x} + R_M\hat{X}_C, \tag{2.18}$$

wobei

$$R_M := \frac{b^2 S_{xx}}{\frac{1}{M}S_{y\hat{y}} + b^2 S_{xx}}. \tag{2.19}$$

Halperin selbst gibt keinen Wertebereich für M an. Er selbst benutzt bei weiteren Güteuntersuchungen $M = m$ (s. Abschnitt 3.2.2).

Aus einem Ergebnis von Dahiya und McKeon [6] folgt, daß $\hat{X}_H$ konsistent für x_0 ist, falls $M = m\frac{n-2}{n}$. Also ergibt sich als konsistente Version des Halperin-Schätzers:

$$\hat{X}_H := \bar{x} + \frac{bS_{xx}}{\frac{n}{m(n-2)}S_{y\hat{y}} + b^2 S_{xx}}(\bar{y}_0 - \bar{y}). \tag{2.20}$$

2.6 Der Schätzer von Aitchison und Dunsmore

Aitchison und Dunsmore [2] untersuchen mit Hilfe der Bayes-Theorie die „calibrative distribution", also

$$p(x_0|y_0, z) \text{ mit } z = \{(x_i, y_i) : i = 1, \ldots, n\}. \quad (2.21)$$

Ein Ergebnis dieser Untersuchung besteht darin, daß der inverse Schätzer als Erwartungswert dieser Verteilung bei Annahme einer bestimmten a-priori-Verteilung und $m = 1$ hergeleitet werden kann. Bei Annahme derselben a-priori-Verteilung im Falle $m > 1$ beträgt dieser Erwartungswert gerade

$$\hat{X}_{AD} := \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y})\frac{S_{xy}}{S_{yy} + V} \quad (2.22)$$

mit

$$V = \sum_{j=1}^{m}(y_{0j} - \bar{y}_0)^2. \quad (2.23)$$

Dieser Wert wird als möglicher Schätzer für x_0 vorgeschlagen. Untersuchungen zur Qualität des Schätzers machen Aitchison und Dunsmore nicht. Lediglich die Tatsache, daß $\hat{X}_{AD}$ um so näher an $\bar{x}$ liegt, je größer die Streuung der y_{0j} ist, wird im Sinne der Bayes-Theorie als Vorteil gewertet, da $\bar{x}$ gerade der Erwartungswert der angenommenen a-priori-Verteilung ist. Weisen die zusätzlichen Daten eine hohe Variabilität auf, so erscheint ein Abweichen von der a-priori-Annahme wenig wünschenswert.

2.7 Der Schätzer von Naszódi

László J. Naszódi [21] konstruiert einen Schätzer, indem er den von Shukla [30] approximierten Bias des klassischen Schätzers von diesem abzieht. Damit erhält Naszódi einen Schätzer, der im Rahmen der Genauigkeit der Approximation unverzerrt ist.

Der von Shukla ermittelte Bias beträgt

$$\text{Bias}(\hat{X}_C) \doteqdot \frac{\sigma^2}{S_{xx}\beta^2}(x_0 - \bar{x}). \quad (2.24)$$

Damit berechnet sich der neue Schätzer aus

$$\hat{X}_u = \hat{X}_C - \frac{\sigma^2}{S_{xx}b^2}(x_0 - \bar{x}). \tag{2.25}$$

Nach Vereinfachung hat der Schätzer die folgende Gestalt:

$$\hat{X}_u = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y})\frac{bS_{xx}}{\sigma^2 + b^2 S_{xx}}. \tag{2.26}$$

In der Praxis muß σ^2 geeignet geschätzt werden. Verwendet man hierzu z.B. $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2}S_{y\hat{y}}$, so entspricht der Naszódi-Schätzer einem Halperin-Schätzer.

Tatsächlich leiten Tracy und Srivastava [35] diesen Schätzer mit Hilfe der Theorie asymptotisch kleiner Fehler als Halperin-Schätzer mit $M = n-2$ her. Diese Konstruktion ergibt sich aus der Tatsache, daß eine Approximation des Bias des Halperin-Schätzers für diesen Wert von M gerade null beträgt.

Der Naszodi-Schätzer kann also auch für $\sigma^2 \to 0$ als asymptotisch annähernd unverzerrt betrachtet werden.

2.8 Der Schätzer von Hagwood

Mit Hilfe der Theorie der „ill-posed inverse problems“ leitet C. Hagwood [9] folgende Schätzerfamilie her:

$$\hat{X}_\lambda = \frac{b}{\lambda + b^2}(y - a). \tag{2.27}$$

Bei Betrachtung des asymptotischen MSE ergibt sich der optimale Parameter als

$$\lambda^* = \frac{\sigma^2}{x_0^2}. \tag{2.28}$$

Dieser Term enthält die in der Praxis unbekannten Größen x_0 und λ. Hagwood schlägt zwei Schätzungen für λ^* vor:

$$\hat{\lambda}^* = \frac{\hat{\sigma}^2}{\hat{X}_C^2}, \tag{2.29}$$

$$\hat{\lambda}_{cv} = \frac{\hat{\sigma}^2}{1/n \sum_{i=1}^{n} x_i^2}. \tag{2.30}$$

Letztere ergibt sich mit Hilfe der Kreuzvalidierungsmethode.

Hagwood betrachtet nur den Fall $\bar{x} = 0$. Diese Bedingung ist bei den Simulationsexperimenten, an denen sich diese Arbeit orientiert, nicht erfüllt. Daher wird in dieser Arbeit folgende Form des Schätzers verwendet werden:

$$\hat{X}_\lambda = \bar{x} + \frac{b}{\lambda + b^2}(\bar{y}_0 - \bar{y}). \tag{2.31}$$

2.9 Der Schätzer von Lwin und Maritz

Lwin und Maritz betrachten den Fall, daß die Paare (x_i, y_i) Ausprägungen einer bivariaten Zufallsvariable (X, Y) seien. Diese Annahme weicht von den Voraussetzungen in Abschnitt 1.1 ab, da hier die x_i als fest voreingestellt angenommen wurden.

Lwin und Maritz leiten für diesen Fall einen Schätzer her, den sie als "Nonlinear Predictor" bezeichnen. Dieser Schätzer hat bei angenommener Normalverteilung die folgende Form:

$$\hat{X}_n = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \phi\left(\frac{\bar{y}_0 - a - bx_i}{\hat{\sigma}}\right)}{\sum_{i=1}^{n} \phi\left(\frac{\bar{y}_0 - a - bx_i}{\hat{\sigma}}\right)}. \tag{2.32}$$

Hierbei ist ϕ die Dichtefunktion der Standardnormalverteilung.

2.10 Die asymptotischen Eigenschaften einiger Schätzer

Nach Berkson [4] ergibt sich die asymptotische Varianz des klassischen Schätzers für $n \to \infty$ als

$$\mathrm{Var}(\hat{X}_C) = \left(\frac{\sigma}{\beta}\right)^2. \tag{2.33}$$

Der Schätzer ist asymptotisch unverzerrt, also gilt für die asymptotische Verzerrung:

$$\mathrm{Bias}(\hat{X}_C) = 0. \tag{2.34}$$

Damit ergibt sich für den asymptotischen mittleren quadratischen Fehler des klassischen Schätzers für $n \to \infty$:

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_C) = \left(\frac{\sigma}{\beta}\right)^2. \tag{2.35}$$

Für die asymptotische Varianz des inversen Schätzers gibt Berkson folgenden Wert an:

$$\mathrm{Var}(\hat{X}_I) = \frac{\sigma^2}{(\beta + f)^2}, \tag{2.36}$$

wobei $f = \frac{\sigma^2}{\beta \sigma_x^2}$ ist.
Der inverse Schätzer ist nicht asymptotisch unverzerrt, und die Verzerrung beträgt

$$\mathrm{Bias}(\hat{X}_I) = \frac{\sigma^2}{\beta^2 \sigma_x^2 + \sigma^2}(\bar{x} - x_0) = \frac{f}{\beta + f}(\bar{x} - x_0). \tag{2.37}$$

Damit ergibt sich für den asymptotischen mittleren quadratischen Fehler für $n \to \infty$ des inversen Schätzers:

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_I) = \frac{\sigma^2 + f^2(\bar{x} - x_0)^2}{(\beta + f)^2}. \tag{2.38}$$

Berkson gibt auch noch allgemeinere Werte für den Fall an, daß im zweiten Kalibrationsschritt mehrere Messungen durchgeführt werden:

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_C) = \frac{1}{m}\left(\frac{\sigma}{\beta}\right)^2, \tag{2.39}$$

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_I) = \frac{\sigma^2}{m(\beta + f)^2} + \frac{f^2}{(\beta + f)^2}(\bar{x} - x_0)^2. \tag{2.40}$$

Halperin [10] gibt den AMSE seines Schätzers als

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_H) = \frac{R_\infty^2}{m\frac{\beta^2}{\sigma^2}} + (1 - R_\infty)^2(\bar{x} - x_0)^2 \tag{2.41}$$

mit

$$R_\infty = \frac{M\frac{\beta^2}{\sigma^2}\sigma_x^2}{1 + M\frac{\beta^2}{\sigma^2}\sigma_x^2} \tag{2.42}$$

an. Hierbei wird M als konstant vorausgesetzt, was allerdings bei der in dieser Arbeit verwendeten Variante des Schätzers nicht erfüllt ist, da hier $M = m(n-2)/n$.

Ali und Singh [1] geben für die allgemeine Form ihres WAE folgende Werte an:

$$\operatorname{Bias}(\hat{X}_a) = -(1-\lambda)(x_0 - \bar{x}), \tag{2.43}$$

$$\operatorname{Var}(\hat{X}_a) = \frac{\lambda^2\sigma^2}{\beta^2}, \tag{2.44}$$

$$\operatorname{AMSE}(\hat{X}_a) = (1-\lambda)^2(x_0 - \bar{x})^2 + \frac{\lambda^2\sigma^2}{\beta^2}. \tag{2.45}$$

Die Konstruktion der speziellen Form beruht auf einer Optimierung bezüglich des AMSE. Der AMSE des konkreten Schätzers mit $\lambda^* := \beta^2(x_0-\bar{x})^2/(\beta^2(x_0-\bar{x})^2 + \sigma^2)^{-1}$ beträgt

$$\operatorname{AMSE}(\hat{X}_a) = \frac{\sigma^2(x_0 - \bar{x})^2}{\sigma^2 + \beta^2(x_0 - \bar{x})^2}. \tag{2.46}$$

Die Konstruktion des Hagwood-Schätzers beruht auf der Betrachtung des asymptotischen MSE des allgemeinen Schätzers

$$\hat{X}_\lambda = \frac{b}{\lambda + b^2}(y - a). \tag{2.47}$$

Dieser beträgt laut Hagwood [9] gerade

$$\operatorname{AMSE}(\hat{X}_\lambda) = x^2\left(\frac{\lambda}{\lambda+\beta^2}\right)^2 + \left(\frac{\beta}{\lambda+\beta^2}\right)^2\sigma^2 \tag{2.48}$$

und nimmt sein Minimum gerade für $\lambda^* = \sigma^2/x^2$ an.

Da der Schätzer von Srivastava und Singh [32] auf Betrachtungen des MSE bei asymptotisch kleinen Fehlern ($\sigma \to 0$) beruht, machen die Autoren keine Angaben zum Verhalten des MSE bei großen n.

Sie geben jedoch den SD-MSE des klassischen, des inversen und ihres eigenen Schätzers als Approximation zur Ordnung $O(\theta^4)$ mit $\theta = \sigma/\beta$ an:

$$\operatorname{MSE}_{SD}(\hat{X}_C) \doteqdot \theta^2 V + 3\theta^4\left[3(\bar{x} - x_0)^2 + \frac{n+1}{n}S_{xx}\right], \tag{2.49}$$

$$\mathrm{MSE}_{SD}(\hat{X}_I) \doteqdot \theta^2 V + \theta^4 \left[(n-5)(\bar{x}-x_0)^2 - \frac{(2n-7)(n+1)}{n} S_{xx}\right] / S_{xx}^2, \tag{2.50}$$

$$\mathrm{MSE}_{SD}(\hat{X}_{au}) \doteqdot \theta^2 V + \theta^4 \left[2(n-1)(\bar{x}-x_0)^2 + \frac{(n+1)(n-2)}{n} S_{xx}\right] / (n-2) S_{xx}^2. \tag{2.51}$$

Hierbei ist $V = \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(\bar{x}-x_0)^2}{S_{xx}}\right]$.

2.11 Übersicht der Schätzer

Gegenstand dieser Arbeit sind also neun Schätzer, die hier noch einmal im Überblick dargestellt werden:

$$\hat{X}_C = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \frac{S_{xx}}{S_{xy}}, \tag{2.52}$$

$$\hat{X}_I = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \frac{S_{xy}}{S_{yy}}, \tag{2.53}$$

$$\hat{X}_a = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \left(\frac{\beta^2 (x_0 - \bar{x})^2}{\beta^2 (x_0 - \bar{x})^2 + \sigma^2}\right) \frac{S_{xx}}{S_{xy}}, \tag{2.54}$$

$$\hat{X}_{au} = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \left[\frac{S_{xy}}{(n-2) S_{yy}} + \frac{(n-3) S_{xx}}{(n-2) S_{xy}}\right], \tag{2.55}$$

$$\hat{X}_H = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \frac{b S_{xx}}{\frac{n}{m(n-2)} S_{Y\hat{Y}} + b^2 S_{xx}}, \tag{2.56}$$

$$\hat{X}_u = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \frac{b S_{xx}}{b^2 S_{xx} + \hat{\sigma}^2}, \tag{2.57}$$

$$\hat{X}_{AD} = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \frac{S_{xy}}{S_{yy} + \sum_{j=1}^{m} (y_{0j} - \bar{y}_0)^2}, \tag{2.58}$$

$$\hat{X}_{\lambda*} = \bar{x} + (\bar{y}_0 - \bar{y}) \frac{b S_{xx}}{\frac{\sigma^2}{x_0^2} S_{xx} + b^2 S_{xx}}, \tag{2.59}$$

$$\hat{X}_n = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \phi\left(\frac{\bar{y}_0 - a - b x_i}{\hat{\sigma}}\right)}{\sum\limits_{i=1}^{n} \phi\left(\frac{\bar{y}_0 - a - b x_i}{\hat{\sigma}}\right)}. \tag{2.60}$$

Im Falle des Ali-Singh-Schätzers und des Hagwod-Schätzers liegen mehrere Varianten des jeweiligen Schätzers vor. Es wird in einem späteren Abschnitt noch zu klären sein, welche dieser Varianten tatsächlich in der Simulationsstudie Verwendung finden.

Die verschiedenen Schätzer wurden in der Literatur unterschiedlich häufig und unterschiedlich detailliert besprochen. Die größte Aufmerksamkeit wurde sicherlich dem klassischen und dem inversen Schätzer zuteil, gefolgt vom Halperin-Schätzer, der gewissermaßen als Prototyp für eine ganze Reihe von Schätzern fungiert, und dem Naszódi-Schätzer.

Im folgenden Kapitel werden die wichtigsten bisherigen Studien, die sich mit dem Vergleich von Kalibrationsschätzern beschäftigen, vorgestellt.

Kapitel 3

Bisherige Studien

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse früherer Studien vorgestellt. Im ersten Abschnitt finden sich Ergebnisse von Vergleichen bezüglich des mittleren quadratischen Fehlers. Im zweiten Abschnitt wird das Kriterium der Pitman-Genauigkeit vorgestellt, und es werden Vergleiche bezüglich dieses Kriteriums beschrieben.

3.1 Vergleich des MSE

3.1.1 Krutchkoffs Studien

Krutchkoff [13] liefert als Argument für die Verwendung des inversen Schätzers eine Simulationsstudie, in der dieser mit dem klassischen Schätzer anhand des MSE verglichen wird.

Der Simulation liegt das Modell $y = \alpha + \beta x + \varepsilon$ mit $\alpha = 0$ sowie $\beta = 0.05$, 0.1, 0.2, 0.5, 0.75, 1, 2 und 5 zugrunde. Die Fehlerterme werden als normalverteilte Pseudozufallszahlen mit Erwartungswert null und Standardabweichung $\sigma = 0.1$ von einem Computer erzeugt.

Der Kalibrationsbereich ist das Intervall $[0, 1]$, und es werden $n = 6$ Beobachtungen im Endpunktdesign erzeugt, d.h. $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$.

Im zweiten Schritt des Experiments werden Schätzungen für die Werte $x_0 =$ 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, und 2 durchgeführt. In der ursprünglichen Arbeit sind auch Ergebnisse für $x_0 = 5.0, 10.0$ angegeben, diese Werte sind jedoch, wie Krutchkoff in einer späteren Veröffentlichung [14] korrigiert, nur Wiederholungen für $x_0 = 2$.

Für jede Kombination der Parameter werden 10000 Versuche durchgeführt.

Ist der geschätzte Betrag des Steigungsparameters kleiner als 0.001, so stutzt Krutchkoff diesen Wert auf 0.001. Diese Maßnahme soll einem exzessiv hohen MSE vorbeugen. Krutchkoff berichtet, daß die Stutzung für insgesamt 124 der 30000 Simulationsdurchgänge für die Parameterwerte 0.05, 0.1 und 0.2 durchgeführt wurde.

Die folgende Tabelle zeigt einige der Ergebnisse.

Tabelle 3.1: Vergleich von $\hat{X}_C$, und $\hat{X}_I$

	x_0 0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2
$\beta = 0.05$							
MSE($\hat{X}_C$)	174.4	193.2	151.5	197.5	183.0	188.7	199.8
MSE($\hat{X}_I$)	0.347	0.212	0.144	0.134	0.215	0.355	0.550
$\beta = 0.1$							
MSE($\hat{X}_C$)	128.4	93.4	99.1	111.9	138.5	142.7	135.1
MSE($\hat{X}_I$)	0.294	0.197	0.148	0.138	0.199	0.291	0.440
$\beta = 0.2$							
MSE($\hat{X}_C$)	16.7	10.8	15.6	16.8	22.4	24.3	45.3
MSE($\hat{X}_I$)	0.181	0.141	0.128	0.127	0.140	0.177	0.224
$\beta = 0.5$							
MSE($\hat{X}_C$)	0.062	0.054	0.052	0.051	0.054	0.060	0.070
MSE($\hat{X}_I$)	0.049	0.043	0.041	0.041	0.043	0.048	0.055
$\beta = 0.75$							
MSE($\hat{X}_C$)	0.0252	0.0230	0.0221	0.0222	0.0229	0.0256	0.0258
MSE($\hat{X}_I$)	0.0228	0.0208	0.0200	0.0202	0.0207	0.0231	0.0258
$\beta = 1.0$							
MSE($\hat{X}_C$)	0.0139	0.0124	0.0120	0.0122	0.0125	0.0138	0.0154
MSE($\hat{X}_I$)	0.0132	0.0118	0.0114	0.0116	0.0018	0.0130	0.0146
$\beta = 2.0$							
MSE($\hat{X}_C$)	0.00342	0.00308	0.00299	0.00292	0.00317	0.00335	0.00376
MSE($\hat{X}_I$)	0.00337	0.00304	0.00295	0.00288	0.00313	0.00332	0.00373
$\beta = 5.0$							
MSE($\hat{X}_C$)	0.00054	0.00050	0.00048	0.00048	0.00050	0.00055	0.00069
MSE($\hat{X}_I$)	0.00054	0.00050	0.00048	0.00048	0.00049	0.00055	0.00060
$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ x = (0,0,0,1,1,1),\ m = 1$							

aus Krutchkoff [13], p. 431, Table 3

In den meisten von Krutchkoff untersuchten Fällen hat der inverse Schätzer einen kleineren MSE als der klassische.

In einer späteren Arbeit [15] betrachtet Krutchkoff den Fall, daß x_0 außerhalb des Kalibrationsbereichs liegt.

Er berichtet, daß weitere Versuche für die Werte $x_0 = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ und 10 unter Beibehaltung aller übrigen Parameter ebenfalls eine Überlegenheit des inversen Schätzers belegen, gibt für diese Fälle allerdings keine Ergebnisse an.

Bei Versuchen mit größeren Anzahlen von Beobachtungen im ersten Kalibrationsschritt zeigt sich, daß der MSE des klassischen Schätzers in diesen Fällen schneller abnimmt, als der des inversen Schätzers. Dies belegt Krutchkoff mit Ergebnissen für $n = 10, 20, 40$ und 100, jeweils im Endpunktdesign auf dem Intervall $[0, 1]$.

Einige der Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Tabelle 3.2: Vergleich von $\hat{X}_C$, und $\hat{X}_I$

	x_0							
	3	4	5	6	7	8	9	10
$n = 10$								
$\hat{X}_C$	0.163	0.283	0.432	0.620	0.850	1.11	1.43	1.76
$\hat{X}_I$	0.170	0.303	0.469	0.689	0.945	1.24	1.60	1.99
$n = 20$								
$\hat{X}_C$	0.100	0.151	0.226	0.310	0.422	0.551	0.681	0.849
$\hat{X}_I$	0.154	0.272	0.427	0.624	0.860	1.12	1.44	1.79
$n = 40$								
$\hat{X}_C$	0.0685	0.0962	0.1313	0.1724	0.2279	0.2865	0.3619	0.4378
$\hat{X}_I$	0.1496	0.2624	0.4143	0.6046	0.8369	1.101	1.396	1.747
$n = 100$								
$\hat{X}_C$	0.0515	0.0610	0.0747	0.0936	0.1118	0.1364	0.1632	0.1917
$\hat{X}_I$	0.1491	0.2603	0.4162	0.6056	0.8348	1.089	1.408	1.745
$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ \beta = 0,\ x = (0, \dots, 0, 1, \dots, 1),\ m = 1$								

aus Krutchkoff [15], p. 607, Table 2

3.1.2 Berksons Studie

J. Berkson vergleicht in seiner Arbeit [4] den von ihm jeweils für den klassischen und den inversen Schätzer ermittelten AMSE (s. Abschnitt 2.10) mit Krutchkoffs Ergebnissen.

Er errechnet die jeweiligen AMSE-Werte für die Parameter, die für Tabelle 1 in Krutchkoffs Arbeit [13] vorlagen und vergleicht den Quotienten der AMSE-Werte mit dem von Krutchkoff empirisch ermittelten MSE-Quotienten. Hierbei ist zu beachten, daß Berkson sich noch ausschließlich auf die erste Arbeit von Krutchkoff bezieht, in der für $x_0 = 5$ und $x_0 = 10$ fehlerhafte Daten angegeben werden.

Die folgende Tabelle gibt Berksons Ergebnisse wieder.

Tabelle 3.3: Vergleich von $\hat{X}_C$, und $\hat{X}_I$

	$n \to \infty$				MSE-Quotient	
	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$				
X_0	AMSE	Bias	Varianz	AMSE	$n \to \infty$	n=6
0	0.04	0.068966	0.029727	0.034483	1.16	1.28
0.2	0.04	0.041379	0.029727	0.031439	1.27	1.26
0.4	0.04	0.013793	0.029727	0.029917	1.34	1.25
0.6	0.04	-0.013793	0.029727	0.029917	1.34	1.25
0.8	0.04	-0.041379	0.029727	0.031439	1.27	1.25
1.0	0.04	-0.068966	0.029727	0.034483	1.16	1.25
1.2	0.04	-0.096552	0.029727	0.039049	1.02	1.28
2.0	0.04	-0.206896	0.029727	0.072533	0.55	1.27
5.0	0.04	-0.620690	0.029727	0.414983	0.096	1.30
10.0	0.04	-1.310344	0.029727	1.746728	0.023	1.28
$\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $\sigma = 0.1$, $m = 1$						

aus Berkson [4], p. 653, Table 1

Berkson macht damit die Feststellung, daß der MSE der Schätzer sich außerhalb des Kalibrationsbereichs – insbesondere bei großen n – anders verhält als innerhalb dieses Intervalls. Wie im letzten Abschnitt bereits erwähnt, bestätigt Krutchkoffs zweite Studie diese Ergebnisse.

Berkson betrachtet weiterhin das Verhalten der Schätzer im Falle $m > 1$, also bei wiederholten Messungen für y_0.

Tabelle 3.4: Vergleich von $\hat{X}_C$, und $\hat{X}_I$

	$m = 1$			$m = 100$		
x_0	MSE($\hat{X}_C$)	MSE($\hat{X}_I$)	Quotient	MSE($\hat{X}_C$)	MSE($\hat{X}_I$)	Quotient
0	0.04	0.034483	1.16	0.0004	0.005054	0.08
0.2	0.04	0.031439	1.27	0.0004	0.002010	0.20
0.4	0.04	0.029917	1.34	0.0004	0.000488	0.82
0.6	0.04	0.029917	1.34	0.0004	0.000488	0.82
0.8	0.04	0.031439	1.27	0.0004	0.002010	0.20
1.0	0.04	0.034483	1.16	0.0004	0.005054	0.08
$\alpha = 0,\ \beta = 0.5,\ \sigma = 0.1,\ n \to \infty$						

aus Berkson [4], p. 657, Table 4

Insgesamt stellt Berkson fest, daß es außer an der Stelle $x_0 = \bar{x}$ für jedes x_0 ein m_0 gibt, so daß der MSE des klassischen Schätzers für alle $m \geq m_0$ kleiner ist als der des inversen Schätzers.

3.1.3 Naszódis Studie

L.J. Naszódi [21] untersucht den von ihm entwickelten Schätzer in einem Simulationsexperiment, in dem je 12.000 Durchgänge mit äquidistantem Design und mit Endpunktdesign durchgeführt werden.

Der Kalibrationsbereich ist $B := [-6, +6]$, und die simulierten Meßwerte ergeben sich zu $y_i = 1.25(x - \bar{x}) - 10 + \delta_i$, wobei die δ_i hier keine exakt normalverteilten Fehler sind, sondern als Summe von rechteckverteilten Zufallszahlen zustande kommen. Naszódi weist darauf hin, daß die so erzeugte Verteilung die Normalverteilung gut approximiert, daß die Abweichung aber ausreichend für die Existenz des Erwartungswertes sei.

Tabelle 3.5: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$ und $\hat{X}_u$ bei $x_0 = 100, m = 10$

	äquidistant (n=13)			Endpunkte (n=12)		
	MW	MSE	Bias	MW	MSE	Bias
$\hat{X}_C$	100.366	0.0554	0.366	100.168	0.0356	0.168
$\hat{X}_u$	100.008	0.0548	0.008	100.019	0.0354	0.019
$\hat{X}_I$	96.587	0.0510	-3.413	98.702	0.0346	-1.298

aus Naszódi [21], p. 204, Table 1

Naszódi kommt zu dem Ergebnis, daß der von ihm vorgeschlagene Schätzer praktisch unverzerrt und effizienter als der klassische Schätzer ist und gegenüber dem inversen Schätzer den Vorteil der Konsistenz hat.

3.1.4 Die Studie von Ali und Singh

Ali und Singh [1] beschreiben eine Simulationsstudie, bei der der klassische Schätzer, der inverse Schätzer und der Ali-Singh-Schätzer miteinander verglichen werden.

Die verwendeten Modellparameter sind $\alpha = 1$, $\beta = 0.5$, $\sigma^2 = 0.25$ und $m = 1$. Der Kalibrationsbereich ist das Intervall $[0, 1]$ und es wurde das Endpunktdesign verwendet. Es wurden an den Stellen $x_0 = 0$, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, und 1 bei $n = 12$, 20 und 50 jeweils 1000 Messungen durchgeführt.

Tabelle 3.6: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$, und $\hat{X}_a$

n	x_0	MSE($\hat{X}_C$)	MSE($\hat{X}_I$)	MSE($\hat{X}_a$)
12	0.0	45.078	0.256	0.265
	0.2	25.523	0.110	0.102
	0.4	17.742	0.064	0.021
	0.6	17.742	0.060	0.021
	0.8	25.524	0.111	0.102
	1.0	45.078	0.256	0264
20	0.0	5.435	0.235	0.241
	0.2	3.019	0.094	0.087
	0.4	2.483	0.054	0.010
	0.6	2.483	0.052	0.009
	0.8	3.017	0.094	0.087
	1	5.438	0.238	0.243
50	0	1.521	0.216	0.219
	0.2	1.409	0.088	0.081
	0.4	1.106	0.021	0.002
	0.6	1.105	0.021	0.001
	0.8	1.410	0.085	0.080
	1	1.532	0.251	0.218
$\alpha = 1$, $\beta = 0.5$, $\sigma^2 = 0.25$				

aus Ali/Singh [1], p. 10, Table I

Hier zeigt sich ein deutlicher Vorteil des Ali-Singh-Schätzers vor allem im Zentrum des Kalibrationsbereichs.

3.1.5 Die Studie von Lwin und Maritz

Lwin und Maritz [18] untersuchen die Qualität ihres Schätzers anhand eines Datensatzes von 16 Beobachtungen von (X, Y), der bereits bei Aitchison und Dunsmore [2] Verwendung fand.

Sie betrachten jeweils 15 der Wertepaare als Beobachtungen aus einem Kalibrationsexperiment und den sechzehnten y-Wert als das beobachtete y_0. Anhand dieser Werte werden nun die Schätzer $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$ und $\hat{X}_n$ berechnet und mit dem tatsächlich von Aitchison und Dunsmore gemessenem x-Wert verglichen. Diese Berechnung wird nacheinander für jedes Paar durchgeführt.

Tabelle 3.7: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$ und $\hat{X}_n$

#	Y	X	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_n$	$\hat{X}_I$
1	23.7	35.3	32.5	32.2	33.2
2	20.2	27.6	28.3	28.2	27.0
3	24.5	36.2	33.5	33.2	33.9
4	15.8	21.6	22.7	22.8	22.9
5	29.2	39.8	40.0	39.2	39.2
6	17.8	24.1	25.3	25.3	25.7
7	10.1	16.1	15.0	15.6	15.0
8	19.0	27.5	26.7	26.7	26.1
9	24.3	33.1	33.7	33.3	35.6
10	10.6	12.8	16.6	17.0	17.4
11	15.2	23.1	21.7	21.9	21.1
12	11.4	19.6	16.5	16.9	17.1
13	19.7	26.1	27.7	27.7	27.3
14	12.7	19.3	18.5	18.9	18.9
15	12.6	18.8	18.4	18.8	19.1
16	31.8	39.8	44.7	43.9	39.8
		MSE	4.6	4.3	3.6

aus Lwin/Maritz [18], p. 139, Table 1

3.1.6 Die Studie von Turiel, Hahn und Tucker

Turiel, Hahn und Tucker [36] beschreiben eine sehr umfangreiche Studie, in der unter anderem der MSE, die Pitman-Genauigkeit und die Überschätzungswahrscheinlichkeit des klassischen, des inversen und des Naszódi-Schätzers untersucht wurden. In diesem Abschnitt werden einige der Ergebnisse bezüglich des MSE vorgestellt. Ergebnisse bezüglich der Pitman-Genauigkeit werden in Abschnitt 3.2.4 behandelt.

Turiel, Hahn und Tucker verwendeten die gleichen Versuchsbedingungen wie Krutchkoff. Für jede Kombination der Versuchsparameter wurden jeweils 10000 Simulationsdurchgänge berechnet. Es wurden im Kalibrationsexperiment jeweils drei Beobachtungen für $x = 0$ und $x = 1$ gemacht. In einem weiteren Experiment wurden für dieselben Werte von x jeweils 50 Messungen durchgeführt. Die Standardabweichung der Fehlerterme betrug $\sigma = 0.1$.

Bei $\alpha = 0$ wurden Experimente für die Steigungsparameter $\beta = 0.05$, 0.1, 0.2, 0.5, 0.75, 1.0, 2.0, 5.0 und 10.0 durchgeführt. Im zweiten Schritt des Experiments wurden Schätzungen für die Werte $x_0 = 0.0$, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 2.0, 5.0, 10.0. von x_0 vorgenommen.

Auch in dieser Studie wurde b durch 0.001 ersetzt, wenn $|b| < 0.001$ ist. Diese Maßnahme war bei dem Experiment mit $n = 6$ nur für Versuche mit $\beta \leq 0.2$ nötig und betraf weniger als 1% der Simulationsdurchgänge. Bei dem Experiment mit $n = 100$ trat dieser Fall nur für Versuche mit $\beta = 0.05$ auf und betraf weniger als 0.3% der Simulationsdurchgänge.

Eine Auswahl der Ergebnisse für $n = 6$ findet sich in der folgenden Tabelle.

Tabelle 3.8: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$ und $\hat{X}_u$

		MSE		
β	x_0	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_u$
0.1	0.0	118.37580	0.29306	0.56811
	0.2	132.05664	0.19282	0.50526
	0.4	87.85182	0.13992	0.43283
	0.6	100.18581	0.13571	0.42107
	0.8	132.63476	0.18768	0.46576
	1.0	116.94271	0.29323	0.57783
	1.2	149.13235	0.43557	0.66270
	2.0	275.18341	1.56714	1.60971
	5.0	1685.17020	12.79160	10.71831
	10.0	7972.21979	55.63099	43.76078
$\alpha = 0$, $\sigma = 0.1$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 1$				

Fortsetzung, Tabelle 3.8

β	x_0	MSE $\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_u$
0.5	0.0	0.06031	0.04811	0.05553
	0.2	0.05350	0.04276	0.04983
	0.4	0.04966	0.03959	0.04654
	0.6	0.05097	0.04095	0.04788
	0.8	0.05513	0.04362	0.05113
	1.0	0.05946	0.04727	0.05464
	1.2	0.07083	0.05560	0.06400
	2.0	0.13052	0.10248	0.11207
	5.0	0.76770	0.59456	0.62534
	10.0	3.19210	2.52684	2.56970
1.0	0.0	0.01393	0.01325	0.01370
	0.2	0.01266	0.01201	0.01247
	0.4	0.01198	0.01137	0.01182
	0.6	0.01161	0.01099	0.01144
	0.8	0.01262	0.01198	0.01243
	1.0	0.01354	0.01282	0.01330
	1.2	0.01541	0.01463	0.01509
	2.0	0.02733	0.02603	0.02651
	5.0	0.15426	0.14675	0.14806
	10.0	0.65105	0.61482	0.62217

$\alpha = 0,\ \sigma = 0.1,\ x = (0, 0, 0, 1, 1, 1),\ m = 1$

aus Turiel/Hahn/Tucker [36], p. 688-689, Table I

Insgesamt kommen Turiel, Hahn und Tucker zu dem Ergebnis, daß innerhalb des Kalibrationsbereichs der inverse Schätzer allgemein den geringsten MSE hatte. Bei Extrapolation war der inverse Schätzer häufig der Beste, wobei der Naszódi-Schätzer vor allem bei großen n besser war.

3.1.7 Die Studie von Dahiya und McKeon

.

Dahiya und McKeon [6] stellen vergleichende Untersuchungen über den klassischen Schätzer, den Halperin-Schätzer mit $M = m\frac{n-2}{n}$, den Naszódi-Schätzer und einen Vergleichswert an. Der Vergleichsschätzer entspricht dem klassischen Schätzer, wobei der wahre Parameter β zur Berechnung verwendet wird.

Die verwendeten Parameterwerte sind

$$\beta = 1, \sigma^2 = 1, \sigma_x^2 = 1, \bar{x} = 0 = \alpha.$$

Für jede Wertekombination von m, n und x_0 wurden 500 Versuche simuliert.

Tabelle 3.9: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_H$ und $\hat{X}_u$

			Bias				MSE			
n	m	x_0	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_\beta$	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_\beta$
20	1	0	0.00	0.00	0.01	0.00	1.25	6.27	1.07	1.08
		1	0.03	-0.51	-0.03	-0.04	1.43	0.55	1.21	1.09
		2	0.16	-0.99	0.02	0.02	2.04	1.30	1.53	1.15
		4	0.23	-2.05	-0.06	-0.06	2.65	4.59	1.79	1.01
		10	0.53	-5.00	-0.13	-0.03	9.07	25.97	5.82	1.09
	5	0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.20	0.28	0.27
		1	0.05	-0.17	-0.02	-0.01	0.40	0.22	0.30	0.25
		2	0.15	-0.29	0.01	0.02	0.63	0.34	0.46	0.25
		4	0.22	-0.64	-0.05	0.01	1.60	0.35	1.01	0.23
		10	0.47	-1.64	-0.17	0.00	8.03	4.74	5.20	0.27
40	1	0	0.07	0.03	0.07	0.06	1.02	0.24	0.96	0.92
		1	0.10	-0.48	0.06	0.04	1.09	0.47	1.01	0.93
		2	0.11	-1.00	0.04	0.03	1.28	1.25	1.17	1.00
		4	0.15	-1.98	0.03	0.03	1.94	4.21	1.69	1.03
		10	0.31	-4.99	0.03	-0.03	3.75	25.51	3.20	1.05
	5	0	0.01	0.01	0.01	0.01	0.28	0.18	0.26	0.25
		1	0.06	-0.14	0.03	0.02	0.27	0.18	0.25	0.22
		2	0.02	-0.34	-0.03	-0.01	0.34	0.31	0.31	0.21
		4	0.13	-0.63	0.02	0.00	0.89	0.76	0.75	0.25
		10	0.17	-1.63	-0.10	0.03	2.88	3.62	2.40	0.22
$\beta = 1,\ \alpha = 0,\ \sigma^2 = 1,\ \sigma_x^2 = 1,\ \bar{x} = 0$										

nach Dahiya/McKeon [6], p. 53, Table 1

Die gleiche Arbeit enthält auch einen Vergleich dieser Schätzer nach dem Kriterium der Pitman-Genauigkeit. In Abschnitt 3.2.5 finden sich die Ergebnisse dieses Vergleichs.

3.2 Vergleich der Pitman-Genauigkeit

3.2.1 Definition der Pitman-Genauigkeit

Da der klassische Schätzer keine endlichen Momente besitzt und damit auch der MSE dieses Schätzers unendlich ist, eignet sich der MSE-Vergleich streng genommen nicht zum Vergleich dieses Schätzers mit anderen. Kritiker des inversen Schätzers haben früh dieses Argument angeführt, um Krutchkoffs Ergebnisse zu entkräften. E.J. Williams schreibt zum Beispiel ([37], P. 190):

> Thus it may be concluded, without any computer simulation experiments, that from the MSD point of view, the inverse estimator is better than the conventional estimator. However, this conclusion is not very satisfying, since to show that the MSD of an estimator is less than infinity is not proving very much.

Um diesem Problem zu begegnen, schlägt M. Halperin erstmals im Zusammenhang mit den Kalibrationsschätzern die Pitman-Genauigkeit oder „Pitman-Closeness" als Vergleichskriterium vor.

Der Begriff der „Closeness" wurde bereits 1937 von E.J.G. Pitman definiert [26]. Liegen zwei Schätzer X_1 und X_2 für einen Parameter θ vor, so heißt derjenige Schätzer genauer, der mit einer höheren Wahrscheinlichkeit einen geringeren absoluten Abstand vom wahren Parameter hat als der andere.

Definition 3.1 *Sind X_1 und X_2 Schätzer des Parameters $\theta \in \Theta$ und gilt:*

$$P\Big[|X_1 - \theta| < |X_2 - \theta|\Big] > \frac{1}{2} \quad \forall\, \theta \in \Theta, \tag{3.1}$$

so heißt X_1 genauer *als X_2.*

$$PC_\theta(X_1, X_2) := P\Big[|X_1 - \theta| < |X_2 - \theta|\Big] \tag{3.2}$$

heißt Pitman-Genauigkeit*, kurz PC (für Pitman-Closeness), des Schätzers X_1 im Vergleich zu Schätzer X_2 bezüglich des wahren Parameters θ.*

Falls $PC_\theta(X_1, X_2) > 1/2\ \forall\ \theta$, so heißt X_1 genauer *als X_2 und falls $PC_\theta(X_2, X_1) > 1/2\ \forall\ \theta$, so heißt X_2* genauer *als X_1.*

Ein „genauester" Schätzer, falls ein solcher existiert, wäre ein Schätzer, der genauer als jeder andere Schätzer ist.

Ein Vorteil der PC als Vergleichskriterium liegt darin, daß der PC-Wert einen guten Anhaltspunkt bietet, wie stark der Vorteil eines Schätzers gegenüber dem anderen ist. Ein Wert von $PC_\theta(X_1, X_2) = 0.9$ spricht für einen deutlichen Vorteil von X_1, da dieser Schätzer in 90% der Fälle näher an θ liegen wird als X_2. Im Gegensatz zum MSE liefert die PC jedoch keine Information über die Größenordnung der Abweichung vom wahren Parameter.

Ein Nachteil der Pitman-Genauigkeit liegt darin, daß die Eigenschaft nicht transitiv ist, daß also ein Vergleich von mehr als zwei Schätzern kein eindeutiges Ergebnis haben muß.

Eine Erweiterung der Pitman-Genauigkeit, die dieses Problem umgeht, ist die simultane Pitman-Genauigkeit:

Definition 3.2 *Sind $X_1, \ldots, X_k$ Schätzer des Parameters $\theta \in \Theta$, so bezeichnet*

$$PC_\theta(X_i) := P\Big[|X_i - \theta| < \min_{j=1,\ldots,k} |X_j - \theta|\Big] \tag{3.3}$$

die simultane Pitman-Genauigkeit *des Schätzers X_i im Vergleich zu den Schätzern $X_j, j \neq i$ bezüglich des wahren Parameters θ.*

Ein Schätzer X_i heißt genauer *gemäß der simultanen PC als ein Schätzer X_j, wenn seine simultane PC größer ist.*

Zu beachten ist hierbei, daß ein simultaner Vergleich mehrerer Schätzer anhand der simultanen PC und ein paarweiser Vergleich derselben Schätzer anhand der normalen PC durchaus nicht zu demselben Ergebnis führen müssen.

Neben der Intransitivität liegt ein weiterer Nachteil der PC darin, daß zur theoretischen Bestimmung der PC die gemeinsame Verteilung der Schätzer bekannt sein muß. Selbst wenn diese bekannt ist, ist die Bestimmung der PC wohl auch nur mit erheblichem mathematischen Aufwand möglich. Das Hilfsmittel der Computersimulation ist für den Vergleich der PC von komplexen Schätzern also sicherlich unerläßlich.

Der Vorteil der Pitman-Genauigkeit als Vergleichskriterium für die Kalibrationsschätzer liegt darin, daß sie nicht auf den Momenten der Schätzer basiert. Das Kriterium läßt sich also ohne Probleme oder die Notwendigkeit einer Stutzung auch auf den klassischen Schätzer anwenden.

Eine ausführliche Untersuchung der Kalibrationsschätzer anhand der Pitman-Genauigkeit findet sich in der Diplomarbeit von C.A. Ramsay [27], die dem Fachbereich Statistik im Jahre 1994 vorgelegt wurde (s. Abschnitt 3.2.6).

3.2.2 Halperins Studie

M. Halperin [10] verwendet als erster die Pitman-Genauigkeit als Kriterium zum Vergleich von Kalibrationsschätzern. Er formuliert seinen verallgemeinerten inversen Schätzer (s. Abschnitt 2.5) als

$$\hat{X}_H := (1 - R_M)\bar{x} + R_M \hat{X}_C, \tag{3.4}$$

wobei

$$R_M := \frac{b^2 S_{xx}}{\frac{1}{M} S_{y\hat{y}} + b^2 S_{xx}}, \tag{3.5}$$

und betrachtet die asymptotische Pitman-Genauigkeit von $\hat{X}_H$ im Vergleich zu $\hat{X}_C$. Diese ergibt sich als

$$\lim_{n\to\infty} PC_{x_0}(\hat{X}_H, \hat{X}_C) = \Phi(-|\rho\delta|\sqrt{m}) + \Phi\left(-|\rho\delta|\frac{\sqrt{m}}{1 + 2M\rho^2\sigma_x^2}\right), \tag{3.6}$$

wobei $\rho = \beta/\sigma$ und $\delta = \bar{x} - x_0$. Φ bezeichnet die Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung.

Es fällt auf, daß dieser Grenzert monoton fallend in $|\delta|$ ist, und für $\delta = 0$ gilt: $PC_{x_0}(\hat{X}_H, \hat{X}_C) = 1$, und für $|\delta| \to \infty$ gilt: $PC_{x_0}(\hat{X}_H, \hat{X}_C) = 0$.

Halperin untersucht nun den Fall $M = m$, und mit

$$|\delta| = r\sigma_x \tag{3.7}$$

und

$$\Delta := \sqrt{m}|\rho|\sigma_x \tag{3.8}$$

ergibt sich

$$\lim_{n\to\infty} PC_{x_0}(\hat{X}_H, \hat{X}_C) = \Phi(-r\Delta) + \Phi\left(\frac{-r\Delta}{1 + 2\Delta^2}\right). \tag{3.9}$$

Weiter untersucht Halperin das Problem, indem er in Abhängigkeit von Δ den Wert von $PC_{\bar{x}\pm 2.5\sigma_x}(\hat{X}_H, \hat{X}_C)$ schätzt. Der Wert 2.5 ist hierbei recht willkürlich gewählt mit der Maßgabe, daß ein Intervall der Breite $5\sigma_x$ den Kalibrationsbereich abdeckt.

Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse.

Tabelle 3.10: $PC_{\bar{x}\pm 2.5\sigma_x}(\hat{X}_H, \hat{X}_C)$ in Abhängigkeit von Δ nach Halperin

Δ	$PC_{\bar{x}\pm 2.5\sigma_x}(\hat{X}_H,\hat{X}_C)$	Δ	$PC_{\bar{x}\pm 2.5\sigma_x}(\hat{X}_H,\hat{X}_C)$	Δ	$PC_{\bar{x}\pm 2.5\sigma_x}(\hat{X}_H,\hat{X}_C)$
0.01	0.980	0.40	0.383	4.0	0.381
0.05	0.901	0.50	0.308	5.0	0.403
0.10	0.804	1.00	0.209	6.0	0.419
0.15	0.714	1.50	0.248	7.0	0.430
0.20	0.630	2.0	0.289	8.0	0.438
0.25	0.555	2.5	0.322	9.0	0.445
0.29	0.502	3.0	0.347	10.0	0.451
0.30	0.489	3.5	0.366	15.0	0.467

nach Halperin [10], p. 733, Table I

Als zweite numerische Berechnung untersucht Halperin den Wert $r = r(0.5)$, wiederum in Abhängigkeit von Δ. Dieser Wert bezeichnet gerade die Stelle, an der $PC_{x_0}(\hat{X}_H, \hat{X}_C)$ den Betrag 0.5 annimmt. Für x_0 innerhalb des Intervalls $[\bar{x} - r(0.5)\sigma_x, \bar{x} + r(0.5)\sigma_x]$ ist die PC größer als 0.5, außerhalb ist sie kleiner.

Tabelle 3.11: $r(0.5)$ in Abhängigkeit von Δ nach Halperin

Δ	$r(0.5)$	Δ	$r(0.5)$	Δ	$r(0.5)$
0.01	67.44	1.000	1.08	5.000	0.43
0.05	13.61	1.500	0.88	6.003	0.37
0.101	6.82	2.006	0.75	7.002	0.34
0.151	4.56	2.500	0.66	8.006	0.30
0.198	3.53	3.005	0.59	9.005	0.28
0.302	2.42	3.501	0.54	10.006	0.26
0.401	1.92	4.000	0.49	—	—
0.502	1.63	4.501	0.46	—	—

nach Halperin [10], p. 735, Table II

Aufgrund dieser Ergebnisse und der Annahmen, daß in der Praxis fast immer $m = 1$ und folglich $\Delta = |\beta|\sigma_x/\sigma$ gilt, im allgemeinen σ_x/σ wesentlich größer als eins ist und β recht groß sein sollte, um überhaupt einen linearen Zusammenhang nahezulegen, schließt Halperin, daß in der Praxis das Intervall $[\bar{x} - r(0.5)\sigma_x, \bar{x} + r(0.5)\sigma_x]$, in dem der inverse Schätzer dem klassischen überlegen ist, eher sehr klein sein wird.

3.2.3 Krutchkoffs Studie

Krutchkoff gibt in einer weiteren Arbeit [17] eine direkte Antwort auf Halperins Ergebnisse und greift das Kriterium der Pitman-Genauigkeit in einer eigenen Simulation auf. Sein Hauptkritikpunkt an Halperins Arbeit ist die Wahl des Parameters $r = 2.5$ und die Begründung hierfür. Krutchkoff weist darauf hin, daß beim optimalen Endpunktdesign bereits $\bar{x} \pm \sigma_x$ den Kalibrationsbereich überdeckt. Selbst beim äquidistanten Design überdeckt schon $\bar{x} \pm 2\sigma_x$ mehr als den Kalibrationsbereich.

Krutchkoff präsentiert die Ergebnise einer weiteren Simulationsstudie, in der er die Pitman-Genauigkeit $PC(\hat{X}_I, \hat{X}_C)$ des inversen Schätzers gegenüber dem klassischen betrachtet. Die Parameter des Experiments orientieren sich auch hier an der „Standardsituation“ aus Krutchkoffs erster Arbeit [13].

Der Achsenabschnitt α beträgt in allen Versuchen null. Der Steigungsparameter β nimmt die Werte 0.002, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.058, 0.06, 0.08, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0 und 3.0 an. Im ersten Schritt werden die Fälle $n = 6$, $n = 20$ und $n = 100$ jeweils im Endunktdesign betrachtet. Im zweiten Schritt werden bei vorgegebenem x_0 von 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.2, 1.5, 1.75 und 2.0 Schätzungen vorgenommen. Der Punkt $x_0 = 1.75$ wird als direkter Vergleichswert zu Halperins Ergebnissen verwendet, da unter den gegebenen Versuchsbedingungen mit $\bar{x} = 0.5$ und $\sigma_x = 0.5$ gerade $\bar{x} + 2.5\sigma_x = 1.75$ gilt.

Die folgende Tabelle zeigt einige Ergebnisse für $n = 6$ und den Vergleich mit $PC_{\bar{x}\pm 2.5\sigma_x}(\hat{X}_H, \hat{X}_C)$ nach Halperin.

Tabelle 3.12: Vergleich von $\hat{X}_C$ und $\hat{X}_I$ nach PC

		$PC_{x_0}(\hat{X}_I, \hat{X}_C)$ für $x_0 =$							
β	Δ	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1,0	1.75	H
0.002	0.01	1.000	0.962	0.930	0.898	0.862	0.833	0.672	0.980
0.01	0.05	1.000	0.962	0.925	0.892	0.861	0.824	0.671	0.901
0.02	0.10	1.000	0.962	0.924	0.891	0.858	0.823	0.661	0.804
0.03	0.15	1.000	0.961	0.926	0.884	0.848	0.818	0.651	0.714
0.04	0.20	1.000	0.959	0.924	0.879	0.841	0.812	0.628	0.630
0.05	0.25	1.000	0.958	0.917	0.883	0.839	0.806	0.615	0.555
0.058	0.29	1.000	0.956	0.914	0.878	0.826	0.792	0.591	0.502
0.06	0.30	1.000	0.952	0.904	0.872	0.831	0.792	0.576	0.489
0.08	0.40	1.000	0.948	0.900	0.856	0.807	0.766	0.515	0.383
0.1	0.50	1.000	0.949	0.886	0.839	0.792	0.740	0.488	0.308
0.2	1.0	1.000	0.908	0.831	0.745	0.666	0.602	0.368	0.209
0.3	1.5	1.000	0.880	0.767	0.664	0.586	0.519	0.381	0.248
0.4	2.0	1.000	0.841	0.706	0.602	0.587	0.473	0.397	0.289
0.5	2.5	1.000	0.814	0.665	0.548	0.498	0.465	0.413	0.322
0.6	3.0	1.000	0.784	0.619	0.526	0.489	0.459	0.427	0.347
0.7	3.5	1.000	0.758	0.578	0.505	0.480	0.461	0.432	0.366
0.8	4.0	1.000	0.727	0.555	0.497	0.480	0.477	0.446	0.381
1.0	5.0	1.000	0.678	0.535	0.501	0.487	0.477	0.456	0.403
1.2	6.0	1.000	0.627	0.509	0.485	0.485	0.482	0.458	0.419
1.4	7.0	1.000	0.595	0.499	0.484	0.494	0.484	0.466	0.430
1.6	8.0	1.000	0.569	0.495	0.498	0.494	0.493	0.483	0.438
1.8	9.0	1.000	0.544	0.500	0.493	0.489	0.489	0.478	0.445
2.0	10.0	1.000	0.534	0.487	0.490	0.487	0.492	0.473	0.451
3.0	15.0	1.000	0.504	0.497	0.500	0.487	0.486	0.485	0.467
$\alpha = 0,\ \sigma^2 = 0.1,\ x = (0,0,0,1,1,1)$									

aus Krutchkoff [17], p. 92, Table I

Krutchkoff weist darauf hin, daß der inverse Schätzer in einem Großteil der Fälle überlegen ist, und daß die Überlegenheit des klassischen Schätzers – wo vorhanden – nicht sehr deutlich ist. Die geringsten PC-Werte, die für ein x_0 innerhalb des Kalibrationsbereiches auftreten, sind 0.459 bei $n = 6$ und 0.435 bei $n = 100$.

3.2.4 Die Studie von Turiel, Hahn und Tucker

Wie bereits in Abschnitt 3.1.6 erwähnt, beschreiben Turiel, Hahn und Tucker auch einen Vergleich der Pitman-Genauigkeiten. Es handelt sich hierbei um paarweise Vergleiche des klassischen, inversen und Naszodi-Schätzers.

Wie bereits beim MSE-Vergleich wurden 10000 Messungen für jede Parameterkombination bei $n = 6$ und $n = 100$ im Endpunktdesign simuliert. Die Fehlerterme haben eine Standardabweichung von $\sigma = 0.1$. Bei $\alpha = 0$ werden Experimente für die Steigungsparameter $\beta = 0.05$, 0.1, 0.2, 0.5, 0.75, 1.0, 2.0, 5.0 und 10.0 durchgeführt.

Im zweiten Schritt des Experiments werden Schätzungen für die Werte $x_0 =$ 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 2.0, 5.0 und 10.0 vorgenommen.

Aus den jeweils 10000 simulierten Messungen wurden relative Häufigkeiten berechnet, die den Pitman-Wahrscheinlichkeiten $PC_{x_0}(\hat{X}_I, \hat{X}_C)$, $PC_{x_0}(\hat{X}_u, \hat{X}_I)$ sowie $PC_{x_0}(\hat{X}_u, \hat{X}_C)$ entsprechen.

Die folgende Tabelle zeigt eine Auswahl der Ergebnisse.

Tabelle 3.13: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$ und $\hat{X}_u$

		PC		
β	x_0	$(\hat{X}_I, \hat{X}_C)$	$(\hat{X}_u, \hat{X}_I)$	$(\hat{X}_u, \hat{X}_C)$
0.1	0.0	0.7353	0.4255	0.7743
	0.2	0.8383	0.2847	0.8622
	0.4	0.9438	0.1186	0.9526
	0.6	0.9424	0.1238	0.9509
	0.8	0.8392	0.2883	0.8642
	1.0	0.7356	0.4208	0.7713
	1.2	0.6473	0.5323	0.6937
	2.0	0.4268	0.7589	0.4908
	5.0	0.3151	0.8675	0.3901
	10.0	0.3050	0.8796	0.3779
0.5	0.0	0.4797	0.5343	0.5101
	0.2	0.5547	0.4532	0.5741
	0.4	0.8085	0.1948	0.8156
	0.6	0.8150	0.1875	0.8218
	0.8	0.5525	0.4556	0.5704
	1.0	0.5685	0.5434	0.5016
	1.2	0.4467	0.5712	0.4855
	2.0	0.4035	0.6254	0.4704
	5.0	0.3795	0.6559	0.4678
	10.0	0.3769	0.6590	0.4673
$\alpha = 0$, $\sigma = 0.1$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 1$				

Fortsetzung, Tabelle 3.13

		PC		
β	x_0	$(\hat{X}_I, \hat{X}_C)$	$(\hat{X}_u, \hat{X}_I)$	$(\hat{X}_u, \hat{X}_C)$
1.0	0.0	0.4760	0.5290	0.4921
	0.2	0.4911	0.5125	0.5017
	0.4	0.6756	0.3253	0.6793
	0.6	0.6753	0.3255	0.6792
	0.8	0.4831	0.5205	0.4933
	1.0	0.4787	0.5272	0.4970
	1.2	0.4757	0.5317	0.4998
	2.0	0.4513	0.5618	0.4868
	5.0	0.4350	0.5796	0.4787
	10.0	0.4361	0.5822	0.4839
$\alpha = 0,\ \sigma = 0.1,\ x = (0,0,0,1,1,1),\ m = 1$				

aus Turiel/Hahn/Tucker [36], p. 690-691, Table II

Insgesamt ergab die Studie, daß innerhalb des Kalibrationsbereichs der inverse Schätzer allgemein die höchste Pitman-Genauigkeit hat, und daß bei Extrapolation der klassische und der Naszódi-Schätzer besser sind.

3.2.5 Die Studie von Dahiya und McKeon

Wie bereits in Abschnitt 3.1.7 beschrieben, vergleichen Dahiya und McKeon [6] den klassischen Schätzer, den Halperin-Schätzer, den Naszódi-Schätzer und den Vergleichsschätzer $\hat{X}_\beta$.

Die verwendeten Parameterwerte sind:

$$\beta = 1, \sigma^2 = 1, \sigma_x^2 = 1, \bar{x} = 0 = \alpha.$$

Für jede Wertekombination von m, n und X wurden 500 Versuche simuliert.

Um einen simultanen Vergleich der fünf Schätzer zu ermöglichen, betrachten Dahiya und McKeon die Summe der Wahrscheinlichkeiten eines Schätzers, im Vergleich mit den anderen schlechter abzuschneiden. Zusätzlich geht ein Vergleich mit einem fünften Schätzer in den Vergleichswert ein, den Dahiya und McKeon jedoch nicht explizit benennen.

Damit ergibt sich zum Beispiel der Vergleichswert des klassischen Schätzers als

$$PC_\Sigma(\hat{X}_C) = PC_{x_0}(\hat{X}_I, \hat{X}_C) + PC_{x_0}(\hat{X}_H, \hat{X}_C) + PC_{x_0}(\hat{X}_u, \hat{X}_C) + PC_{x_0}(\hat{X}_?, \hat{X}_C). \tag{3.10}$$

Je kleiner also der Vergleichswert ist, desto besser ist der Schätzer.

Tabelle 3.14: Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_H$ und $\hat{X}_u$

			PC_Σ			
n	m	x_0	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_\beta$
20	1	0	3.47	0.00	2.39	3.13
		1	2.32	1.97	1.90	2.00
		2	1.91	2.74	1.81	1.53
		4	1.68	3.49	1.42	1.16
		10	1.82	3.78	1.91	0.69
	5	0	3.53	0.13	2.45	2.70
		1	2.00	2.23	1.89	1.69
		2	2.05	2.46	1.71	1.36
		4	2.08	2.74	2.15	0.95
		10	2.07	3.03	2.25	0.54
40	1	0	3.55	0.00	2.47	2.98
		1	2.27	2.09	1.92	1.97
		2	1.77	2.94	1.71	1.55
		4	1.58	3.48	1.61	1.31
		10	1.70	3.90	1.72	1.01
	5	0	3.47	0.06	2.42	2.95
		1	2.06	2.16	2.00	1.71
		2	1.93	2.64	1.84	1.40
		4	1.96	2.85	2.06	1.10
		10	2.07	3.12	2.10	0.63

$\beta = 1,\ \alpha = 0,\ \sigma^2 = 1,\ \sigma_x^2 = 1,\ \bar{x} = 0$

aus Dahiya/McKeon [6], p. 53, Table 1

3.2.6 Ergebnisse einer früheren Diplomarbeit

In einer dem Fachbereich Statistik der Universität Dortmund im Jahre 1994 vorgelegten Diplomarbeit [27] beschreibt C. A. Ramsay eine umfangreiche Simulationsstudie zum Vergleich der Pitman-Genauigkeiten verschiedener Kalibrationsschätzer. Neben zahlreichen paarweisen Vergleichen der Schätzer zieht Ramsay auch die simultane PC als Vergleichskriterium heran.

Neben dem klassischen und dem inversen Schätzer untersucht Ramsay auch die Schätzer von Naszódi, Halperin (mit $M = m(n-2)/n$), Ali und Singh, Srivastava und Singh sowie Hagwood (mit $\hat{\lambda}_{cv}$). Er betrachtet die „Standardsituation" aus der ursprünglichen Studie von Krutchkoff sowie einige abweichende Situationen.

Bei jedem der Vergleiche wurden für jede Einstellung der Versuchsparameter 10000 Messungen simuliert, aus denen dann relative Häufigkeiten, die den Pitman-Wahrscheinlichkeiten entsprechen, berechnet wurden.

Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse des simultanen Vergleichs aller untersuchten Schätzer in der „Standardsituation" ($\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 1$).

Tabelle 3.15: Simultaner Vergleich von $\hat{X}_C$, $\hat{X}_I$, $\hat{X}_u$, $\hat{X}_H$, $\hat{X}_a$, $\hat{X}_{au}$ und $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$

	MSE						
x_0	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$
0.5	0	0	0	0.014	0.986	0	0
0.6	0.1759	0.0128	0.0074	0.085	0.5407	0.0032	0.175
0.7	0.3228	0.0305	0.015	0.1317	0.3619	0.0057	0.1324
0.8	0.4223	0.0381	0.0218	0.2224	0.2727	0.007	0.0157
0.9	0.484	0.0357	0.0265	0.2754	0.1558	0.0092	0.0134
1.0	0.498	0.0349	0.0273	0.3875	0.011	0.012	0.0703
1.1	0.5054	0.0418	0.0206	0.3636	0.0176	0.0147	0.0363
1.2	0.5043	0.0455	0.015	0.3523	0.0319	0.0175	0.0335
1.3	0.5137	0.0565	0.0099	0.3357	0.0415	0.0192	0.0235
1.4	0.5117	0.0745	0.0073	0.3199	0.0479	0.0227	0.016
1.5	0.517	0.083	0.014	0.3111	0.0535	0.0206	0.0008
1.75	0.5037	0.1072	0.0666	0.2905	0.0034	0.0072	0.0214
2.0	0.5043	0.1088	0.0767	0.2724	0.0101	0.01	0.0177
5.0	0.4947	0.1265	0.0954	0.2188	0.0276	0.033	0.004
10.0	0.4952	0.1311	0.099	0.2076	0.0294	0.0356	0.0021
$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ \beta = 0.5,\ x = (0,0,0,1,1,1),\ m = 1$							

nach: Ramsay [27], p. 109f, Tabelle C.5

Insgesamt kommt Ramsay durch seine Untersuchungen zu dem Schluß, daß innerhalb des Kalibrationsbereiches der Ali-Singh-Schätzer deutliche Vorteile aufweist, während bei Extrapolation der klassische Schätzer die besten Ergebnisse erzielt.

3.3 Zusammenfassung

In den unterschiedlichen Veröffentlichungen werden verschiedene Vergleichskriterien verwendet und die betrachteten Modelle sind unterschiedlich. Daher fällt es schwer, aus der Vielzahl der bisher veröffentlichten Ergebnisse ein einheitliches Resumé zu ziehen. Auch liegen nicht für alle in Abschnitt 2 vorgestellten Schätzer Ergebnisse vor.

Die meisten der vorliegenden Studien stellen einen deutlichen Unterschied zwischen dem Verhalten der Schätzer innerhalb des Kalibrationsbereichs und dem Verhalten bei Extrapolation fest. Krutchkoff und Berkson stellen beim Vergleich von klassischem und inversem Schätzer fest, daß $\hat{X}_I$ bei kleinen m innerhalb des Kalibrationsbereichs besser ist, bei großen m oder bei Extrapolation jedoch $\hat{X}_C$ bessere Ergebnisse liefert. Turiel, Hahn und Tucker empfehlen in ihrer Zusammenfassung den inversen Schätzer für Interpolation und den Naszódi-Schätzer für Extrapolation. Die Ergebnisse von Ali und Singh und die Arbeit von Ramsay zeigen, daß innerhalb des Kalibrationsbereichs auch der Ali-Singh-Schätzer gute Resultate erzielt.

Es liegen jedoch fast keine Studien vor, in denen eine größere Anzahl der vorgeschlagenen Schätzer unter einheitlichen Bedingungen untersucht wird. Das folgende Kapitel beschreibt als Hauptgegenstand dieser Arbeit eine Simulationsstudie, die einen solchen Vergleich bieten soll.

Kapitel 4

Die Simulationsstudie

In diesem Kapitel wird die dieser Arbeit zugrundeliegende Simulationsstudie beschrieben. Nach einer Beschreibung der Versuchsbedingungen werden Ergebnisse von Vergleichen der neun Schätzer unter verschiedenen Bedingungen dargestellt.

4.1 Beschreibung der Programmierumgebung

Ziel dieser Arbeit ist der Vergleich der mittleren quadratischen Fehler der verschiedenen Schätzer anhand einer Computersimulation. Zu diesem Zweck wurden in der Matrixsprache IML des Programmiersystems „Statistical Analysis System“ (SAS) verschiedene Simulationsprogramme verfaßt.

Aus einem vorgegebenem Designvektor $x = (x_1, \ldots, x_n)$ erzeugt ein solches Programm gemäß der Spezifikation des linearen Modells

$$Y = \alpha + \beta X + \varepsilon \tag{4.1}$$

die Datenpaare (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, für die entsprechend $y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$ gilt. Die Parameter α und β werden hierbei voreingestellt, die Fehlerterme ε_i werden durch eine SAS-Funktion für normalverteilte Pseudozufallszahlen erzeugt. Desweiteren werden anhand eines voreingestellten „wahren“ Wertes für x_0 die „gemessenen“ Werte $y_{01}, \ldots, y_{0m}$ auf die gleiche Weise erzeugt. Anhand der so erzeugten n Datenpaare und der m weiteren Werte werden dann die Schätzungen für x_0 gemäß der Konstruktion der betrachteten Schätzer berechnet. Für jeden Schätzer wird die quadratische Abweichung vom voreingestellten x_0 ermittelt und gespeichert.

Diese gesamte Prozedur wird wiederholt, bis eine vorgegebene Anzahl von Durchgängen erreicht ist. Dann wird für jedes Schätzverfahren der Mittelwert der quadratischen Abweichungen errechnet und ausgegeben.

Die Simulationsprogramme für die verschiedenen Experimente der Studie unterscheiden sich lediglich in Art und Anzahl der voreingestellten Versuchsparameter. Ein Beispiel eines solchen Simulationsprogramms findet sich in Anhang A. Die Simulationsprogramme wurden unter der SAS-Version 6.09 auf einer Sun 20 Workstation ausgeführt.

Zur besseren Vergleichbarkeit sind die Versuchsbedingungen an die der Studie von Krutchkoff angelehnt, die auch von anderen Autoren aufgegriffen wurden.Bei den Experimenten der Studie wurde jeweils einer oder zwei der Versuchsparameter variiert, während die übrigen bei Werten aus Krutchkoffs „Standardsituation“ belassen wurden.

Die Versuchsparameter aus Krutchkoffs Studie sind:

$$
\begin{aligned}
\alpha &= 0.0, \\
\beta &= 0.5, \\
\sigma &= 0.1, \\
n &= 6, \\
x &= (0,0,0,1,1,1), \\
m &= 1, \\
\text{Wiederholungen} &: 10000.
\end{aligned}
$$

Die einzige Abweichung von Krutchkoffs Versuchsbedingungen, die fast durchgehend in dieser Arbeit zum Tragen kommt, ist der Wert $m = 3$. Dieser wurde gewählt, da der Aitchison-Dunsmore-Schätzer bei $m = 1$ mit dem inversen Schätzer identisch und eine Betrachtung dieses Schätzers dann nicht sinnvoll ist.

Diese Studie betrachtet die folgenden Fragestellungen:

- Einfluß des Achsenabschnitts (s. Abschnitt 4.2),
- Einfluß des Designs (s. Abschnitt 4.3),
- Einfluß der Steigung (s. Abschnitt 4.4),
- Verhalten der Schätzer bei Extrapolation (s. Abschnitt 4.5),
- Asymptotik der Schätzer für $m \to \infty$ (s. Abschnitt 4.6),
- Asymptotik der Schätzer für $n \to \infty$ (s. Abschnitt 4.7).

Im Vorfeld dieser Simulationsexperimente waren jedoch noch einige allgemeine Überlegungen notwendig.

In den Studien von Krutchkoff und Turiel, Hahn und Tucker wird der Schätzer b einer Stutzung unterworfen. Beträgt die Parameterschätzung für β weniger als 0.001, so wird $b = 0.001$ gesetzt, und der klassische Schätzer wird aus diesem gestutzten b errechnet. Dieses Verfahren wird auch in dieser Arbeit verwendet. Weiterhin wird der Schätzer von Srivastava und Singh mit Hilfe des so errechneten klassischen Schätzers berechnet. Die Stutzung wird nur in vergleichsweise wenigen Fällen nötig. Falls Stutzungen aufgetreten sind, wird dies bei den folgenden Ergebnissen mit angegeben.

Nach wenigen Programmtests stellte sich heraus, daß der Schätzer von Lwin und Maritz nicht in allen Fällen berechnet werden kann. Für große Absolutbeträge von $(\bar{y}_0 - a - bx_i)/\hat{\sigma}$ wird der resultierende Wert der Normalverteilungsdichte kleiner, als es die Rechengenauigkeit der Simulationssoftware zuläßt. Das in der IML-Umgebung verwendete numerische Format erlaubt keine Verarbeitung von Zahlen, deren Absolutbetrag kleiner als ca. 10^{-308} ist. Rechenoperationen, deren Ergebnis betraglich kleiner wäre, ergeben den Wert null. Ist nun

$$\left| \phi \left(\frac{\bar{y}_0 - a - bx_i}{\hat{\sigma}} \right) \right| \lesssim 10^{-308} \tag{4.2}$$

für alle i, so ergeben die Berechnungen für Zähler und Nenner des Lwin/Maritz-Schätzers null. Dies führt wegen der versuchten Division durch null zu einem Programmfehler. Um diesem Umstand zu begegnen, wird der Nenner des Schätzers in den fraglichen Fällen auf 10^{-307} gesetzt. Diese Vorgehensweise beeinträchtigt den MSE zuweilen sehr stark. Für einige Parameterkonstellationen sind die Ergebnisse völlig unbrauchbar, da bei allen Simulationsdurchgängen nicht berechenbare Terme auftreten. Bei den folgenden Ergebnissen werden – falls dieses Problem auftrat – die Häufigkeiten der nicht berechenbaren $\hat{X}_n$ mit angegeben.

Es liegen zwei Varianten des Ali-Singh-Schätzers vor. In der Praxis muß zur Berechnung von $\hat{X}_a$ der unbekannte Wert von x_0 geeignet geschätzt werden, um dann die Schätzung durch Iteration zu verbessern. Ali und Singh schlagen sowohl $\hat{X}_C$ als auch $\hat{X}_I$ als Ausgangsschätzung vor (s. Abschnitt 2.3).

Auch für den Hagwood-Schätzer liegen zwei Berechnungsmöglichkeiten vor. Der optimale Wert des Parameters λ^* enthält die unbekannten Größen σ^2 und x^2. Hagwood schlägt zur Berechnung von $\hat{X}_{\lambda^*}$ in der Praxis die beiden Schätzungen $\hat{\lambda}^*$ und $\hat{\lambda}_{cv}$ vor (s. Abschnitt 2.8).

Um zu entscheiden, welche der genannten Möglichkeiten jeweils in dieser Arbeit zur Anwendung kommen soll, wurde vorab ein Vergleich der betreffenden Varianten vorgenommen. Hierbei wurden Versuchsbedingungen verwendet, die im

Wesentlichen an die Studie von Krutchkoff angelehnt sind. Die beiden Varianten des Ali-Singh-Schätzers wurden iteriert, bis die Abweichung zwischen zwei aufeinanderfolgenden Schätzungen geringer als 0.001 war. Für jede Kombination der Versuchsparameter wurden 10000 Durchläufe simuliert. Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse.

Tabelle 4.1: Vergleich von $\hat{X}_{a_C}$ und $\hat{X}_{a_I}$, sowie $\hat{X}_{\hat{\lambda}^*}$ und $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$

x_0	MSE($\hat{X}_{a_C}$)	MSE($\hat{X}_{a_I}$)	MSE($\hat{X}_{\hat{\lambda}^*}$)	MSE($\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$)
-10	3.886612	3.886612	3.8864274	2.8850638
-8	2.7131221	2.7131221	2.7128188	1.9243302
-6	1.4939336	1.4939336	1.4936717	1.1408697
-4	0.7545383	0.7545381	0.7542206	0.5582087
-2	0.2601634	0.2601636	0.2610068	0.2045515
0	0.1097863	0.1097675	0.1367395	0.049584
0.2	0.0731839	0.0731752	0.0538	0.0444543
0.4	0.0242487	0.0242461	0.0252305	0.0426419
0.6	0.024472	0.0244691	0.0366505	0.0426832
0.8	0.0732604	0.0732517	0.0475925	0.0446211
1	0.1096557	0.1096363	0.0573182	0.0487653
2	0.126005	0.1260111	0.1251509	0.0985642
4	0.4804727	0.4804723	0.4809235	0.3572446
6	1.1277031	1.127703	1.1280883	0.8292562
8	2.01072	2.01072	2.0109927	1.4971535
10	3.2066298	3.2066298	3.2068927	2.310853
$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ \beta = 0.5,\ x = (0,0,0,1,1,1),\ m = 1$				

Keine der beiden Varianten des Ali-Singh-Schätzers scheint auf einem Bereich überlegen zu sein, in der Tat sind die Differenzen der MSE sehr gering. Offensichtlich wird der Schätzer unabhängig vom Startwert durch das Iterationsverfahren gut stabilisiert. Ali und Singh benutzen im experimentellen Teil ihrer Arbeit $\hat{X}_I$ als Ausgangsschätzung, und im obigen Experiment ist diese Variante öfter leicht überlegen als die mit $\hat{X}_C$. Daher wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit der Ali-Singh-Schätzer mit $\hat{X}_I$ als Startwert berechnet werden.

Abgesehen von einem kleinen Bereich um $\bar{x}$ herum scheint die Variante des Hagwood-Schätzers, die auf $\hat{\lambda}_{cv}$ basiert, einen kleineren MSE zu haben als diejenige, die auf $\hat{\lambda}^*$ basiert. Daher wird im Folgenden diese Variante verwendet werden.

In den Tabellen der folgenden Abschnitte wurde für den MSE eine Rundung auf fünf Dezimalstellen gewählt. Hierdurch werden in Einzelfällen geringfügige

Unterschiede zwischen den Werten in den Tabellen nicht dokumentiert. Wo es sinnvoll erscheint, wird auf diese Unterschiede jedoch trotzdem im Text eingegangen.

4.2 Einfluß des Achsenabschnitts

Frühere Studien haben für die meisten Schätzer keinen Einfluß des Achsenabschnitts α feststellen können. Dennoch wurde der Vollständigkeit halber für diese Arbeit ein Experiment zu dieser Fragestellung durchgeführt.

Für das zu schätzende „wahre" x_0 wurden die Werte $x_0 = 0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ und 1.0 voreingestellt. Für jedes dieser x_0 wurden jeweils 10.000 Schätzungen für die Parameter $\alpha = -10, -5, -2, -1, 0, 1, 2, 5$ und 10 durchgeführt. Die anderen Parameter betrugen $n = 6$ (Endpunktdesign), $\sigma = 0.1$, $\beta = 0.5$ und $m = 3$.

Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse.

Tabelle 4.2: Einfluß des Achsenabschnitts α auf den MSE

	MSE								
α	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0$									
-10	0.03087	0.02470	0.08602	0.02526	0.02615	0.02795	0.02442	0.02514	0.00038
-5	0.03067	0.02389	0.08366	0.02453	0.02549	0.02745	0.02353	0.02439	0.00054
-2	0.03078	0.02433	0.08358	0.02495	0.02589	0.02777	0.02393	0.02482	0.00045
-1	0.03046	0.02454	0.08488	0.02505	0.02590	0.02762	0.02415	0.02494	0.00033
0	0.03085	0.02478	0.08530	0.02530	0.02617	0.02793	0.02443	0.02519	0.00043
1	0.03060	0.02397	0.08587	0.02449	0.02528	0.02704	0.02362	0.02434	0.00043
2	0.03099	0.02446	0.08548	0.02506	0.02598	0.02786	0.02401	0.02492	0.00049
5	0.03065	0.02405	0.08375	0.02468	0.02566	0.02758	0.02360	0.02456	0.00025
10	0.03053	0.02411	0.08366	0.02470	0.02559	0.02745	0.02387	0.02455	0.00054
$x_0 = 0.2$									
-10	0.02490	0.02000	0.06411	0.02084	0.02170	0.02305	0.01881	0.02072	0.04156
-5	0.02432	0.01966	0.06521	0.02044	0.02126	0.02255	0.01858	0.02033	0.03983
-2	0.02504	0.02004	0.06410	0.02089	0.02177	0.02314	0.01877	0.02077	0.04062
-1	0.02498	0.02002	0.06453	0.02087	0.02175	0.02312	0.01870	0.02075	0.04072
0	0.02487	0.01962	0.06476	0.02052	0.02143	0.02287	0.01835	0.02038	0.03984
1	0.02466	0.01982	0.06466	0.02062	0.02145	0.02277	0.01870	0.02050	0.03994
2	0.02582	0.02051	0.06496	0.02142	0.02234	0.02379	0.01918	0.02128	0.04133
5	0.02471	0.01978	0.06459	0.02061	0.02147	0.02283	0.01861	0.02049	0.04107
10	0.02515	0.02012	0.06446	0.02098	0.02187	0.02325	0.01892	0.02085	0.04120
$x_0 = 0.4$									
-10	0.02221	0.01781	0.01225	0.01880	0.01967	0.02083	0.01615	0.01868	0.13697
-5	0.02226	0.01776	0.01243	0.01877	0.01965	0.02084	0.01614	0.01864	0.13519
-2	0.02272	0.01808	0.01253	0.01912	0.02004	0.02126	0.01638	0.01899	0.13703
-1	0.02250	0.01790	0.01243	0.01894	0.01984	0.02105	0.01619	0.01880	0.13590
0	0.02171	0.01742	0.01240	0.01839	0.01923	0.02036	0.01581	0.01827	0.13360
1	0.02189	0.01744	0.01204	0.01844	0.01931	0.02049	0.01581	0.01831	0.13598
2	0.02208	0.01753	0.01224	0.01855	0.01943	0.02063	0.01584	0.01841	0.13350
5	0.02214	0.01759	0.01224	0.01861	0.01951	0.02071	0.01595	0.01848	0.13526
10	0.02256	0.01785	0.01213	0.01891	0.01983	0.02107	0.01622	0.01877	0.13620
$\sigma = 0.1, \beta = 0.5, x = (0,0,0,1,1,1), m = 3$									

Fortsetzung, Tabelle 4.2

	MSE								
α	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.5$									
-10	0.02195	0.01746	0.00256	0.01850	0.01940	0.02058	0.01580	0.01837	0.15765
-5	0.02253	0.01797	0.00299	0.01903	0.01994	0.02114	0.01619	0.01890	0.15720
-2	0.02197	0.01744	0.00273	0.01850	0.01939	0.02058	0.01576	0.01836	0.15707
-1	0.02166	0.01732	0.00280	0.01833	0.01920	0.02033	0.01563	0.01820	0.15833
0	0.02164	0.01721	0.00249	0.01824	0.01912	0.02028	0.01557	0.01810	0.15617
1	0.02186	0.01747	0.00270	0.01849	0.01937	0.02052	0.01571	0.01836	0.15692
2	0.02192	0.01745	0.00272	0.01849	0.01938	0.02055	0.01575	0.01835	0.15775
5	0.02165	0.01729	0.00254	0.01831	0.01919	0.02033	0.01561	0.01818	0.15842
10	0.02187	0.01746	0.00279	0.01849	0.01937	0.02052	0.01575	0.01835	0.15638
$x_0 = 0.6$									
-10	0.02269	0.01803	0.01250	0.01908	0.02000	0.02122	0.01634	0.01894	0.13585
-5	0.02214	0.01761	0.01232	0.01862	0.01950	0.02070	0.01597	0.01849	0.13574
-2	0.02169	0.01724	0.01218	0.01824	0.01912	0.02029	0.01563	0.01811	0.13380
-1	0.02234	0.01784	0.01236	0.01885	0.01974	0.02093	0.01617	0.01873	0.13654
0	0.02244	0.01792	0.01242	0.01894	0.01983	0.02102	0.01627	0.01881	0.13575
1	0.02226	0.01775	0.01237	0.01877	0.01965	0.02084	0.01604	0.01863	0.13463
2	0.02218	0.01768	0.01203	0.01869	0.01957	0.02076	0.01604	0.01856	0.13683
5	0.02179	0.01748	0.01217	0.01845	0.01930	0.02043	0.01583	0.01832	0.13594
10	0.02267	0.01800	0.01237	0.01905	0.01996	0.02119	0.01631	0.01891	0.13643
$x_0 = 0.8$									
-10	0.02474	0.01993	0.06459	0.02074	0.02160	0.02292	0.01866	0.02063	0.04066
-5	0.02451	0.01980	0.06456	0.02060	0.02143	0.02273	0.01870	0.02048	0.04077
-2	0.02436	0.01950	0.06468	0.02031	0.02115	0.02249	0.01839	0.02019	0.03997
-1	0.02506	0.02002	0.06450	0.02087	0.02174	0.02312	0.01870	0.02074	0.03982
0	0.02526	0.02015	0.06514	0.02103	0.02194	0.02334	0.01883	0.02090	0.04043
1	0.02463	0.01958	0.06467	0.02042	0.02128	0.02266	0.01838	0.02029	0.04108
2	0.02493	0.01992	0.06417	0.02076	0.02164	0.02301	0.01863	0.02064	0.04078
5	0.02479	0.01961	0.06494	0.02048	0.02137	0.02279	0.01844	0.02035	0.03983
10	0.02487	0.01998	0.06445	0.02080	0.02165	0.02300	0.01880	0.02067	0.04009
$x_0 = 1$									
-10	0.03012	0.02447	0.08519	0.02489	0.02568	0.02733	0.02396	0.02480	0.00073
-5	0.03070	0.02474	0.08645	0.02522	0.02602	0.02775	0.02442	0.02510	0.00042
-2	0.03024	0.02358	0.08407	0.02418	0.02510	0.02702	0.02321	0.02403	0.00054
-1	0.03006	0.02373	0.08273	0.02426	0.02511	0.02693	0.02335	0.02413	0.00042
0	0.03101	0.02415	0.08569	0.02479	0.02577	0.02776	0.02384	0.02465	0.00038
1	0.03128	0.02436	0.08452	0.02504	0.02601	0.02801	0.02396	0.02488	0.00022
2	0.03118	0.02424	0.08505	0.02490	0.02587	0.02786	0.02371	0.02474	0.00042
5	0.02944	0.02397	0.08525	0.02437	0.02509	0.02668	0.02387	0.02426	0.00051
10	0.03036	0.02389	0.08432	0.02451	0.02546	0.02734	0.02340	0.02438	0.00024

$\sigma = 0.1$, $\beta = 0.5$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 3$

Die Werte in der vorangegangenen Tabelle bieten keinen Grund zu der Annahme, daß ein systematischer Einfluß des Achsenabschnitts α auf dem MSE besteht. Die Schwankungen des MSE bei Veränderung von α sind sehr gering und weisen keinen systematischen Trend bezüglich α auf.

Anhand der Ergebnisse dieses Experiments lassen sich jedoch bereits einige Beobachtungen zum Vergleich der Schätzer machen. So ist zu erkennen, daß die Symmetrie des MSE um $\bar{x}$ für alle betrachteten Schätzer gilt. Es fällt allerdings auf, daß der Lwin-Maritz-Schätzer $\hat{X}_n$ im Gegensatz zu allen anderen Schätzern nicht an der Stelle $x_0 = \bar{x} = 0.5$, sondern an den Extremen $x_0 = 0$ und $x_0 = 1$ minimalen MSE hat.

Im Vergleich der beiden ältesten Schätzer schneidet der inverse Schätzer $\hat{X}_I$ hier durchgehend besser ab als der klassische $\hat{X}_C$. Er ist jedoch in keinem Fall der beste Schätzer. Der Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$ hat in allen hier betrachteten Fällen einen kleineren MSE als der inverse Schätzer. Dieser wiederum ist hier in allen Fällen besser als der Hagwood-Schätzer $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$, der seinerseits überall besser ist als der Srivastava-Singh-Schätzer $\hat{X}_{au}$. Diese Reihe setzt sich mit dem Halperin-Schätzer $\hat{X}_H$ fort, der stets größeren MSE hat als der Srivastava-Singh-Schätzer, aber besser ist als der Naszódi-Schätzer $\hat{X}_u$. Der klassische Schätzer hat in allen Fällen größeren MSE als alle diese Schätzer. Es gilt hier also in allen Fällen

$$\begin{aligned} \mathrm{MSE}(\hat{X}_C) &> \mathrm{MSE}(\hat{X}_u) > \mathrm{MSE}(\hat{X}_H) > \mathrm{MSE}(\hat{X}_{au}) > \\ &> \mathrm{MSE}(\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}) > \mathrm{MSE}(\hat{X}_I) > \mathrm{MSE}(\hat{X}_{AD}). \end{aligned} \tag{4.3}$$

Nur der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ und der Lwin-Maritz-Schätzer lassen sich nicht pauschal in diese Reihe einfügen. Sie sind jeweils entweder besser oder schlechter als alle sieben anderen Schätzer.

Für $x_0 = 0$ und $x_0 = 1$ ist der Schätzer von Lwin und Maritz mit Abstand der beste Schätzer. Für $x_0 = 0.2$ und $x_0 = 0.8$ hat der Aitchison-Dunsmore-Schätzer den kleinsten MSE. Der inverse Schätzer, der Hagwood-Schätzer und der Srivastava-Singh-Schätzer liegen nur geringfügig darüber. An den Stellen $x_0 = 0.4$ und $x_0 = 0.6$ ist der Ali-Singh-Schätzer vor dem Aitchison-Dunsmore-Schätzer der genaueste. An der Stelle $x_0 = 0.5$ sind diese beiden Schätzer ebenfalls die besten, wobei der Vorsprung des Ali-Singh-Schätzers hier sehr deutlich ist.

Bei diesem Experiment waren keine Stutzungen des Schätzers b nötig. Vereinzelt traten jedoch nicht berechenbare $\hat{X}_n$ auf. Die folgende Tabelle zeigt die Anzahl der Fälle.

Tabelle 4.3: Anzahl nicht berechenbarer $\hat{X}_n$ in Abhängigkeit von α und x_0

	x_0						
α	0	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1
-10	0	0	0	0	0	0	0
-5	0	0	0	0	0	0	0
-2	0	0	0	0	0	0	0
-1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	1	1	0	0

4.3 Einfluß des Designs

Ein weiterer Faktor, der möglicherweise das Verhalten der Schätzer beeinflußt, ist das im ersten Kalibrationsschritt verwendete Design, also die Zusammensetzung des Vektors x.

Für diese Arbeit wurde ein Experiment durchgeführt, um den Einfluß des Designs auf den MSE zu untersuchen. Hierbei wurden unter Beibehaltung der Standardparameter, also $\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$ und $m = 3$, verschiedene Designtypen verwendet. Um eine größere Variationsmöglichkeit zu erhalten, wurde bei diesem Experiment der Stichprobenumfang $n = 20$ verwendet.

Es wurden jeweils 10000 Schätzungen an den Stellen $x_0 = 0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ und 1 für die folgenden Designvektoren durchgeführt.

$$\begin{aligned}
x1 &= (0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1), \\
x2 &= \frac{1}{3}(0,0,0,0,0,1,1,1,1,1,2,2,2,2,2,3,3,3,3,3), \\
x3 &= \frac{1}{4}(0,0,0,0,1,1,1,1,2,2,2,2,3,3,3,3,4,4,4,4), \\
x4 &= \frac{1}{9}(0,0,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9), \\
x5 &= \frac{1}{19}(0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19),
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
x6 \quad = \quad & (0.0970415, 0.0970415, 0.0970415, 0.0970415, 0.0970415, \\
& 0.426763, 0.426763, 0.426763, 0.426763, \\
& 0.5, 0.5, \\
& 0.573237, 0.573237, 0.573237, 0.573237, \\
& 0.9029585, 0.9029585, 0.9029585, 0.9029585, 0.9029585).
\end{aligned}
$$

Der Vektor $x1$ entspricht dem auch sonst in dieser Arbeit verwendeten Endpunktdesign, das von Ott und Myers [24] als optimales Design für den klassischen Schätzer identifiziert wird. Die Vektoren $x2$ bis $x5$ stellen einen stufenweisen Übergang zum äquidistanten Design dar. Thomas und Myers [34] stellen fest, daß ein optimales Design bei Verwendung des inversen Schätzers in der Praxis nicht bestimmt werden kann, da es von den unbekannten Modellparametern abhängt. Sie ermitteln aber, daß für den Fall, daß der Kalibrationsbereich aus dem Intervall $[-1, 1]$ besteht, ein annähernd optimales Design gegeben ist, wenn

$$
\overline{x^2} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \frac{1}{3} \tag{4.4}
$$

und

$$
S_Q := \sum_{i=1}^{n}\left(x_i^2 - \overline{x^2}\right) = \frac{n}{10}. \tag{4.5}
$$

Der Vektor $x6$ entspricht einem solchen Design, transformiert auf den hier verwendeten Kalibrationsbereich $[0, 1]$.

Tabelle 4.4: Einfluß des Designs auf den MSE

x	MSE								
	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.0$									
$x1$	0.01818	0.01698	0.06980	0.01678	0.01642	0.01778	0.01737	0.01621	0.00003
$x2$	0.02058	0.02192	0.07363	0.02108	0.01746	0.01964	0.02327	0.01747	0.01262
$x3$	0.02088	0.02300	0.07139	0.02196	0.01737	0.01975	0.02462	0.01737	0.01547
$x4$	0.02271	0.02679	0.07254	0.02526	0.01816	0.02106	0.02898	0.01809	0.02284
$x5$	0.02329	0.02888	0.07190	0.02705	0.01838	0.02134	0.03149	0.01820	0.02687
$x6$	0.02413	0.03182	0.07407	0.02962	0.01903	0.02188	0.03481	0.01865	0.02842

$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $m = 3$

Fortsetzung, Tabelle 4.4

	MSE								
x	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.2$									
$x1$	0.01645	0.01375	0.07011	0.01379	0.01485	0.01615	0.01370	0.01435	0.03908
$x2$	0.01778	0.01412	0.07014	0.01401	0.01465	0.01708	0.01432	0.01454	0.01174
$x3$	0.01754	0.01421	0.07068	0.01403	0.01427	0.01677	0.01451	0.01427	0.01074
$x4$	0.01803	0.01513	0.07078	0.01480	0.01427	0.01705	0.01561	0.01447	0.01073
$x5$	0.01880	0.01546	0.06961	0.01505	0.01432	0.01761	0.01604	0.01468	0.01089
$x6$	0.01939	0.01618	0.07100	0.01565	0.01436	0.01795	0.01689	0.01485	0.01530
$x_0 = 0.4$									
$x1$	0.01576	0.01199	0.01042	0.01217	0.01409	0.01548	0.01168	0.01339	0.12200
$x2$	0.01618	0.01039	0.01052	0.01064	0.01331	0.01567	0.01002	0.01315	0.01448
$x3$	0.01623	0.00998	0.01043	0.01024	0.01304	0.01564	0.00960	0.01304	0.01363
$x4$	0.01669	0.00945	0.01050	0.00973	0.01278	0.01594	0.00906	0.01317	0.01231
$x5$	0.01692	0.00903	0.01055	0.00932	0.01250	0.01604	0.00865	0.01313	0.01155
$x6$	0.01673	0.00861	0.01048	0.00890	0.01204	0.01578	0.00826	0.01291	0.00953
$x_0 = 0.5$									
$x1$	0.01568	0.01191	0.00030	0.01211	0.01408	0.01542	0.01157	0.01338	0.14064
$x2$	0.01579	0.00977	0.00029	0.01006	0.01296	0.01530	0.00933	0.01279	0.01492
$x3$	0.01575	0.00930	0.00036	0.00961	0.01265	0.01520	0.00882	0.01265	0.01385
$x4$	0.01658	0.00863	0.00035	0.00899	0.01253	0.01582	0.00813	0.01295	0.01269
$x5$	0.01640	0.00812	0.00027	0.00849	0.01209	0.01558	0.00763	0.01275	0.01187
$x6$	0.01627	0.00759	0.00029	0.00797	0.01164	0.01537	0.00708	0.01255	0.00743
$x_0 = 0.6$									
$x1$	0.01590	0.01219	0.01050	0.01237	0.01427	0.01563	0.01188	0.01358	0.12245
$x2$	0.01558	0.00995	0.01049	0.01019	0.01277	0.01508	0.00958	0.01261	0.01381
$x3$	0.01612	0.00995	0.01045	0.01020	0.01298	0.01555	0.00955	0.01298	0.01362
$x4$	0.01645	0.00931	0.01055	0.00958	0.01257	0.01570	0.00893	0.01296	0.01209
$x5$	0.01688	0.00913	0.01055	0.00942	0.01256	0.01602	0.00874	0.01319	0.01166
$x6$	0.01694	0.00875	0.01064	0.00903	0.01223	0.01598	0.00838	0.01311	0.00974
$x_0 = 0.8$									
$x1$	0.01671	0.01376	0.06958	0.01381	0.01501	0.01639	0.01369	0.01446	0.03865
$x2$	0.01753	0.01422	0.07004	0.01411	0.01464	0.01689	0.01442	0.01454	0.01188
$x3$	0.01760	0.01440	0.07091	0.01422	0.01444	0.01686	0.01468	0.01444	0.01084
$x4$	0.01867	0.01528	0.0710	0.01495	0.01457	0.01762	0.01575	0.01481	0.01080
$x5$	0.01883	0.01575	0.07092	0.01532	0.01441	0.01762	0.01635	0.01475	0.01107
$x6$	0.01887	0.01614	0.07082	0.01560	0.01415	0.01751	0.01686	0.01460	0.01542
$x_0 = 1.0$									
$x1$	0.01805	0.01678	0.07002	0.01658	0.01625	0.01764	0.01716	0.01603	0.00003
$x2$	0.02014	0.02172	0.0709	0.02087	0.01717	0.01923	0.02308	0.01718	0.01262
$x3$	0.02148	0.02333	0.07306	0.02229	0.01774	0.02030	0.02495	0.01774	0.01585
$x4$	0.02296	0.02718	0.07346	0.02565	0.01848	0.02131	0.02943	0.01840	0.02307
$x5$	0.02245	0.02862	0.07194	0.02678	0.01793	0.02059	0.03116	0.01770	0.02665
$x6$	0.02443	0.03155	0.07361	0.02935	0.01881	0.02200	0.03450	0.01847	0.02821
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$,$\beta = 0.5$, $m = 3$									

Auch in dieser Tabelle ist die Symmetrie des MSE in x_0 zu erkennen. Wie erwartet ist das Endpunktdesign optimal für den klassischen Schätzer $\hat{X}_C$. Die Ergebnisse von Thomas und Myers bestätigen sich in diesem Exeriment insofern, daß das Design $x6$ zumindest für $x_0 = 0.4$, $x_0 = 0.5$ und $x_0 = 0.6$ den besten MSE für $\hat{X}_I$ liefert. In weiterer Entfernung von $\bar{x}$ scheint auch hier das Endpunktdesign besser zu sein. Der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ unterliegt offenbar keinem starken systematischen Einfluß durch das verwendete Design. Der Srivastava-Singh-Schätzer $\hat{X}_{au}$, der Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$, der Halperin-Schätzer $\hat{X}_H$ und der Hagwood-Schätzer $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$ zeigen ähnliches

Verhalten wie der inverse Schätzer. Auch diese Schätzer werden im Zentrum des Kalibrationsbereichs durch das Design $x6$ begünstigt, während am Rand das Endpunktdesign einen kleineren MSE liefert. Beim Halperin-Schätzer und beim Hagwood-Schätzer ist dieses Verhalten jedoch weniger deutlich ausgeprägt. Bei Verwendung des Designs $x3$ sind diese beiden Schätzer unter den vorliegenden Versuchsbedingungen identisch, da dann

$$\frac{n}{m(n-2)} S_{Y\hat{Y}} = \frac{\hat{\sigma}^2}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^2} S_{xx} \tag{4.6}$$

gilt. Der MSE des Lwin-Maritz-Schätzers $\hat{X}_n$ wird ebenfalls im Zentrum des Kalibrationsbereichs bei Verwendung des Designs $x6$ minimal. An den Stellen $x_0 = 0$ und $x_0 = 1$ ist für diesen Schätzer das Endpunktdesign mit Abstand das vorteilhafteste Design. An den Stellen $x_0 = 0.2$ und $x_0 = 0.8$ wird bei Verwendung des Designs $x4$ der kleinste MSE erzielt. Insgesamt reagiert der Lwin-Maritz-Schätzer am stärksten auf Veränderungen des Designs.

Der Vergleich der Schätzer untereinander zeigt, daß in allen hier betrachteten Fällen der Hagwood-Schätzer einen kleineren MSE hat als der Naszódi-Schätzer $\hat{X}_u$. Auch der Halperin-Schätzer ist hier stets besser als der Naszódi-Schätzer. Dieser ist wiederum hier überall besser als der klassische Schätzer.

An den Stellen $x_0 = 0$ und $x_0 = 1$ und für die Designvektoren $x1$, $x2$ und $x3$ weist der Lwin-Maritz-Schätzer den kleinsten MSE auf, gefolgt vom Hagwood-Schätzer und vom Halperin–Schätzer. Der Hagwood-Schätzer ist an diesen Stellen bei Verwendung von $x4$, $x5$ und $x6$ optimal mit dem Halperin-Schätzer an zweiter Stelle. An den Stellen $x_0 = 0.2$ und $x_0 = 0.8$ ist bei Endpunktdesign der Aitchison-Dunsmore-Schätzer optimal. Bei Verwendung des Designs $x6$ hat der Halperin-Schätzer den kleinsten MSE. Bei Verwendung der übrigen Designvektoren ist an diesen Stellen der Lwin-Maritz-Schätzer optimal.

An den Stellen $x_0 = 0.4$ und $x_0 = 0.6$ liegt der Ali-Singh-Schätzer bei Verwendung des Endpunktdesigns vorn, bei allen anderen Designtypen der Aitchison-Dunsmore-Schätzer. An zweiter Stelle liegt hier in den meisten Fällen der inverse Schätzer.

Im Mittelpunkt des Kalibrationsbereichs hat der Ali-Singh-Schätzer bei allen Designvektoren mit Abstand den kleinsten MSE vor dem Aitchison-Dunsmore-Schätzer.

Bei diesem Experiment waren keine Stutzungen von b nötig, und alle Lwin-Maritz-Schätzungen waren berechenbar.

4.4 Einfluß der Steigung

Ein Faktor, der starken Einfluß auf den MSE hat, ist β, also der Steigungsparameter der linearen Beziehung zwischen X und Y.

Für x_0 wurden wieder die Werte $x_0 = 0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ und 1.0 voreingestellt. Es wurden jeweils 10.000 Durchgänge für die Parameter $\beta = 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2, 5, 10$ und 100 berechnet. Die anderen Parameter betrugen $n = 6$ (Endpunktdesign), $\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$ und $m = 3$.

Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse.

Tabelle 4.5: Einfluß der Steigung β auf den MSE

	MSE								
β	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0$									
0.05	1565.30	0.26840	0.35567	95.6263	0.31094	0.39670	0.25008	0.28214	0.25532
0.1	835.028	0.20877	0.36232	50.7473	0.23308	0.29600	0.20181	0.21532	0.20001
0.2	130.131	0.10438	0.64358	7.98949	0.11461	0.14893	0.10600	0.10580	0.08189
0.5	0.03076	0.02410	0.08456	0.02470	0.02561	0.02753	0.02356	0.02455	0.00030
1	0.00682	0.00643	0.00803	0.00647	0.00655	0.00666	0.00640	0.00647	1.5E-10
2	0.00168	0.00167	0.00174	0.00167	0.00167	0.00168	0.00167	0.00167	4.4E-32
5	0.00026	0.00026	0.00026	0.00026	0.00026	0.00026	0.00026	0.00026	3 E-143
10	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0
100	6.64E-7	6.64E-7	6.64E-7	6.64E-7	6.64E-7	6.64E-7	6.64E-7	6.64E-7	0
$x_0 = 0.2$									
0.05	1432.51	0.13227	0.26642	88.1862	0.18481	0.28164	0.10613	0.14995	0.11657
0.1	707.526	0.11802	0.22949	43.4914	0.16150	0.23774	0.09748	0.13285	0.10340
0.2	68.5024	0.07239	0.12669	4.27077	0.09344	0.12504	0.06123	0.07974	0.07808
0.5	0.02537	0.02016	0.06432	0.02105	0.02194	0.02337	0.01899	0.02091	0.04138
1	0.00574	0.00545	0.01692	0.00550	0.00557	0.00565	0.00536	0.00550	0.03997
2	0.00139	0.00137	0.00158	0.00137	0.00138	0.00138	0.00136	0.00137	0.04
5	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.04
10	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.04
100	5.48E-7	5.48E-7	5.48E-7	5.48E-7	5.48E-7	5.48E-7	5.48E-7	5.48E-7	0.04
$x_0 = 0.4$									
0.05	1390.54	0.06146	0.15713	85.8783	0.11594	0.21161	0.03370	0.08013	0.04636
0.1	537.598	0.06319	0.10379	33.2938	0.11128	0.18793	0.03675	0.08024	0.05934
0.2	43.6406	0.05464	0.03602	2.75764	0.08156	0.11394	0.03683	0.06505	0.08779
0.5	0.02224	0.01779	0.01219	0.01879	0.01966	0.02083	0.01619	0.01866	0.13677
1	0.00517	0.00490	0.00896	0.00496	0.00503	0.00510	0.00477	0.00496	0.15532
2	0.00129	0.00127	0.00487	0.00128	0.00128	0.00128	0.00127	0.00128	0.15987
5	0.00020	0.00020	0.00026	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.16
10	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.16
100	5.11E-7	5.11E-7	5.11E-7	5.11E-7	5.11E-7	5.11E-7	5.11E-7	5.11E-7	0.16
$x_0 = 0.5$									
0.05	1372.98	0.05135	0.19704	84.7985	0.10433	0.19753	0.02340	0.06954	0.03654
0.1	552.453	0.05542	0.09721	34.2245	0.10333	0.17892	0.02921	0.07249	0.05312
0.2	34.8582	0.05395	0.03253	2.23047	0.08197	0.11472	0.03483	0.06489	0.09021
0.5	0.02199	0.01752	0.00271	0.01857	0.01947	0.02064	0.01582	0.01844	0.15591
1	0.00498	0.00472	0.00061	0.00478	0.00485	0.00491	0.00460	0.00478	0.19706
2	0.00127	0.00125	0.00017	0.00125	0.00126	0.00126	0.00124	0.00125	0.22223
5	0.00020	0.00020	0.00003	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.23995
10	0.00005	0.00005	8.29E-6	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.24790
100	4.83E-7	4.83E-7	1.76E-7	4.83E-7	4.83E-7	4.83E-7	4.83E-7	4.83E-7	0.25
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 3$									

Fortsetzung, Tabelle 4.5

β	MSE $\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.6$									
0.05	1453.98	0.06011	0.14749	89.7755	0.11554	0.21482	0.03234	0.07896	0.04570
0.1	591.475	0.06078	0.08899	36.6229	0.10753	0.18158	0.03505	0.07738	0.05702
0.2	68.8061	0.05447	0.03442	4.32738	0.08090	0.11278	0.03776	0.06470	0.08701
0.5	0.02250	0.01800	0.01253	0.01902	0.01990	0.02109	0.01628	0.01889	0.13628
1	0.00516	0.00488	0.00892	0.00495	0.00502	0.00509	0.00476	0.00495	0.15610
2	0.00130	0.00128	0.00485	0.00128	0.00129	0.00129	0.00127	0.00128	0.16053
5	0.00020	0.00020	0.00026	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.18004
10	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.00005	0.2867
100	4.92E-7	4.92E-7	4.92E-7	4.92E-7	4.92E-7	4.92E-7	4.92E-7	4.92E-7	0.36
$x_0 = 0.8$									
0.05	1460.68	0.12969	0.25348	89.8533	0.17990	0.27342	0.10558	0.14655	0.11575
0.1	607.877	0.11097	0.21084	37.3167	0.15075	0.22333	0.09108	0.12430	0.10468
0.2	59.3040	0.07048	0.13456	3.70801	0.09171	0.12378	0.05984	0.07784	0.07603
0.5	0.02573	0.02023	0.06446	0.02118	0.02215	0.02367	0.01884	0.02104	0.03982
1	0.00587	0.00554	0.01679	0.00561	0.00568	0.00577	0.00544	0.00560	0.03998
2	0.00142	0.00140	0.00161	0.00140	0.00141	0.00141	0.00140	0.00140	0.04012
5	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.0454
10	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.10264
100	5.50E-7	5.50E-7	5.51E-7	5.50E-7	5.50E-7	5.50E-7	5.50E-7	5.50E-7	0.64
$x_0 = 1$									
0.05	1571.18	0.27062	0.37209	96.0002	0.31456	0.40200	0.25042	0.28487	0.25661
0.1	892.621	0.21590	0.37777	54.2281	0.24207	0.30645	0.20619	0.22323	0.20537
0.2	109.331	0.10296	0.28179	6.70980	0.11147	0.14113	0.10535	0.10386	0.07929
0.5	0.03127	0.02432	0.08327	0.02502	0.02603	0.02803	0.02390	0.02487	0.00040
1	0.00698	0.00658	0.00818	0.00663	0.00670	0.00682	0.00651	0.00662	2.5E-11
2	0.00164	0.00161	0.00168	0.00162	0.00162	0.00163	0.00161	0.00162	1.3E-28
5	0.00027	0.00027	0.00027	0.00027	0.00027	0.00027	0.00027	0.00027	0
10	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.00007	0.0001
100	6.51E-7	6.51E-7	6.51E-7	6.51E-7	6.51E-7	6.51E-7	6.51E-7	6.51E-7	0
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 3$									

Auch in dieser Tabelle zeigt sich die Symmetrie des MSE um $x_0 = 0.5$ recht deutlich. Außerdem fällt auf, daß sich die Schätzer mit Ausnahme des Lwin-Maritz-Schätzers mit steigendem β einander immer stärker annähern.

Bei diesem Experiment gilt für alle Parameterkonstellationen

$$\mathrm{MSE}(\hat{X}_C) \geq \mathrm{MSE}(\hat{X}_u) \geq \mathrm{MSE}(\hat{X}_H) \geq \mathrm{MSE}(\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}) \geq \mathrm{MSE}(\hat{X}_I). \tag{4.7}$$

Außer in den Fällen $\beta = 0.2$ und $x_0 = 0$ oder $x_0 = 1$ gilt außerdem

$$\mathrm{MSE}(\hat{X}_I) \geq \mathrm{MSE}(\hat{X}_{AD}). \tag{4.8}$$

An den Stellen $x_0 = 0$ und $x_0 = 1$ hat für $\beta = 0.05$ der Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$ den kleinsten MSE. Für alle weiteren Werte von β ist der Lwin-Maritz-Schätzer $\hat{X}_n$ an diesen Stellen – teilweise sogar sehr deutlich – im Vorteil. In einigen Fällen wird der MSE dieses Schätzers offenbar so klein, daß er die numerische Präzision der Simulationssoftware unterschreitet. Auffällig ist bei diesem Schätzer der Wert des MSE für $x_0 = 1$ und $\beta = 10$. Dieser wird von einem nicht berechenbaren Wert des Schätzers verursacht (siehe auch Tabelle 4.7). Dieser Sachverhalt zeigt deutlich die Anfälligkeit dieses Schätzers bezüglich der Berechenbarkeit. Von den restlichen Schätzern ist für die Parameterwerte $\beta = 0.05$, $\beta = 0.1$, $\beta = 0.5$, $\beta = 1$ und der Aitchison-Dunsmore-Schätzer optimal, mit geringem Vorsprung vor dem inversen Schätzer $\hat{X}_I$, dem Hagwood-Schätzer $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$ und dem Halperin-Schätzer $\hat{X}_H$. Bei $\beta = 0.2$ liegt der inverse Schätzer leicht vor dem Aitchison-Dunsmore-Schätzer. Für $\beta = 2$, $\beta = 5$, $\beta = 10$ und $\beta = 100$ haben die meisten Schätzer nahezu gleichen MSE.

An den Stellen $x_0 = 0.2$ und $x_0 = 0.8$ ist der MSE des Aitchison-Dunsmore-Schätzers durchgehend minimal. An zweiter Stelle liegt bei $\beta = 0.05$ und $\beta = 0.1$ der Lwin-Maritz-Schätzer, sonst der inverse Schätzer.

Bei $x_0 = 0.4$ und $x_0 = 0.6$ hat für $\beta = 0.2$ und $\beta = 0.5$ der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ minimalen MSE. Für alle anderen Werte von β ist der Aitchison-Dunsmore-Schätzer optimal.

Bei $x_0 = 0.5$ schließlich hat für $\beta = 0.05$ und $\beta = 0.1$ ebenfalls der Aitchison-Dunsmore-Schätzer den geringsten MSE. Bei allen anderen Werten für β liegt der Ali-Singh-Schätzer mit Abstand vorne. Der Aitchison-Dunsmore-Schätzer ist jedoch auch in diesen Fällen immerhin der zweitbeste Schätzer.

Für dieses Experiment lag die Häufigkeit der gestutzten Parameterschätzer b bei durchschnittlich etwa 27% für $\beta = 0.05$, bei 11% für $\beta = 0.1$ und bei 0.8% für $\beta = 0.2$. Die folgende Tabelle zeigt die genauen Zahlen.

Tabelle 4.6: Anzahl gestutzter b in Abhängigkeit von β und x_0

β	x_0						
	0.0	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
0.05	2704	2716	2732	2706	2777	2765	2744
0.1	1120	1107	1083	1141	1148	1105	1157
0.2	84	72	86	75	92	71	86
0.5	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0
100	0	0	0	0	0	0	0

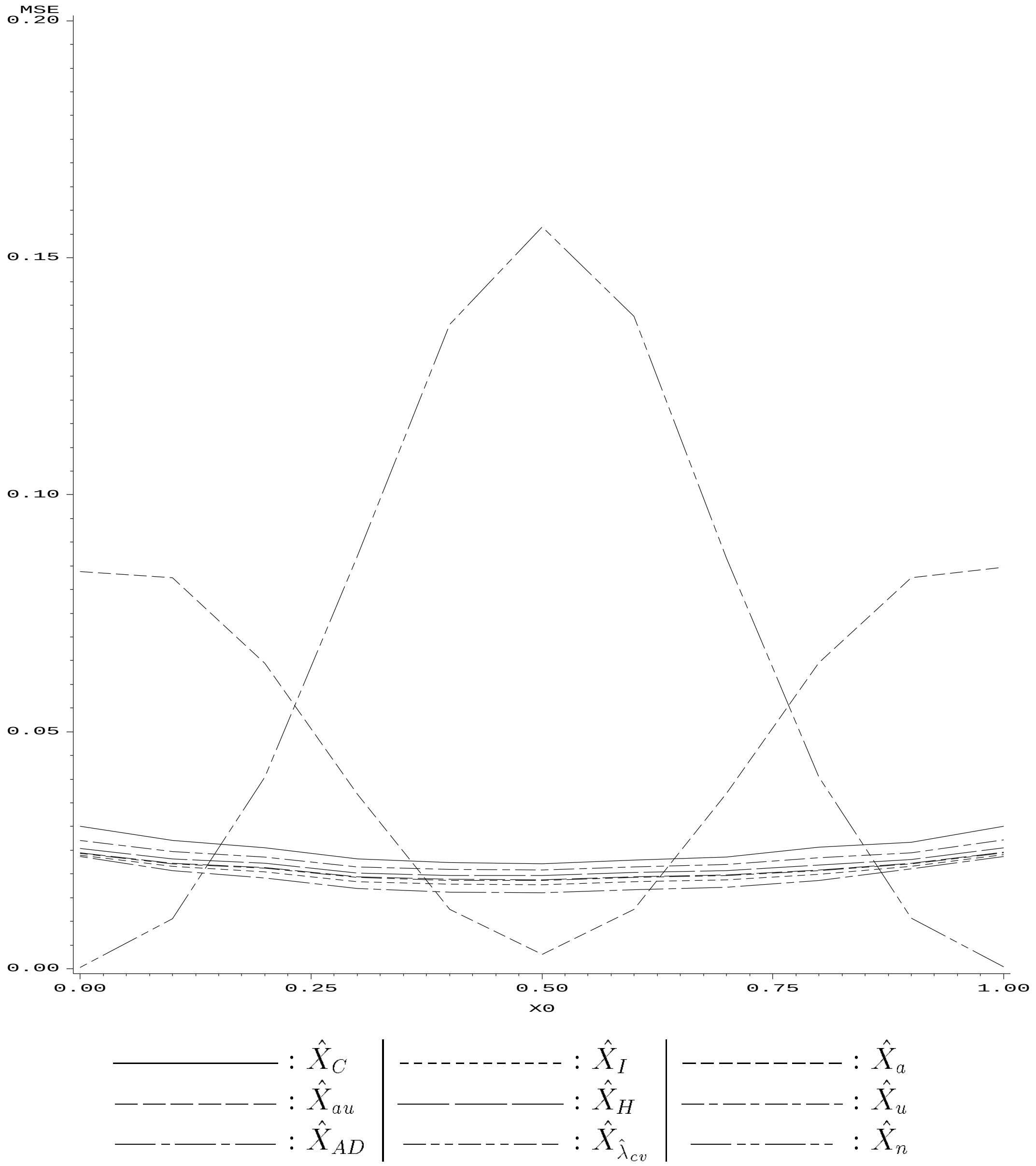
Die folgende Tabelle zeigt die Anzahlen der Simulationsdurchgänge, in denen nicht berechenbare Werte für den Lwin-Maritz-Schätzer auftraten. Auffällig ist hierbei, daß an den Stellen $x_0 = 0$ und $x_0 = 1$ fast keine solchen Fälle auftraten, und daß die Häufigkeiten zum Wert $x_0 = \bar{x} = 0.5$ ansteigen.

Tabelle 4.7: Anzahl nicht berechenbarer $\hat{X}_n$ in Abhängigkeit von β und x_0

β	x_0						
	0.0	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
0.05	0	0	0	0	0	0	0
0.1	0	0	0	0	0	0	0
0.2	0	0	0	1	0	0	0
0.5	0	0	0	0	1	0	0
1	0	0	1	3	4	0	0
2	0	2	47	72	37	2	0
5	0	92	1025	1965	1002	90	0
10	0	1044	6362	8320	6335	1044	1
100	0	10000	10000	10000	10000	10000	0

Sowohl die Ergebnisse, die in den Tabellen 4.2, 4.4 und 4.5 dargestellt wurden, als auch die Ergebnisse früherer Studien deuten an, daß der weitaus wichtigste Faktor, der beim Vergleich der verschiedenen Schätzer eine Rolle spielt, die Lage von x_0 selbst in Bezug auf den Kalibrationsbereich und $\bar{x}$ ist. Die folgende Grafik stellt für die betrachteten Schätzer jeweils den MSE in Abhängigkeit von x_0 dar. Die Werte entsprechen den Simulationsergebnissen für die Parameter $\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$ und $m = 3$.

Abbildung 4.1: MSE in Abhängigkeit von x_0



$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ \beta = 0.5,\ x = (0,0,0,1,1,1),\ m = 3$

Diese Grafik zeigt deutlich den Vorteil des Ali-Singh-Schätzers $\hat{X}_a$ im Zentrum des Kalibrationsbereichs sowie den des Lwin-Maritz-Schätzers $\hat{X}_n$ an den Grenzen. Auffällig ist die Tatsache, daß der Lwin-Maritz-Schätzer als einziger Schätzer nicht vorwiegend konkav über dem Kalibrationsbereich ist.

Der in dieser Grafik betrachtete Fall $\beta = 0.5$ entspricht auch den Zeilen für $\alpha = 0$ aus der Tabelle 4.2, und die auf Seite 47 beschriebene Situation läßt sich hier gut erkennen. Sieben der Schätzer haben auf dem gesamten Kalibrationsbereich eine einheitliche Rangfolge. Nur $\hat{X}_a$ und $\hat{X}_n$ variieren stark um diese gesamte Gruppe.

Im folgenden Abschnitt wird das Verhalten der Schätzer bei Extrapolation untersucht.

4.5 Verhalten der Schätzer bei Extrapolation

Um das Verhalten des MSE für den Fall $x_0 \notin [x_{(1)}, x_{(n)}]$ zu untersuchen, wurden wieder jeweils 10000 Schätzungen bei verschiedenen Kombinationen von x_0 und β simuliert. Hierbei waren für den Steigungsparameter die Werte $\beta = 0.05$, 0.5, 1, 10 und 100 vorgegeben. Der zu schätzende Wert wurde auf $x_0 = 1.2$, 1.4, 1.6, 1.8, 2, 5, 10, 25, 50 und 100 eingestellt. Aufgrund der festgestellten Symmetrie wurde darauf verzichtet, auch Messungen unterhalb des Kalibrationsbereichs zu simulieren. Die übrigen Parameter behalten ihre Standardwerte, also $\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$ und $m = 3$.

Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Tabelle 4.8: Das Verhalten der Schätzer bei Extrapolation

	MSE								
x_0	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$\beta = 0.05$									
1.2	1627.86	0.48559	0.66101	98.3979	0.52241	0.60537	0.47068	0.49673	0.47318
1.4	1956.59	0.77372	1.06054	116.772	0.80441	0.88829	0.76477	0.78186	0.76020
1.6	2254.68	1.12094	1.78235	133.486	1.13405	1.20412	1.12515	1.12167	1.11396
1.8	2503.28	1.53387	1.94519	146.818	1.52608	1.57825	1.55383	1.52583	1.53529
2	2934.29	2.03586	2.54918	170.302	2.01679	2.06928	2.06489	2.02226	2.04029
5	14621.1	17.9095	25.6064	808.882	17.2694	16.9447	18.4067	17.6252	18.7906
10	61446.3	79.4554	129.804	3369.90	76.4749	74.8219	81.9536	78.1398	86.4244
25	402465	532.589	1701.01	22004.8	513.101	501.293	547.471	524.074	589.980
50	1666516	2174.19	16110.6	91093.6	2098.56	2058.52	2231.04	2140.68	2442.08
100	6813966	8798.60	125778	372334	8503.87	8353.79	9035.67	8667.37	9976.60
$\beta = 0.5$									
1.2	0.03629	0.02977	0.06210	0.02955	0.03017	0.03222	0.03089	0.02949	0.04026
1.4	0.04921	0.03948	0.05497	0.03880	0.03959	0.04273	0.04237	0.03873	0.16012
1.6	0.06417	0.05094	0.06334	0.04966	0.05058	0.05489	0.05523	0.04958	0.36027
1.8	0.08512	0.06551	0.08255	0.06383	0.06512	0.07144	0.07217	0.06363	0.64132
2	0.10315	0.08090	0.09997	0.07797	0.07915	0.08661	0.09023	0.07785	1.00091
5	0.72999	0.57587	0.72526	0.53979	0.54118	0.59575	0.68047	0.53979	16.9126
10	3.38260	2.50029	3.37701	2.35162	2.36864	2.66378	2.96823	2.34267	95.2937
25	20.8581	16.4184	20.8529	15.2627	15.2766	16.8694	19.6596	15.2848	625
50	85.6107	66.4585	85.6057	62.0282	62.0769	68.8496	78.7785	61.9431	2500
100	353.306	279.323	353.301	261.218	262.037	288.458	326.277	261.514	10000
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 3$									

Fortsetzung Tabelle 4.8

x_0	MSE $\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$\beta = 1$									
1.2	0.00866	0.00819	0.00898	0.00821	0.00828	0.00843	0.00823	0.00820	0.04
1.4	0.01068	0.01014	0.01074	0.01010	0.01017	0.01036	0.01029	0.01010	0.16036
1.6	0.01411	0.01331	0.01405	0.01326	0.01337	0.01365	0.01357	0.01326	0.3611
1.8	0.01729	0.01636	0.01716	0.01624	0.01634	0.01668	0.01682	0.01624	0.64754
2	0.02089	0.01960	0.02069	0.01945	0.01959	0.02006	0.02026	0.01945	1.024
5	0.15224	0.14116	0.15192	0.13969	0.14085	0.14496	0.14780	0.13966	21.7249
10	0.64970	0.62204	0.64945	0.61035	0.61050	0.62321	0.64987	0.61044	99.9867
25	4.15943	3.96463	4.15916	3.88921	3.89240	3.97996	4.18535	3.88948	625
50	17.4895	16.8212	17.4893	16.4911	16.4792	16.8009	17.6766	16.4947	2500
100	69.9378	66.2910	69.9375	65.1661	65.3262	66.8754	69.5478	65.1680	10000
$\beta = 10$									
1.2	0.00008	0.00008	0.00008	0.00008	0.00008	0.00008	0.00008	0.00008	0.1863
1.4	0.00010	0.00010	0.00010	0.00010	0.00010	0.00010	0.00010	0.00010	1.294
1.6	0.00013	0.00013	0.00013	0.00013	0.00013	0.00013	0.00013	0.00013	2.45792
1.8	0.00016	0.00016	0.00016	0.00016	0.00016	0.00016	0.00016	0.00016	3.23506
2	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	0.00020	3.9997
5	0.00136	0.00137	0.00137	0.00137	0.00137	0.00137	0.00137	0.00137	25
10	0.00603	0.00603	0.00603	0.00602	0.00602	0.00603	0.00603	0.00602	100
25	0.04004	0.04004	0.04003	0.04003	0.04002	0.04002	0.04007	0.04003	625
50	0.16562	0.16546	0.16562	0.16545	0.16547	0.16553	0.16564	0.16545	2500
100	0.65423	0.65346	0.65423	0.65346	0.65358	0.65384	0.65384	0.65346	10000
$\beta = 100$									
1.2	7.95E-7	7.95E-7	7.95E-7	7.95E-7	7.95E-7	7.95E-7	7.95E-7	7.95E-7	1.44
1.4	1.05E-6	1.05E-6	1.05E-6	1.05E-6	1.05E-6	1.05E-6	1.05E-6	1.05E-6	1.96
1.6	1.31E-6	1.31E-6	1.31E-6	1.31E-6	1.31E-6	1.31E-6	1.31E-6	1.31E-6	2.56
1.8	1.62E-6	1.62E-6	1.62E-6	1.62E-6	1.62E-6	1.62E-6	1.62E-6	1.62E-6	3.24
2	2.03E-6	2.03E-6	2.03E-6	2.03E-6	2.03E-6	2.03E-6	2.03E-6	2.03E-6	4
5	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001	25
10	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	0.00006	100
25	0.00040	0.00040	0.00040	0.00040	0.00040	0.00040	0.00040	0.00040	625
50	0.00168	0.00168	0.00168	0.00168	0.00168	0.00168	0.00168	0.00168	2500
100	0.00668	0.00668	0.00668	0.00668	0.00668	0.00668	0.00668	0.00668	10000

$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $x = (0,0,0,1,1,1)$, $m = 3$

Außer im Fall $\beta = 100$ und $x_0 = 1.2$ ist bei diesem Experiment der MSE des klassischen Schätzers $\hat{X}_C$ größer als der des Naszódi-Schätzers $\hat{X}_u$. Andere Vergleiche dieser allgemeinen Art scheinen hier nicht sinnvoll.

Für $\beta = 0.05$ ist der Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$ bei $x_0 = 1.2$ leicht überlegen, gefolgt vom inversen Schätzer $\hat{X}_I$. Im Bereich $x_0 = 1.4$ und $x_0 = 1.6$ liegt der Lwin-Maritz-Schätzer $\hat{X}_n$ leicht vorn, mit dem Aitchison-Dunsmore-Schätzer oder dem inversen Schätzer an zweiter Stelle. Falls $x_0 = 1.8$ oder $x_0 = 2.0$ ist der Hagwood-Schätzer $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$ bzw. der Halperin-Schätzer $\hat{X}_H$ knapp vor dem jeweils anderen der beste. Bei stärkerer Extrapolation hat der Naszódi-Schätzer für $\beta = 0.05$ den kleinsten MSE. Der Halperin-Schätzer bleibt an zweiter Stelle.

Für $\beta = 0.5$ ist mit Ausnahme der Punkte $x_0 = 5$, $x_0 = 25$ und $x_0 = 100$, an denen der Srivastava-Singh-Schätzer $\hat{X}_{au}$etwas besser ist, der Hagwood-Schätzer optimal. Der jeweils andere Schätzer ist hierbei zumeist an zweiter Stelle. Der

Halperin-Schätzer hat einen MSE von vergleichbarer Größenordnung. Bei geringer Extrapolation liegt auch der MSE des inversen Schätzers nahe bei dieser Gruppe.

Gilt $\beta = 1$, so ist bei $x_0 = 1.2$ der inverse Schätzer optimal. An zweiter Stelle liegt der Hagwood-Schätzer, der – gleichauf mit dem Srivastava-Singh-Shätzer – im Bereich $x_0 = 1.4$ bis $x_0 = 5$ minimalen MSE unter den betrachteten Schätzern hat. Bei stärkerer Extrapolation liegt der Srivastava-Singh-Schätzer an erster Stelle.

Beträgt der Steigungsparameter $\beta = 10$ oder $\beta = 100$, so nähern sich die mittleren quadratischen Fehler der Schätzer sehr stark an, so daß ein Versuch, die Schätzer zu vergleichen, wenig sinnvoll erscheint. Der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ und der Hagwood-Schätzer liegen hier bei leichter Extrapolation etwas schlechter als die restlichen Schätzer. Der Lwin-Maritz-Schätzer ist hier wegen seiner mangelnden Berechenbarkeit völlig unbrauchbar.

Bei diesem Simulationsexperiment lag die Anzahl der gestutzten Schätzer b für $\beta = 0.05$ bei etwa 27%. Bei anderen Steigungen waren keine Stutzungen nötig. Die folgende Tabelle zeigt die genauen Zahlen.

Tabelle 4.9: Anzahl gestutzter b in Abhängigkeit von β und x_0

	x_0									
β	1.2	1.4	1.6	1.8	2	5	10	25	50	100
0.05	2673	2743	2777	2693	2685	2713	2758	2750	2795	2830
0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

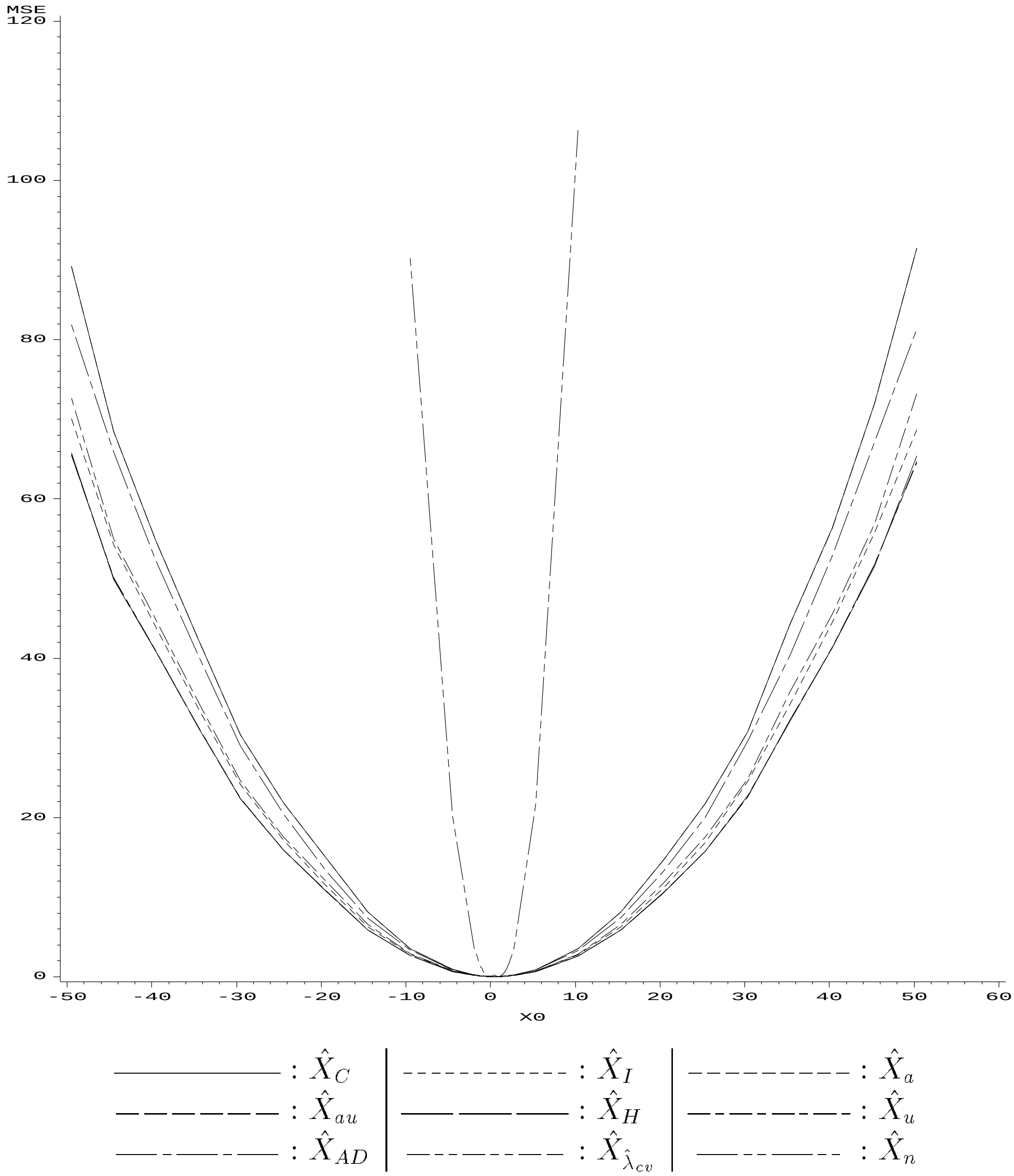
Der Lwin-Maritz-Schätzer wird offenbar auch von Extrapolation stark beeinträchtigt. So ist an der Stelle $x_0 = 100$ kein Ergebnis brauchbar, da keine der Schätzungen berechnet werden konnte. Selbst bei $x_0 = 5$ liegt schon bei der Steigung $\beta = 1$ der Anteil nicht berechenbarer $\hat{X}_n$ bei über 60%. Die folgende Tabelle zeigt die genauen Zahlen.

Tabelle 4.10: Anzahl nicht berechenbarer $\hat{X}_n$ in Abhängigkeit von β und x_0 bei Extrapolation

	x_0									
β	1.2	1.4	1.6	1.8	2	5	10	25	50	100
0.05	0	0	0	0	0	1	3	138	1946	8396
0.5	0	0	1	5	3	1014	7523	10000	10000	10000
1	0	2	5	29	80	6361	9993	10000	10000	10000
10	1045	6300	9536	9981	9999	10000	10000	10000	10000	10000
100	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000

Zur Veranschaulichung der Ergebnisse in Tabelle 4.8 wird im Folgenden das Verhalten der mittleren quadratischen Fehler bei $\beta = 0.5$ noch einmal graphisch dargestellt. Die Werte entsprechen den Simulationsergebnissen für die Parameter $\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$ und $m = 3$. Es wurden allerdings noch Messungen für weitere Werte von x_0 simuliert, deren Darstellung in Tabellenform zu umfangreich geworden wäre.

Abbildung 4.2: MSE in Abhängigkeit von x_0 bei starker Extrapolation

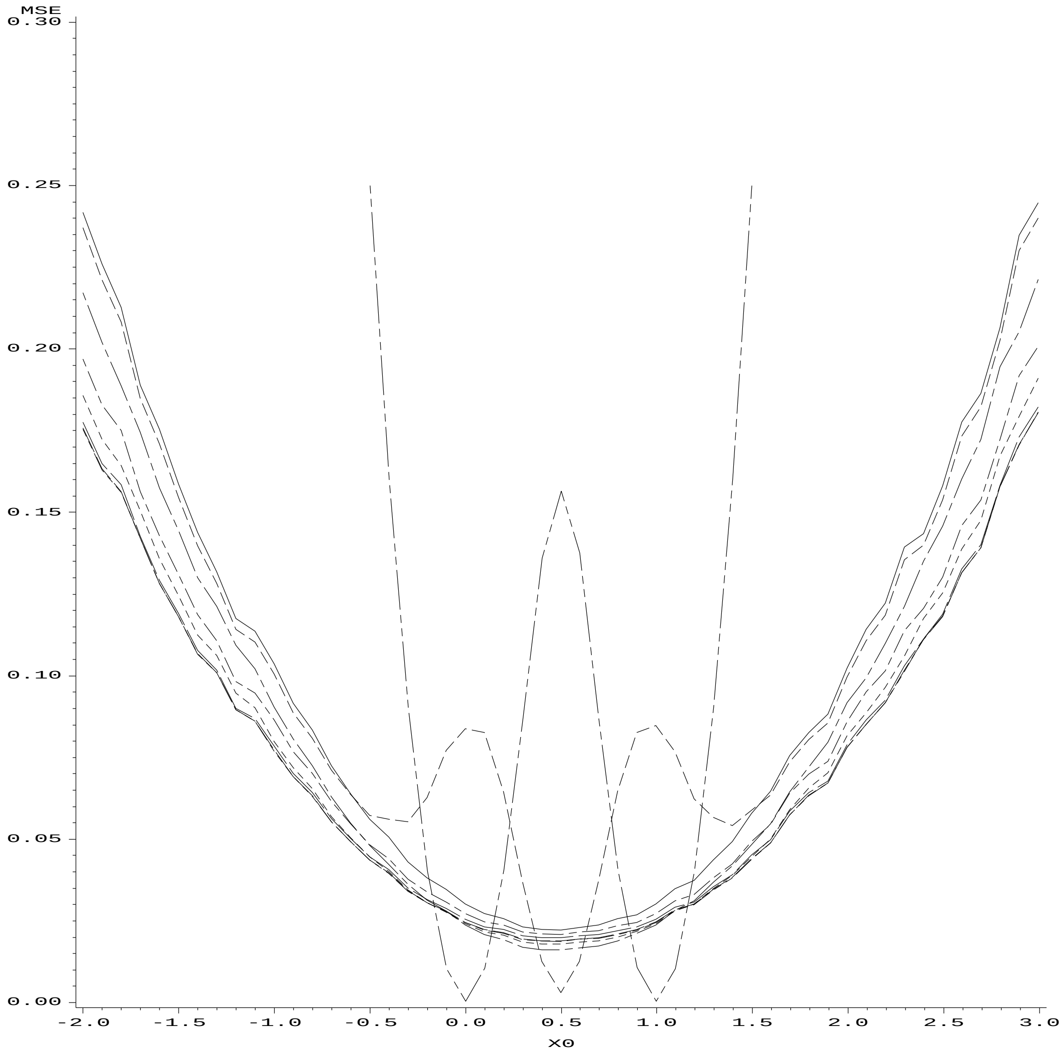


$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ \beta = 0.5,\ x = (0, 0, 0, 1, 1, 1),\ m = 3$

Zu der vorangegangenen Abbildung ist zu beachten, daß die Kurve für den klassischen Schätzer und die für den Ali-Singh-Schätzer zusammenfallen. Dasselbe gilt für die Kurven des Srivastava-Singh-Schätzers, des Halperin-Schätzers und des Hagwood-Schätzers.

Die folgende Abbildung zeigt einen kleineren Ausschnitt derselben Kurven.

Abbildung 4.3: MSE in Abhängigkeit von x_0 bei Extrapolation



: $\hat{X}_C$	: $\hat{X}_I$	: $\hat{X}_a$	
: $\hat{X}_{au}$	: $\hat{X}_H$	: $\hat{X}_u$	$\sigma = 0.1$,
: $\hat{X}_{AD}$	: $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	: $\hat{X}_n$	

$\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$, $m = 3$

Auffällig ist in dieser Abbildung das Verhalten des Ali-Singh-Schätzers. Während der MSE dieses Schätzers ausgehend von seinem Minimum im Zentrum des Kalibrationsbereichs mit $|x_0 - \bar{x}|$ zunächst stark ansteigt, nähert er sich weiter außen dem MSE des klassischen Schätzers an. Wie die Abbildung 4.5 und die entsprechenden Werte in Tabelle 4.8 zeigen, sind die jeweiligen MSE-Werte bei starker Extrapolation nahezu identisch. Offenbar tendiert in der Iteration das Gewicht der Mittelung zwischen $\hat{X}_C$ und $\bar{x}$, auf der der Schätzer beruht (s. Abschnitt 2.3), in Abhängigkeit von x_0 zu den jeweiligen Extremen. Gerade an den Grenzen des Kalibrationsbereichs und bei leichter Extrapolation ergibt sich dabei ein verhältnismäßig großer MSE.

Auch der MSE des Lwin-Maritz-Schätzers zeigt ein auffälliges Verhalten. Er ist der einzige Schätzer, der nicht über dem Kalibrationsbereich konkav ist. Unter Berücksichtigung der Konstruktion des Schätzers und des Verhaltens unter Veränderung des Designs, gibt dieses Verhalten Anlaß zu der Vermutung, daß dieser Schätzer besonders genau ist, wenn viele Stützpunkte des ersten Kalibrationsschritts in der Nähe von x_0 liegen.

4.6 Asymptotik der Schätzer für große m

Auch der Einfluß wiederholter Messungen im zweiten Schritt der Kalibrationsexperimente soll hier untersucht werden. Dazu wurden für die Standardparameter $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $\sigma = 0.1$ und dem Design $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$ an den Stellen $x_0 = 0.5$, 0.75, 1, 5 und 10 jeweils 10000 Messungen für verschiedene m simuliert. Die Werte betragen $m = 1$, 3, 5, 10, 25, 50, 75, 100, 500, 1000, 5000, 10000 und 50000. Es wird davon ausgegangen, daß die Anzahl der wiederholten Messungen in der praktischen Anwendung der linearen Kalibration zumeist im einstelligen oder äußerstenfalls zweistelligen Bereich liegen wird. Die Simulation von Messungen mit 10000 und 50000 Wiederholungen stellt somit den Versuch dar, das asymptotische Verhalten der Schätzer für große m empirisch zu untersuchen.

Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse der Simulation.

Tabelle 4.11: Asymptotik der Schätzer für große m

	MSE								
m	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.5$									
1	0.05200	0.04147	0.01594	0.04393	0.03781	0.04879	0.04147	0.04362	0.18508
3	0.02198	0.01752	0.00265	0.01856	0.01945	0.02062	0.01582	0.01843	0.15787
5	0.01601	0.01275	0.00132	0.01351	0.01483	0.01501	0.01038	0.01341	0.14571
10	0.01147	0.00916	0.00058	0.00970	0.01104	0.01077	0.00600	0.00963	0.13531
25	0.00879	0.00702	0.00029	0.00743	0.00865	0.00825	0.00269	0.00738	0.12517
50	0.00823	0.00655	0.00024	0.00694	0.00817	0.00772	0.00132	0.00689	0.12305
75	0.00781	0.00626	0.00019	0.00663	0.00777	0.00734	0.00077	0.00658	0.12334
100	0.00776	0.00616	0.00017	0.00654	0.00773	0.00727	0.00051	0.00649	0.12211
500	0.00737	0.00588	0.00013	0.00623	0.00736	0.00692	0.00003	0.00618	0.11878
1000	0.00745	0.00594	0.00018	0.00630	0.00745	0.00699	9.04E-6	0.00625	0.11974
5000	0.00720	0.00577	0.00020	0.00611	0.00720	0.00677	3.82E-7	0.00606	0.11829
10000	0.00748	0.00594	0.00021	0.00629	0.00748	0.00700	9.53E-8	0.00624	0.12097
50000	0.00725	0.00578	0.00016	0.00612	0.00725	0.00680	3.75E-9	0.00608	0.11812
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0,0,0,1,1,1)$									

Fortsetzung, Tabelle 4.11

	MSE								
m	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.75$									
1	0.05316	0.04241	0.06065	0.04468	0.03933	0.04958	0.04241	0.04437	0.09289
3	0.02377	0.01894	0.05098	0.01985	0.02074	0.02205	0.01755	0.01973	0.06234
5	0.01807	0.01439	0.05012	0.01502	0.01644	0.01666	0.01303	0.01492	0.05784
10	0.01382	0.01100	0.05037	0.01143	0.01309	0.01268	0.01068	0.01136	0.05485
25	0.01114	0.00895	0.04989	0.00924	0.01088	0.01022	0.01445	0.00919	0.05447
50	0.01013	0.00819	0.04950	0.00843	0.01001	0.00929	0.02298	0.00839	0.05462
75	0.01050	0.00829	0.05050	0.00857	0.01041	0.00954	0.02952	0.00852	0.05474
100	0.00998	0.00795	0.05003	0.00819	0.00991	0.00908	0.03418	0.00814	0.05456
500	0.00933	0.00745	0.05003	0.00766	0.00932	0.00849	0.05419	0.00762	0.05495
1000	0.00992	0.00766	0.05048	0.00793	0.00991	0.00887	0.05810	0.00787	0.05444
5000	0.00938	0.00749	0.05020	0.00771	0.00937	0.00853	0.06158	0.00767	0.05490
10000	0.00950	0.00753	0.05077	0.00775	0.00950	0.00861	0.06204	0.00771	0.05443
50000	0.00978	0.00778	0.05027	0.00802	0.00978	0.00890	0.06241	0.00798	0.05484
$x_0 = 1$									
1	0.06074	0.04792	0.10989	0.05001	0.04598	0.05574	0.04792	0.04968	0.00848
3	0.03021	0.02444	0.08705	0.02485	0.02559	0.02724	0.02432	0.02474	0.00034
5	0.02650	0.02031	0.07886	0.02080	0.02300	0.02344	0.02120	0.02067	0.00027
10	0.02036	0.01603	0.07218	0.01609	0.01869	0.01787	0.02420	0.01603	0.00014
25	0.01757	0.01418	0.06980	0.01408	0.01695	0.01548	0.04949	0.01405	0.00008
50	0.01720	0.01334	0.06894	0.01330	0.01684	0.01487	0.08815	0.01324	0.00007
75	0.01629	0.01302	0.06643	0.01292	0.01608	0.01426	0.11518	0.01287	0.00007
100	0.01604	0.01298	0.06817	0.01276	0.01587	0.01398	0.13555	0.01274	0.00009
500	0.01651	0.01289	0.06795	0.01281	0.01648	0.01430	0.21655	0.01277	0.00008
1000	0.01564	0.01277	0.06796	0.01254	0.01563	0.01368	0.23232	0.01252	0.00007
5000	0.01569	0.01272	0.06764	0.01253	0.01569	0.01373	0.24629	0.01250	0.00008
10000	0.01581	0.01254	0.06684	0.01241	0.01580	0.01373	0.24813	0.01237	0.00007
50000	0.01577	0.01268	0.06865	0.01246	0.01577	0.01364	0.24963	0.01243	0.00007
$x_0 = 5$									
1	0.76644	0.60823	0.76174	0.57273	0.75355	0.63191	0.60823	0.57321	16.9486
3	0.73480	0.57707	0.72991	0.54109	0.54314	0.59859	0.68614	0.54128	16.9603
5	0.72607	0.57909	0.72150	0.54273	0.58128	0.59706	0.85880	0.54286	16.9711
10	0.72079	0.56027	0.71560	0.52306	0.62498	0.58131	1.47314	0.52322	16.9306
25	0.73666	0.57262	0.73141	0.53462	0.69245	0.59405	3.78555	0.53479	16.9189
50	0.74133	0.56655	0.73599	0.52987	0.71613	0.59103	7.02698	0.52976	16.9441
75	0.72314	0.56362	0.71796	0.52665	0.70799	0.58452	9.31271	0.52696	16.9612
100	0.69203	0.56485	0.68740	0.52354	0.68199	0.56996	10.9111	0.52535	16.9162
500	0.72082	0.56875	0.71571	0.52938	0.71851	0.58384	17.5441	0.53011	16.9315
1000	0.72021	0.57582	0.71552	0.53833	0.71915	0.59158	18.8173	0.53890	16.9342
5000	0.70616	0.56147	0.70130	0.52334	0.70594	0.57698	19.9502	0.52421	16.9369
10000	0.69053	0.54832	0.68578	0.51077	0.69042	0.56205	20.0989	0.51115	16.9198
50000	0.72924	0.56563	0.72412	0.52951	0.72922	0.58952	20.2196	0.52955	16.9558
$x_0 = 10$									
1	3.25841	2.52216	3.25316	2.35998	3.18884	2.62601	2.52216	2.35913	95.3393
3	3.20339	2.47703	3.19817	2.31959	2.33269	2.58538	2.96810	2.32031	95.3887
5	3.14553	2.52010	3.14059	2.33932	2.49237	2.56172	3.73448	2.34292	95.2348
10	3.12770	2.48470	3.12300	2.32617	2.74225	2.56477	6.50015	2.32790	95.5141
25	3.24168	2.51082	3.23647	2.35077	3.04895	2.61928	16.9013	2.35144	95.3887
50	3.22599	2.50215	3.22063	2.34253	3.12884	2.61543	31.2276	2.34393	95.2215
75	3.15190	2.51909	3.14701	2.34493	3.08873	2.57447	41.4818	2.34977	95.3051
100	3.10613	2.51480	3.10149	2.33585	3.06019	2.54844	48.7675	2.34016	95.2462
500	3.13018	2.50090	3.12523	2.32510	3.12048	2.55127	78.1621	2.32848	95.4723
1000	3.12464	2.48894	3.11977	2.31379	3.11970	2.53913	83.8575	2.31608	95.4191
5000	3.13151	2.47581	3.12623	2.29437	3.13049	2.52733	88.9118	2.29934	95.3279
10000	3.15319	2.52568	3.14844	2.35341	3.15271	2.58248	89.5756	2.35652	95.3982
50000	3.18454	2.50205	3.17946	2.32919	3.18444	2.57368	90.1148	2.33073	95.2918
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0,0,0,1,1,1)$									

Die meisten der untersuchten Schätzer werden mit steigendem m besser. Für den Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$ gilt dies jedoch nur an der Stelle $x_0 = \bar{x} = 0.5$ uneingeschränkt. An den anderen Stellen im Kalibrationsbereich folgt auf eine Verbesserung bei größeren m dann eine Verschlechterung. Außerhalb des Kalibrationsbereichs steigt der MSE des Aitchison-Dunsmore-Schätzers offenbar von Anfang an mit m. Dieses Verhalten ist nicht überraschend, da der Schätzer stark von der Quadratsumme $V = \sum_{j=1}^{m}(y_{0j} - \bar{y}_0)^2$. abhängt, deren Summandenanzahl gerade m ist. Ist V groß, so nähert sich der Schätzer gerade $\bar{x}$. In Tabelle 4.11 ist deutlich zu erkennen, daß der MSE für große m gegen $(x_0 - \bar{x})^2$ strebt. Wie groß m werden darf, hängt offenbar auch von x_0 ab. Im vorliegenden Experiment liegt $\hat{X}_{AD}$ bei $x_0 = 0.75$ und $m = 10$ noch an erster Stelle, während der Schätzer bei $x_0 = 1$ bereits für $m = 5$ nur an fünfter Stelle liegt.

Bei Betrachtung der Größenordnung der Verbesserung des MSE mit steigendem m fällt auf, daß sich die meisten Schätzer innerhalb des Kalibrationsbereichs wesentlich stärker verbessern als bei Extrapolation. Lediglich der Lwin-Maritz-Schätzer $\hat{X}_n$ erfährt den stärksten Einfluß bei $x_0 = 1$. Das Verhalten dieses Schätzers bei Extrapolation ist wegen mangelnder Berechenbarkeit auch hier wieder kaum zu beurteilen.

Der Vergleich der Schätzer untereinander zeigt, daß der klassische Schätzer wieder in allen Fällen größeren MSE hat als der Naszódi-Schätzer $\hat{X}_u$. Dieser ist für $m \leq 5$ stets besser als der Halperin-Schätzer$\hat{X}_H$. Für $m > 5$ ist dies umgekehrt, der Halperin-Schätzer bleibt jedoch weiterhin ebenfalls besser als der klassische Schätzer $\hat{X}_C$. Wenn nicht x_0 innerhalb des Kalibrationsbereichs liegt und $m = 1$ ist, ist der Halperin-Schätzer besser als der Hagwood-Schätzer $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$. Dieser ist innerhalb des Kalibrationsbereichs und an der Grenze für $m < 5$ besser als der inverse Schätzer $\hat{X}_I$. Bei mehr als drei Wiederholungen bei $x_0 = 1$ und bei Extrapolation ist dagegen der inverse Schätzer besser als der Hagwood-Schätzer.

Bei $x_0 = 0.5$ und m bis 100 ist der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ der beste unter den betrachteten Schätzern, gefolgt vom Aitchison-Dunsmore-Schätzer. Dieser ist seinerseits für größere m deutlich besser.

An der Stelle $x_0 = 0.75$ hat bei Messungen ohne Wiederholung der Halperin-Schätzer den kleinsten MSE. Im mittleren Bereich von drei bis zehn Wiederholungen schneidet hier der Aitchison-Dunsmore-Schätzer am besten ab, während für alle weiteren Werte für m der inverse Schätzer den kleinsten MSE hat. Auch der Hagwood-Schätzer und der Srivastava-Singh-Schätzer $\hat{X}_{au}$ haben hier nur geringfügig größeren MSE.

An der Grenze des Kalibrationsbereichs ist wiederum der Lwin-Maritz-Schätzer nicht zu übertreffen. An zweiter Stelle liegt hier bei $m = 1$ der

Halperin-Schätzer, bei $m = 3$ der Aitchison-Dunsmore-Schätzer und bei $m = 5$ der inverse Schätzer. Bei allen weiteren Werten von m an dieser Stelle liegt der Hagwood-Schätzer, dicht gefolgt vom Srivastava-Singh-Schätzer und dem inversen Schätzer an zweiter Stelle.

Bei stärkerer Extrapolation hat fast in allen untersuchten Fällen der Srivastava-Singh-Schätzer den kleinsten MSE, gefolgt vom Hagwood-Schätzer. Lediglich im Fall $x_0 = 10$ und $m = 1$ ist letzterer geringfügig besser.

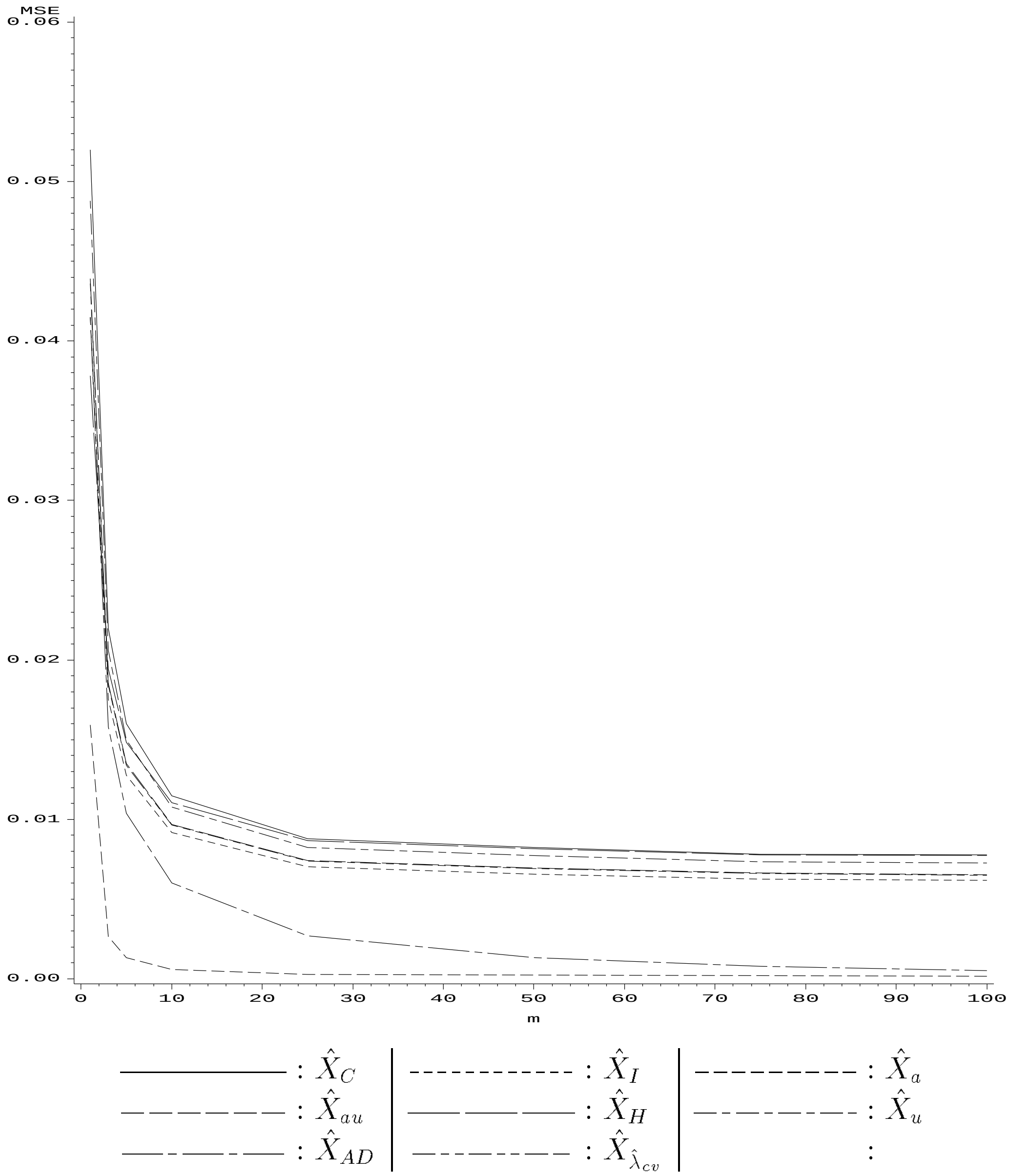
Tabelle 4.12: Anzahl nicht berechenbarer $\hat{X}_n$ in Abhängigkeit von m und x_0

	x_0				
m	0.5	0.75	1	5	10
1	0	0	0	1054	7547
3	0	0	0	1067	7573
5	0	0	0	1079	7492
10	0	0	0	1034	7639
25	0	0	0	1021	7573
50	0	0	0	1049	7485
75	0	0	0	1068	7529
100	0	0	0	1018	7498
500	0	0	0	1035	7617
1000	0	0	0	1038	7589
5000	0	0	0	1041	7541
10000	1	0	0	1022	7578
50000	0	0	0	1062	7522

Stutzungen des Parameterschätzers b waren bei diesem Experiment in keinem Fall nötig. Die Zahl der nicht berechenbaren Lwin-Maritz-Schätzungen lag bei $x_0 = 5$ etwa bei 10% und bei $x_0 = 10$ bei 76%. Tabelle 4.12 zeigt die genauen Zahlen.

Zur Veranschaulichung des Verhaltens der Schätzer in Abhängigkeit von m ist in der folgenden Grafik der MSE der jeweiligen Schätzer gegen m für $x_0 = 0.5$ abgetragen. Der MSE des Lwin-Marits-Schätzers liegt dabei oberhalb des dargestellten Bereichs. Die Graphen des Srivastava-Singh-Schätzers und des Hagwood-Schätzers liegen übereinander.

Abbildung 4.4: MSE in Abhängigkeit von m bei $x_0 = 0.5$

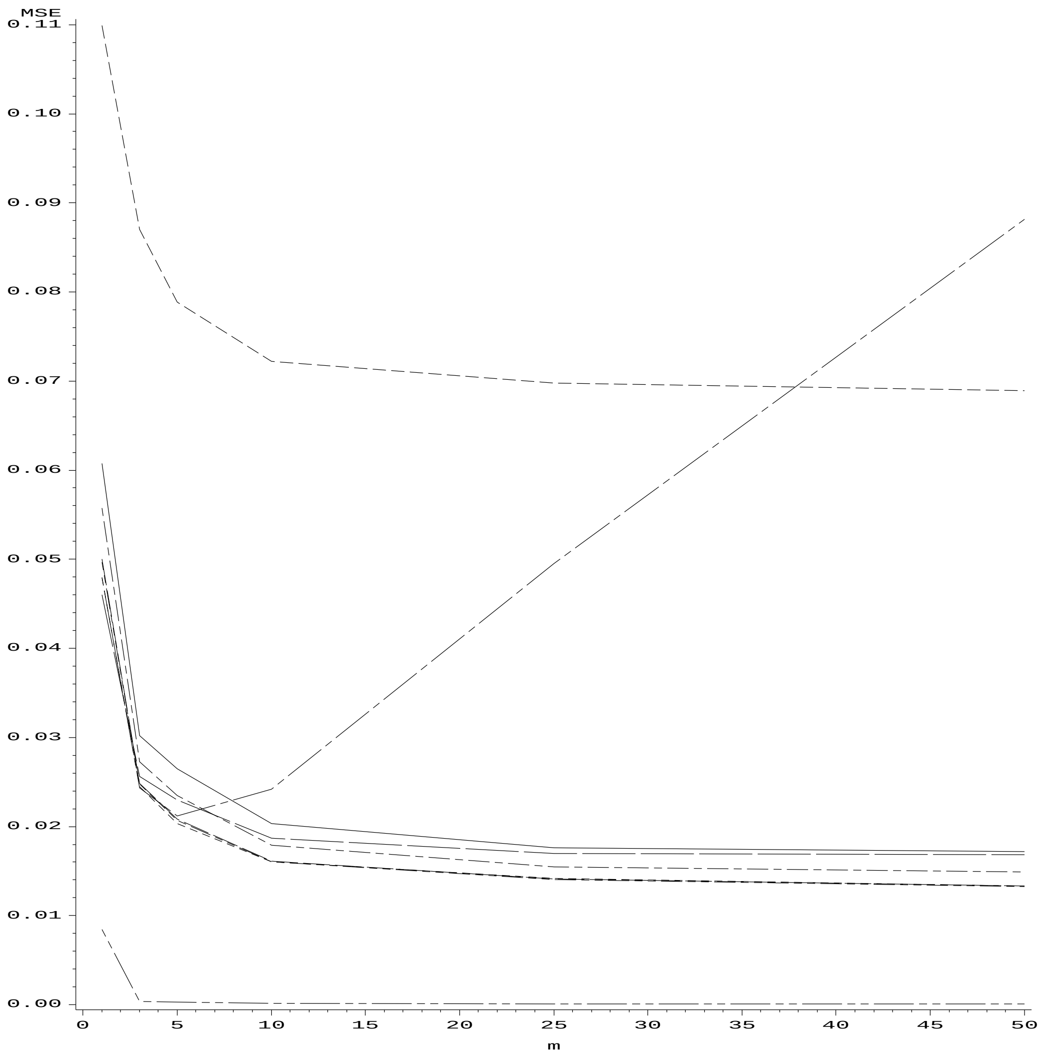


$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$

Abbildung 4.4 zeigt, daß der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ an der Stelle $x_0 = 0.5$ bei kleinen m überlegen ist, daß sich der Aitchison-Dunsmore-Schätzer diesem aber mit wachsendem m allmählich annähert. Die übrigen Schätzer haben einen deutlich größeren MSE.

Zum Vergleich zeigt die folgende Grafik das Verhalten der Schätzer bei $x_0 = 1$. In dieser Abbildung liegen die Graphen des inversen Schätzers, des Srivastava-Singh-Schätzers und des Hagwood-Schätzers übereinander.

Abbildung 4.5: MSE in Abhängigkeit von m bei $x_0 = 1.0$



: $\hat{X}_C$ | : $\hat{X}_I$ | : $\hat{X}_a$
: $\hat{X}_{au}$ | : $\hat{X}_H$ | : $\hat{X}_u$
: $\hat{X}_{AD}$ | : $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$ | : $\hat{X}_n$

$\sigma = 0.1,\ \alpha = 0,\ \beta = 0.5,\ x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$

Abbildung 4.5 zeigt, wie der MSE des Aitchison-Dunsmore-Schätzers $\hat{X}_{AD}$ nach anfänglicher Verbesserung dann mit wachsendem m zunehmend größer wird. Auch der deutliche Vorteil des Lwin-Maritz-Schätzers $\hat{X}_n$ an der Stelle $x_0 = 1$ sowie das vergleichsweise schlechte Abschneiden des Ali-Singh-Schätzers $\hat{X}_a$ an dieser Stelle sind zu erkennen.

4.7 Asymptotik der Schätzer für für große n

Das letzte Experiment dieser Arbeit gilt dem asymptotischen Verhalten der Schätzer bei großen n. Es wurden für die Parameter $\alpha = 0, \beta = 0.5, \sigma = 0.1$ und an verschiedenen Stellen x_0 jeweils 10000 Messungen für verschieden große Designvektoren durchgeführt. Es wurde das Endpunktdesign verwendet, also jeweils $n/2$ Beobachtungen an den Stellen null und eins. Zur Vereinfachung wurden in diesem Experiment nur gerade n verwendet. Bei ungeraden n bestünde das optimale Design laut Ott und Myers [24] aus einer Beobachtung bei $\bar{x}$ und jeweils $(n-1)/2$ an den Endpunkten des Kalibrationsbereichs.

Der zu schätzende Wert x_0 wurde in diesem Versuch auf die Werte $x_0 = 0.5$, 0.75, 1, 5 und 10 eingestellt. Die verwendeten Designgrößen sind $n = 4$, 6, 8, 10, 20, 50, 80, 100, 500, 1000, 5000, 10000 und 50000. Auch in diesem Fall kann davon ausgegangen werden, daß Werte von n in der Praxis wohl nicht die hier betrachteten Größenordnungen erreichen, so daß die in der folgenden Tabelle zusammegestellten Ergebnisse als Anhaltspunkt für das Verhalten der Schätzer für $n \to \infty$ dienen können.

Tabelle 4.13: Asymptotik der Schätzer für große n

	MSE								
n	$\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 0.5$									
4	0.02757	0.02272	0.00688	0.02501	0.02401	0.02475	0.01924	0.02272	0.16703
6	0.02164	0.01727	0.00251	0.01829	0.01916	0.02031	0.01562	0.01816	0.15814
8	0.01965	0.01533	0.00140	0.01600	0.01745	0.01876	0.01419	0.01653	0.15118
10	0.01807	0.01400	0.00093	0.01447	0.01612	0.01744	0.01320	0.01530	0.14843
20	0.01579	0.01197	0.00038	0.01217	0.01416	0.01552	0.01164	0.01345	0.14041
50	0.01416	0.01061	0.00010	0.01068	0.01274	0.01407	0.01049	0.01211	0.13441
80	0.01369	0.01022	0.00009	0.01027	0.01233	0.01364	0.01015	0.01172	0.13386
100	0.01375	0.01025	0.00006	0.01028	0.01238	0.01371	0.01020	0.01177	0.13364
500	0.01358	0.01009	0.00001	0.01010	0.01223	0.01357	0.01008	0.01163	0.13323
1000	0.01362	0.01013	0.00002	0.01013	0.01228	0.01362	0.01013	0.01168	0.13333
5000	0.01316	0.00978	0.00003	0.00978	0.01186	0.01316	0.00978	0.01128	0.13191
10000	0.01333	0.00991	0.00005	0.00991	0.01201	0.01333	0.00991	0.01143	0.13093
50000	0.01307	0.00971	0.00005	0.00971	0.01178	0.01307	0.00971	0.01120	0.13030
$x_0 = 0.75$									
4	0.03088	0.02465	0.05053	0.02726	0.02599	0.02685	0.02127	0.02465	0.06715
6	0.02426	0.01911	0.05141	0.02006	0.02098	0.02238	0.01782	0.01992	0.06336
8	0.02105	0.01660	0.05236	0.01712	0.01846	0.01993	0.01582	0.01758	0.06027
10	0.01931	0.01529	0.05293	0.01561	0.01705	0.01851	0.01477	0.01628	0.05881
20	0.01625	0.01315	0.05491	0.01324	0.01462	0.01596	0.01300	0.01404	0.05843
50	0.01441	0.01184	0.05648	0.01186	0.01308	0.01432	0.01179	0.01261	0.05766
80	0.01405	0.01156	0.05642	0.01157	0.01277	0.01399	0.01154	0.01232	0.05758
100	0.01384	0.01156	0.05667	0.01157	0.01265	0.01379	0.01154	0.01223	0.0577
500	0.01352	0.01124	0.05743	0.01124	0.01234	0.01351	0.01124	0.01193	0.05778
1000	0.01367	0.01132	0.05711	0.01132	0.01246	0.01366	0.01132	0.01204	0.05797
5000	0.01337	0.01110	0.05725	0.01110	0.01220	0.01337	0.01110	0.01179	0.05798
10000	0.01361	0.01120	0.05708	0.01120	0.01238	0.01361	0.01120	0.01195	0.05823
50000	0.01321	0.01096	0.05744	0.01096	0.01205	0.01321	0.01096	0.01164	0.05766
$\sigma = 0.1, \alpha = 0, \beta = 0.5, x = (0, \ldots, 0, 1, \ldots, 1), m = 3$									

Fortsetzung, Tabelle 4.13

n	MSE $\hat{X}_C$	$\hat{X}_I$	$\hat{X}_a$	$\hat{X}_{au}$	$\hat{X}_H$	$\hat{X}_u$	$\hat{X}_{AD}$	$\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$	$\hat{X}_n$
$x_0 = 1$									
4	0.04354	0.03320	0.09076	0.03691	0.03495	0.03626	0.02907	0.03320	0.00184
6	0.03067	0.02447	0.08380	0.02502	0.02591	0.02771	0.02400	0.02491	0.00059
8	0.02518	0.02088	0.07963	0.02087	0.02175	0.02350	0.02113	0.02106	0.00030
10	0.02203	0.01901	0.07495	0.01883	0.01935	0.02093	0.01949	0.01887	0.00012
20	0.01825	0.01697	0.06904	0.01677	0.01646	0.01785	0.01735	0.01624	0.00005
50	0.01533	0.01575	0.06569	0.01564	0.01429	0.01522	0.01594	0.01431	5.84E-6
80	0.01399	0.01472	0.06179	0.01465	0.01308	0.01392	0.01485	0.01314	0.00002
100	0.01417	0.01505	0.06316	0.01499	0.01332	0.01412	0.01516	0.01340	0.00001
500	0.01343	0.01437	0.05986	0.01435	0.01259	0.01342	0.01439	0.01267	5.72E-6
1000	0.01333	0.01454	0.06036	0.01453	0.01260	0.01332	0.01455	0.01273	0.00004
5000	0.01326	0.01473	0.06156	0.01473	0.01264	0.01326	0.01474	0.01281	0.00001
10000	0.01320	0.01468	0.06050	0.01468	0.01258	0.01320	0.01468	0.01275	7.21E-6
50000	0.01337	0.01466	0.06034	0.01466	0.01268	0.01337	0.01466	0.01282	9.17E-6
$x_0 = 5$									
4	1.30570	0.86835	1.29741	0.97896	0.89894	0.94366	0.87838	0.86835	18.0718
6	0.72521	0.56651	0.72017	0.52907	0.53089	0.58727	0.67410	0.52937	16.8829
8	0.50901	0.48426	0.50545	0.43298	0.39268	0.43697	0.58999	0.40653	16.4536
10	0.40052	0.45582	0.39772	0.40481	0.32200	0.35525	0.55156	0.34527	16.1881
20	0.19055	0.41317	0.18940	0.38026	0.18488	0.18049	0.47255	0.22708	16.0126
50	0.08169	0.39811	0.08130	0.38359	0.11026	0.08006	0.42314	0.16215	16
80	0.05473	0.39465	0.05452	0.38540	0.09148	0.05408	0.41041	0.14574	16
100	0.04691	0.39849	0.04684	0.39102	0.08807	0.04654	0.41121	0.14378	16
500	0.02045	0.39326	0.02049	0.39174	0.06782	0.02042	0.39586	0.12533	16
1000	0.01649	0.39459	0.01660	0.39382	0.06596	0.01648	0.39591	0.12416	16
5000	0.01424	0.39453	0.01435	0.39437	0.06424	0.01424	0.39479	0.12262	16
10000	0.01385	0.39695	0.01401	0.39687	0.06501	0.01385	0.39708	0.12386	16
50000	0.01305	0.39393	0.01316	0.39392	0.06326	0.01305	0.39396	0.12171	16
$x_0 = 10$									
4	5.54757	3.82625	5.53908	4.22768	3.93054	4.10298	3.78587	3.82625	95.1664
6	3.13450	2.46442	3.12944	2.29021	2.28879	2.53007	2.95213	2.29107	95.2975
8	2.17816	2.15093	2.17490	1.91558	1.71339	1.88336	2.62814	1.78941	95.744
10	1.64419	1.95412	1.64151	1.72534	1.33945	1.46104	2.38656	1.45324	96.0974
20	0.80459	1.79128	0.80322	1.64432	0.77463	0.75883	2.04761	0.96163	97.2222
50	0.30704	1.72775	0.30657	1.66325	0.44299	0.30051	1.83984	0.67613	99.0595
80	0.19716	1.73320	0.19687	1.69169	0.36880	0.19454	1.80385	0.61427	99.6713
100	0.15885	1.72739	0.15864	1.69406	0.34295	0.15723	1.78454	0.59153	99.7777
500	0.04316	1.73002	0.04313	1.72318	0.26398	0.04308	1.74178	0.52466	100
1000	0.02756	1.72902	0.02757	1.72559	0.25380	0.02754	1.73483	0.51599	100
5000	0.01598	1.73002	0.01602	1.72933	0.24620	0.01598	1.73118	0.50972	100
10000	0.01489	1.73035	0.01493	1.73001	0.2458	0.01489	1.73095	0.50947	100
50000	0.01377	1.72723	0.01380	1.72716	0.24379	0.01377	1.72735	0.50703	100
$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0,\ldots,0,1,\ldots,1)$, $m = 3$									

Der von Berkson [4] ermittelte AMSE für $n \to \infty$ des klassischen Schätzers (vgl. Gleichung 2.39 auf Seite 17) beträgt unter den vorliegenden Bedingungen

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_C) = 0.01\bar{3}. \tag{4.9}$$

Der AMSE des inversen Schätzers (vgl. Gleichung 2.40 auf Seite 17) beträgt hier

$$\mathrm{AMSE}(\hat{X}_I) \approx 0.0099 + 0.019 \cdot (0.5 - x_0)^2. \tag{4.10}$$

Dies ergibt für die untersuchten Werte von x_0

$$\begin{aligned}
\mathrm{AMSE}_{0.5}(X_I) &= 0.0099,\\
\mathrm{AMSE}_{0.75}(X_I) &= 0.0111,\\
\mathrm{AMSE}_{1.0}(X_I) &= 0.0147,\\
\mathrm{AMSE}_{5.0}(X_I) &= 0.3952,\\
\mathrm{AMSE}_{10.0}(X_I) &= 1.7269.
\end{aligned}$$

Sowohl der AMSE des klassischen Schätzers, als auch der des inversen Schätzers wird durch das Simulationsexperiment recht gut approximiert.

Mit Ausnahme des Ali-Singh-Schätzers an der Stelle $x_0 = 0.75$ werden alle Schätzer mit steigendem n besser. Der Naszódi-Schätzer nähert sich hierbei dem klassischen Schätzer an, der Aitchison-Dunsmore-Schätzer und der Srivastava-Singh-Schätzer dem inversen Schätzer. Bei $n = 4$ sind unter den vorliegenden Bedingungen der inverse Schätzer und der Hagwood-Schätzer identisch.

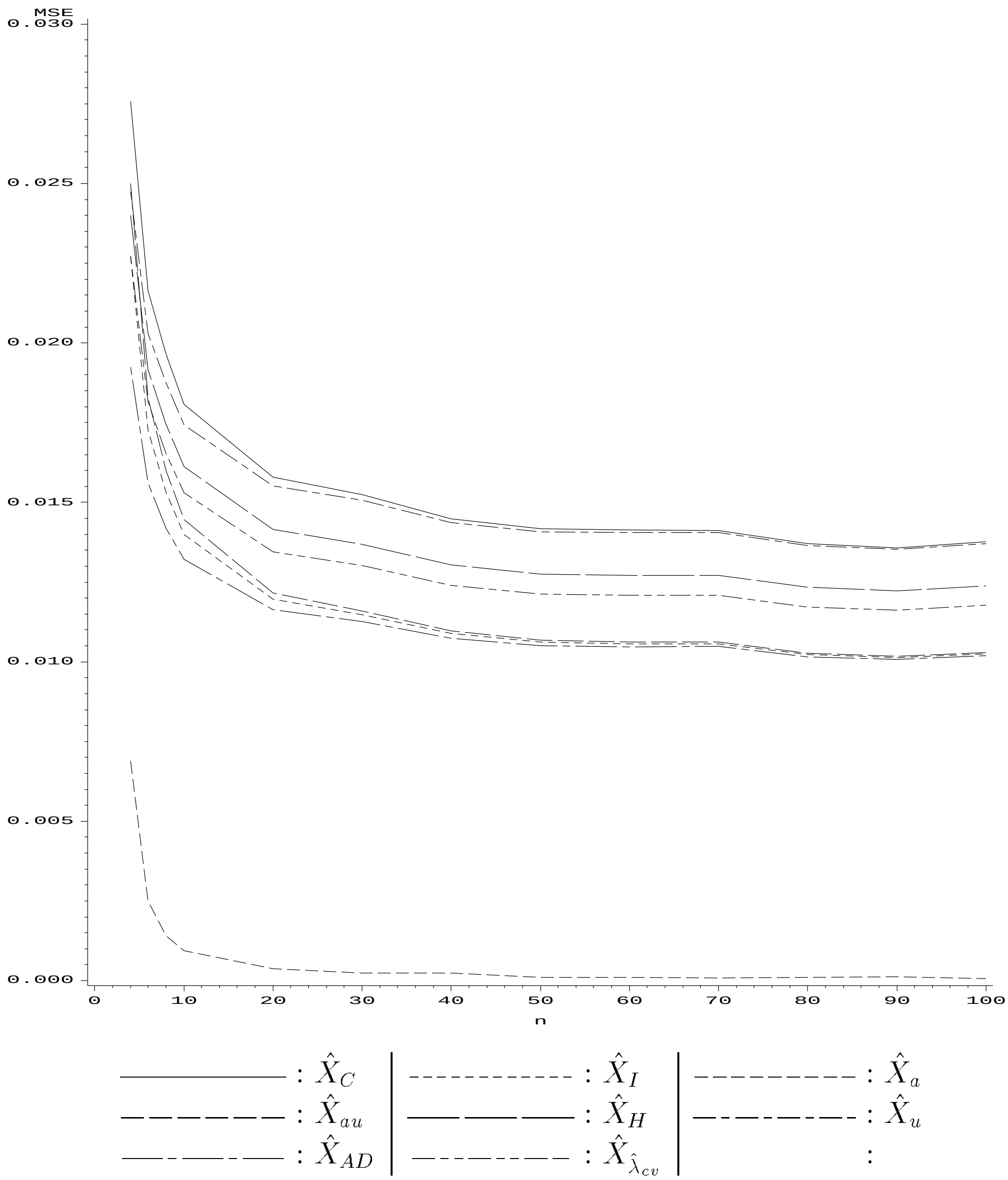
Der klassische Schätzer hat auch hier in allen Fällen größeren MSE als der Naszódi-Schätzer. Weitere allgemeine Vergleiche scheinen hier nicht sinnvoll.

Bei $x_0 = 0.5$ hat wieder der Ali-Singh-Schätzer den kleinsten MSE, gefolgt vom Aitchison-Dunsmore-Schätzer. Der inverse Schätzer und ab $n = 10$ auch der Srivastava-Singh-Schätzer sind hier nur geringfügig schlechter. Bei $x_0 = 0.75$ ist der Aitchison-Dunsmore-Schätzer optimal, gefolgt vom inversen Schätzer. Wiederum ist ab $n = 10$ auch der MSE des Srivastava-Singh-Schätzers fast ebenso gut. Bei $x_0 = 1$ ist auch hier der Lwin-Maritz-Schätzer nicht zu übertreffen. Unter den übrigen Schätzern ist bei $n = 4$ und $n = 6$ der Aitchison-Dunsmore-Schätzer der beste. Bei $n = 8$ und $n = 10$ hat der Srivastava-Singh-Schätzer den kleinsten MSE. Bei $n = 20$ ist jedoch der Hagwood-Schätzer optimal, und ab $n = 50$ liegt der Hagwood-Schätzer an zweiter Stelle hinter dem Halperin-Schätzer.

Bei $x_0 = 5$ ist zunächst für $n = 4$ der inverse Schätzer der beste, für $n = 6$ der Srivastava-Singh-Schätzer sowie für $n = 8$ und $n = 10$ der Halperin-Schätzer. Für $n = 20$ und alle größeren Werte von n hat dann der Naszódi-Schätzer den kleinsten MSE. An zweiter Stelle liegt im mittleren Bereich der Ali-Singh-Schätzer und für große n der klassische Schätzer. Bei $x_0 = 10$ ist für $n = 4$ der Aitchison-Dunsmore-Schätzer optimal, bei $n = 6$, $n = 8$ und $n = 10$ der Halperin-Schätzer und für alle größeren n wieder der Naszódi-Schätzer. Auch hier liegt für mittlere n der Ali-Singh-Schätzer an zweiter Stelle und für große n der klassische Schätzer.

Zur besseren Anschauung sind die Ergebnisse für $x_0 = 0.5$ in der folgenden Abbildung noch einmal graphisch dargestellt.

Abbildung 4.6: MSE in Abhängigkeit von n bei $x_0 = 0.5$



$\sigma = 0.1$, $\alpha = 0$, $\beta = 0.5$, $x = (0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$, $m = 3$

Obwohl nur Werte bis $n = 100$ eingezeichnet wurden, ist die Annäherung des Naszódi-Schätzers $\hat{X}_u$ an den klassischen Schätzer $\hat{X}_I$ sowie die Annäherung von Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$ und Srivastava-Singh-Schätzer $\hat{X}_{au}$ an den inversen Schätzer $\hat{X}_I$ bereits deutlich zu erkennen. Der MSE des Lwin-Maritz-Schätzers $\hat{X}_n$ liegt oberhalb des dargestellten Bereichs.

Auch bei diesem Experiment waren keine Stutzungen des Parameterschätzers b nötig. Die folgende Tabelle zeigt die Anzahlen der nicht berechenbaren Lwin-Maritz-Schätzungen.

Tabelle 4.14: Anzahl nicht berechenbarer $\hat{X}_n$ in Abhängigkeit von n und x_0

	x_0				
n	0.5	0.75	1	5	10
4	32	13	7	2302	7456
6	1	0	0	981	7525
8	0	0	0	504	7760
10	0	0	0	209	7946
20	0	0	0	14	8538
50	0	0	0	0	9505
80	0	0	0	0	9827
100	0	0	0	0	9883
500	0	0	0	0	10000
1000	0	0	0	0	10000
5000	0	0	0	0	10000
10000	0	0	0	0	10000
50000	0	0	0	0	10000

4.8 Die wichtigsten Ergebnisse

In dieser Studie wurden neun Schätzer anhand ihres mittleren quadratischen Fehlers unter verschiedenen Versuchsbedingungen verglichen. Der klassische Schätzer hat – wie bereits erwähnt – keinen endlichen MSE. Daher ist ein Vergleich anhand dieses Kriteriums zur Bewertung des klassischen Schätzers streng genommen ungeeignet. Da in der Vergangenheit jedoch bereits zahlreiche Untersuchungen den MSE auch für den klassischen Schätzer als Vergleichskriterium verwendet haben, wurde dieser der Vollständigkeit halber auch in diese Studie mit aufgenommen. Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß die entsprechenden Ergebnisse mit einer gewissen Vorsicht zu interpretieren sind.

Insgesamt erscheint der klassische Schätzer $\hat{X}_C$ in dieser Studie als einer der schlechtesten Schätzer. Er liegt häufig nur an siebter, achter oder letzter Stelle, und nur in 22 der hier untersuchten 348 Parameterkonstellationen ist er besser als an vierter Stelle. Lediglich bei Extrapolation und großem n ist der klassische Schätzer systematisch im Vorteil. Selbst in diesen Fällen wird er jedoch noch vom Naszódi-Schätzer übertroffen. In der Tat hat der Naszódi-Schätzer nur in einem einzigen Fall ($\beta = 100$, $x_0 = 1.2$ in Tabelle 4.8) größeren MSE als der klassische Schätzer. Diese Beobachtung deckt sich mit den früheren Studien, die MSE-Vergleiche angestellt haben. Nur in den Studien, die anhand der Pitman-Genauigkeit vergleichen, ist der klassische Schätzer zuweilen im Vorteil.

Das verhältnismäßig schlechte Abschneiden des klassischen Schätzers ist wenig überraschend. Einerseits ist der MSE theoretisch nicht endlich, andererseits sind die anderen Schätzer mit dem Ziel konstruiert worden, eine sinnvolle Alternative zu diesem Schätzer zu bieten.

Im Vergleich der beiden ältesten Schätzer ist der inverse Schätzer $\hat{X}_I$ dem klassischen Schätzer bis auf wenige Ausnahmen überlegen. Nur bei Extrapolation und großen n ist dies nicht der Fall. Im Vergleich aller Schätzer liegt der inverse Schätzer häufig an zweiter oder dritter Stelle. Außer bei großen m wird er jedoch innerhalb des Kalibrationsbereichs in den meisten Fällen durch den Aitchison-Dunsmore-Schätzer übertroffen.

Der Ali-Singh-Schätzer $\hat{X}_a$ hat im Zentrum des Kalibrationsbereichs einen deutlich kleineren MSE als die übrigen Schätzer. An den Grenzen des Kalibrationsbereichs und bei Extrapolation ist dieser Schätzer hingegen einer der schlechtesten. An der Stelle $x_0 = \bar{x}$ wird der Ali-Singh-Schätzer bei großen m vom Aitchison-Dunsmore-Schätzer übertroffen. Werte von m dieser Größenordnung werden jedoch in der Praxis wohl kaum vorkommen.

Der Srivastava-Singh-Schätzer $\hat{X}_{au}$ ist innerhalb des Kalibrationsbereichs eher mittelmäßig. Mit wenigen Ausnahmen liegt er dort an dritter bis achter Stelle. Bei Extrapolation ist der Srivastava-Singh-Schätzer im Vergleich zu den anderen Schätzern besser. Bei $m = 3$ liegt er hier noch oft an zweiter Stelle hinter dem Hagwood-Schätzer, bei größeren m liegt er jedoch fast immer an erster Stelle. Tabelle 4.13 zeigt allerdings, daß dies offenbar nur für $n = 6$ gilt.

Auch der Halperin-Schätzer $\hat{X}_H$ ist als mittelmäßig zu bezeichnen. Innerhalb des Kalibrationsbereichs liegt er fast immer an fünfter oder sechster Stelle. Bei Extrapolation ist auch dieser Schätzer im Vergleich zu den anderen etwas besser als im Kalibrationsbereich, in Einzelfällen liegt er sogar an erster Stelle. Der einzige systematischer Vorteil des Halperin-Schätzers scheint innerhalb des Kalibrationsbereichs bei $m = 1$ zu liegen, wo er mindestens Zweiter ist.

Der Naszódi-Schätzer $\hat{X}_u$ liegt ebenfalls in vielen Situationen nur an vierter bis siebter Stelle. Nur bei Extrapolation bei $\beta = 0.05$ (Tabelle 4.8) und vor allem bei Extrapolation und großen n hat dieser Schätzer den kleinsten MSE.

Der Aitchison-Dunsmore-Schätzer $\hat{X}_{AD}$ scheint im Kalibrationsbereich der vorteilhafteste Schätzer zu sein. In vielen betrachteten Fällen liegt er hier an erster oder zweiter Stelle. In der Nähe von $\bar{x}$ wird er zwar vom Ali-Singh-Schätzer übertroffen, jedoch läßt dessen überaus schlechtes Abschneiden weiter außen den Aitchison-Dunsmore-Schätzer als die bessere Wahl erscheinen. Größere Stichprobenumfänge im ersten Kalibrationsschritt lassen den Bereich, in dem der Aitchison-Dunsmore-Schätzer vorteilhaft ist, etwas kleiner werden, jedoch ist er auch dann dem Ali-Singh-Schätzer noch überlegen. Lediglich bei größeren m wird dieser Schätzer, wie bereits in Abschnitt 4.6 beschrieben, für alle x_0 außer $x_0 = \bar{x}$ deutlich schlechter. Falls m nicht größer ist als 10, scheint dieser Schätzer eine gute Wahl zu sein.

Der Hagwood-Schätzer $\hat{X}_{\hat{\lambda}_{cv}}$ liegt bei Interpolation meist an dritter bis sechster Stelle. Bei Extrapolation ist dieser Schätzer zumindest bei kleineren n einer der besten.

Der Lwin-Maritz-Schätzer $\hat{X}_n$ wurde in die Studie aufgenommen, um zu untersuchen, ob dieser Schätzer trotz der Tatsache, daß seine Modellvoraussetzungen unter den simulierten Bedingungen nicht exakt erfüllt sind, in der Anwendung möglicherweise dennoch akzeptable Ergebnisse liefert. In der Tat hat der Lwin-Maritz-Schätzer an den Grenzen des Kalibrationsbereichs sehr häufig den kleinsten MSE. In vielen Fällen treten jedoch bei der Berechnung dieses Schätzers Terme auf, die die numerische Präzision der Simulationssoftware überfordern. Desweiteren fällt auf, daß, auch wenn dies nicht der Fall ist, der MSE oft sehr nahe an $(x_0 - x_{(1)})^2$ bzw $(x_0 - x_{(n)})^2$ liegt. Dies gibt Anlaß zu der Vermutung, daß in diesen Fällen bei der Berechnung des Schätzers die Terme aus Gleichung 4.2 für die jeweils weiter entfernt liegenden x_i durch mangelnde Präzision der Software zu null werden, und der Schätzer bei Endpunktdesign dann den Wert des jeweils näher liegenden Extrems annimmt. Diese Probleme der Berechenbarkeit würden sicherlich auch bei der Berechnung des Schätzers in der praktischen Anwendung auftreten. Möglicherweise könnten sie durch einen modifizierten Algorithmus umgangen werden, doch liegt der Vorteil dieses Schätzers in einem so kleinen Bereich, daß eine Suche nach solch einem Algorithmus wenig lohnenswert erscheint. Ein weiterer Nachteil dieses Schätzers besteht darin, daß zur Berechnung des Schätzers alle x_i aus dem ersten Kalibrationsschritt erforderlich sind, während bei Verwendung der übrigen Schätzer nur bestimmte Kenngrößen – Parameter- oder Varianzschätzungen, Mittelwerte oder Quadratsummen – aus dem ersten Kalibrationsschritt gespeichert werden müssen. Insgesamt scheint dieser Schätzer für das vorliegende Problem ungeeignet zu sein.

4.9 Zusammenfassung und Ausblick

Abschließend muß festgestellt werden, daß auch diese Arbeit nicht vermag, eine allgemeingültige Antwort auf die Frage nach dem besten Kalibrationsschätzer zu geben.

Innerhalb des Kalibrationsbereichs bieten sich bei Messungen ohne Wiederholungen der Halperin-Schätzer und bei Messungen mit wenigen Wiederholungen der Aitchison-Dunsmore-Schätzer an. Auch der Ali-Singh-Schätzer kommt in Frage, falls mit einiger Sicherheit davon ausgegangen werden kann, daß der wahre Wert der unabhängigen Variable im Zentrum des Kalibrationsbereichs liegt.

Noch unklarer ist die Situation, wenn der zu schätzende Wert außerhalb des Kalibrationsbereichs liegt. Hier bieten sich wohl in erster Linie der Hagwood-Schätzer und der Halperin-Schätzer für kleine Stichproben und der Naszódi-Schätzer für große Stichproben an.

Die Wahl eines geeigneten Schätzers sollte also soweit möglich von den im Anwendungsfall vorliegenden Bedingungen abhängig gemacht werden.

Eine Fragestellung, die diese Arbeit aufwirft, besteht darin, ob der Aitchison-Dunsmore-Schätzer, der in der Vergangenheit nur sehr wenig untersucht wurde und der im MSE-Vergleich in der vorliegenden Studie durchaus in einigen Fällen recht gut abgeschnitten hat, auch dem Vergleich nach der Pitman-Genauigkeit standhält. Auch bleibt weiterhin die Frage offen, ob sich nicht ein Schätzer konstruieren läßt, der für einen Großteil der interessierenden Bedingungen der beste ist.

Da eine Simulationsstudie stets nur eine begrenzte Anzahl von denkbaren Versuchsbedingungen berücksichtigen kann, ist sicherlich auch bei den bekannten Schätzern noch genügend Anlaß für weitere Untersuchungen gegeben.

Anhang A

Das Simulationsprogramm

In diesem Abschnitt soll ein Beispiel für die verwendeten Simulationsprogramme vorgestellt werden.

Um in der Erprobungsphase sicherzustellen, daß Änderungen an der Berechnung der Schätzer mit geringem Aufwand einheitlich für alle Programme vorgenommen werden konnten, und um allgemein Fehler beim Kopieren von Programmcode auszuschließen, wurde die eigentliche Berechnung der Schätzer in einer eigenen Programmdatei abgelegt. Für jedes Simulationsexperiment wurde dann ein Rumpfprogramm geschrieben, das die gewünschten Versuchsbedingungen einstellt und mittels des Befehls **%include** **'kern.sas';** das Modul, das die Schätzerberechnung vornimmt, einbindet.

Die einzelnen Simulationsprogramme unterscheiden sich nur geringfügig, daher wird hier nur beispielhaft ein Programm vorgestellt, das für die Parameterwerte $\sigma = 0.1$, $\beta = 0.5$, $\alpha = 0$ und $x = (0, 0, 0, 1, 1, 1)$ an den Stellen x_0 =0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8 und 1.0 jeweils 10000 Kalibrationen und Schätzungen simuliert.

Wurde bei einem Experiment das Verhalten des MSE unter Veränderung eines Parameters untersucht, so wurde eine weitere Schleife in das Programm eingefügt. Beispielsweise wurde zur Berechnung der Tabelle 4.5 die Zuweisung $beta = 0.5$; durch die Anweisungen

```
do bet = 1 to 10;
    if bet = 1 then beta = 0.05;
    if bet = 2 then beta = 0.1;
        ⋮
    if bet = 9 then beta = 100;
```

ersetzt und an geeigneter Stelle das Schleifenende **end;** eingefügt.

A.1 Der Programmrumpf: Steuerung der Parameter

```
options linesize = 130;
proc iml worksize = 400;
    trials = 10000;
    alpha = 0.0;
    beta = 0.5;
    sigma = 0.1;
    n = 6;
    n2 = n / 2;
    m = 3;
    y0 = J(1,m,0);
    pi = 3.141592654;
    x1 = J(1,n2,0);
    x2 = J(1,n2,1);
    x = x1||x2;
    y = x * 0;
    phi = x * 0;
    meanx = sum(x) / n;
    sxx = ssq(x - meanx);
    xcv = ssq(x) / n;
    do xcount = 0 to 6;
        xecht = xcount / 5;
        if xcount = 6 then xecht = 0.5;
        ssec = 0;
        ssei = 0;
        ssea = 0;
        sseau = 0;
        sseh = 0;
        sseu = 0;
        ssen = 0;
        ssead = 0;
        ssel = 0;
        ntrunc = 0;
        nphi = 0;

        do i = 1 to trials;
            do j = 1 to n;
                y[j] = beta * x[j] + alpha + (normal(0) * sigma);
            end;
            meany = sum(y) / n;
```

```
        sxy = sum((x - meanx) # (y - meany));
        syy = ssq(y - meany);
        b = sxy / sxx;
        bc = b;
        if bc < 0.001 then do;
            ntrunc = ntrunc + 1;
            bc = 0.001;
        end;
        a = meany - b * meanx;
        ydach = a + b * x;
        hatsig2 = ssq(y - ydach) / (n - 2);
        hatsig = sqrt(hatsig2);
        do k = 1 to m;
            y0[k] = beta * xecht + alpha + (normal(0) * sigma);
        end;
        yneu = sum(y0) / m;
        Sy0 = ssq(y0 - yneu);

%include 'kern.sas';

        ssec = ssec + (xecht - xc) * (xecht - xc);
        ssei = ssei + (xecht - xi) * (xecht - xi);
        ssea = ssea + (xecht - xa) * (xecht - xa);
        sseau = sseau + (xecht - xau) * (xecht - xau);
        sseh = sseh + (xecht - xh) * (xecht - xh);
        sseu = sseu + (xecht - xu) * (xecht - xu);
        ssen = ssen + (xecht - xn) * (xecht - xn);
        ssead = ssead + (xecht - xad) * (xecht - xad);
        ssel = ssel + (xecht - xl) * (xecht - xl);
    end; /* trials */

    msec = ssec / trials;
    msei = ssei / trials;
    msea = ssea / trials;
    mseau = sseau / trials;
    mseh = sseh / trials;
    mseu = sseu / trials;
    msead = ssead / trials;
    msel = ssel / trials;
    msen = ssen / trials;
    print xecht beta msec msei msea mseau mseh mseu msead msel msen;
end; /* xcount */
quit;
```

A.2 Der Programmkern: Berechnung der Schätzer

```
/* Klassischer Schätzer */

    xc = meanx + (yneu - meany) / bc ;

/* Inverser Schätzer */

    xi = meanx + (yneu - meany) * (sxy / syy) ;

/* Ali/Singh */

    xa0 = xi;
    cutoff = 1;
    do until (cutoff < 0.001);
        delta = xa0 - meanx;
        lambda = b ** 2 * delta ** 2 / (b ** 2 * delta ** 2 + hatsig2);
        xa = meanx + (yneu - meany) * lambda * (sxx / sxy) ;
        cutoff = abs(xa0 - xa);
        xa0 = xa;
    end;

/* Srivastava/Singh */

    xau = xc / (n - 2) + xi * ((n - 3) / (n - 2));

/* Halperin */

    R = (b * sxx) / ( ( (n/m) * hatsig2 ) + (b * b * sxx) ) ;
    xh = meanx + (yneu - meany) * R;

/* Naszodi */

    eta = (b * sxx) / ( (b * b * sxx) + hatsig2 );
    xu = meanx + (yneu - meany) * eta ;

/* Aitchison/Dunsmore */

    xad = meanx + (yneu - meany) * ( Sxy / (Syy + Sy0)) ;

/* Hagwood */

    xl = meanx + (yneu - meany) * (Sxy / ( ( ( hatsig2 / xcv ) * sxx)
            + ( (Sxy * Sxy) / Sxx ) ) );
```

```
/* Lwin/Maritz */

    phiarg = (yneu - a - b * x) / hatsig;
    do j = 1 to n;
        phi[j] = 1/(sqrt(2 * pi)) * exp( - (phiarg[j] * phiarg[j]) / 2);
    end;
    nenner = sum(phi);
    if nenner = 0 then do;
        nenner = 1E-307;
        nphi = nphi + 1;
    end;
    xn = sum(x # phi) / nenner;
```

Tabellenverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] Ali, M.A. & Singh, N. (1981). An alternative estimator in inverse regression. *Journal of Statistical Computation and Simulation 14.* 1-15.

[2] Aitchison,J. & Dunsmore, I.R. Statistical Prediction Analysis, London: Cambridge University Press, 1975.

[3] Berkson, J. (1950). Are there two regressions? *Journal of the American Statistical Association 45* 164.

[4] Berkson, J. (1969). Estimation of a linear function for a calibration line: Consideration of a recent proposal. *Technometrics 11,* 649-660.

[5] Brown, P.J. (1982). Multivarate Calibration. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B 44, No. 3,* 287-321.

[6] Dahiya, R.C. & McKeon, J.J. (1991). Modified classical and inverse regression estimators in calibration. *Sankhyā: The Indian Journal of Statistics, Series B, 53* 48-55.

[7] Dunsmore, I.R. (1968) A Bayesian approach to calibration. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B 30,* 396-405.

[8] Eisenhart, C. (1939). The interpretation of certain regression methods and their use in biological and industrial research. *Annals of Mathematics and Statistics 10.* 162-186.

[9] Hagwood, Charles (1992). The calibration problem as an ill-posed inverse problem. *Journal of Statistical Planning and Inference 31*, 179-185.

[10] Halperin, M (1970). On inverse estimation in linear regression. *Technometrics 12,* 727-736.

[11] Hoadley, B. (1970). Bayesian look at inverse regression. *Journal of the American Statistical Association 65,* 356-369.

[12] Hunter, W.G. & Lamboy, W.F. (1979). Bayesian analysis of the linear calibration problem. *Technometrics 23,* 323-328.

[13] KRUTCHKOFF, R.G. (1967). Classical and inverse regression methods of Calibration. *Technometrics 9,* 425-439.

[14] KRUTCHKOFF, R.G. (1968). Letter to the Editor. *Technometrics 10,* 430-431.

[15] KRUTCHKOFF, R.G. (1969). Classical and inverse regression in extrapolation. *Technometrics 11,* 605-608.

[16] KRUTCHKOFF, R.G. (1970). Letter to the Editor. *Technometrics 12,* 433-434.

[17] KRUTCHKOFF, R.G. (1971). The calibration problem and closeness. *Journal of Statistical Computation and Simulation 1,* 87-95.

[18] LWIN, T. & J.S. MARITZ (1980) A note on the problem of statistical calibration. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B 29,* 135-141.

[19] LWIN, T. & J.S. MARITZ (1982). An analysis of the linear-calibration controversy from the perspective of compound estimation. *Technometrics 24,* 235-242.

[20] MARTINELLE, S. (1970). On the choice of regression in linear calibration. *Technometrics 12,* 157-161.

[21] NASZÓDI, L.J. (1978). Estimation of the bias in the course of calibration. *Technometrics 20,* 201-205.

[22] OMAN, S.D.(1985) An exact formula for the mean squared error of the inverse estimator in the linear calibration problem. *Journal of Statistical Planning and Inference 11,* 189-197.

[23] OSBORNE, C. (1991) Statistical Calibration: A Review, *International Statistical Review 59,3,* 309-336

[24] OTT, R.L. & MYERS, R.H. (1968) Optimal Experimental Designs for Estimating the Independent Variable in Regression. *Technometrics 10,* 811-823

[25] PERNG, S.K. (1987). A note on the inverse estimator for the linear calibration problem. *Communications in Statistics – Theory and Methods 16 (6),* 1743-1747.

[26] PITMAN,E. J. G. (1937) The "Closest" Estimates of Statistical Parameters. *Proceedings of the Cambridge Philosophocal Society 33,* 212 ff.

[27] RAMSAY, C. A. (1994) Kalibrationsschätzer im Vergleich der Pitman-Genauigkeit *Diplomarbeit, Fachbereich Statistik, Universität Dortmund*

[28] SAW, J.G. (1970) Letter to the Editor *Technometrics 12,* 429-430

[29] SCHEFFÉ, H. (1973). A Statistical Theory of Calibration. *Annals of Statistics 1,* 1-37.

[30] SHUKLA, G.K. (1972). On the problem of calibration. *Technometrics 14,* 547-553.

[31] SHUKLA, G.K. & P. DATTA (1985) Comparison of the inverse estimator with the classical estimator subject to a preliminary test in linear calibration. *Journal of Statistical Planning and Inference 12,* 93-102.

[32] SINGH, N. & V.K. SRIVASTAVA (1989) Small-Disturbance Asymptotic Theory for Linear-Calibration Estimators *Technometrics 31,* 373-378

[33] TALLIS, G.M. (1969). Note on a calibration problem. *Biometrika 56,* 505-508.

[34] THOMAS, M.A. & MYERS, R.H. (1973) Optimal designs for the inverse regression method of calibration. *Communications in Statistics 2,* 419-433

[35] TRACY, D.S. & V.K. SRIVASTAVA (1990). Comparison of some linear calibration estimators *Communications in Statistics – Theory and Methods 19(6),* 2281-2293.

[36] TURIEL, T.P. & HAHN, G.J. & TUCKER, W.T. (1982). New simulation results for the calibration and inverse median estimation problems *Communications in Statistics – Simulation and Computation* 11 (6), 677-713.

[37] WILLIAMS, E.J. (1969). A note on regression methods in calibration. *Technometrics 11,* 189-192.

[38] WILLIAMS, E.J. (1969). Regression methods in calibration problems. *Bulletins of the International Statistical Institute 43,* 17-28.

Programmierung und Textherstellung

[39] M. GOOSSENS, F. MITTELBACH, A. SAMARIN Der LaTeX-Begleiter, Addison-Wesley (Deutschland) GmbH, Bonn, 1994.

[40] U. GRÖMPING, M. HENNIG, J. KÜBLER, S. SCHACH Einführung in das Statistical Analysis System. Universität Dortmund, FB Statistik, 1991.

[41] KOPKA, H. LaTeX, Eine Einführung, 3. Auflage. Addison-Wesley (Deutschland) GmbH, Bonn, 1991.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig und nur mit Hilfe der angegebenen Quellen erstellt zu haben.

____________________________, Dortmund, im Dezember 1996.