PLÁNOVANIE REGRESNÉHO EXPERIMENTU

Predložený text bol spracovaný hlavne podľa [5],[6],[7].

1. Základné pojmy

Prvá fáza prípravy experimentu spočíva v stanovení cieľových parametrov a pokiaľ tieto nie su priamo observovateľné (merateľné), v stanovení dostatočneho počtu takých priamo observovateľných parametrov, ktoré sú vo vhodnom (vysvetlíme neskôr) známom funkčnom vzťahu s cieľovými parametrami. Vektor cieľových parametrov označme $\boldsymbol{\beta}$. Budeme predpokladať, že $\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{R}^k$. Priamo observovateľné (merateľné) teoreticky bezchybné parametre (veličiny) označme $\mu_1, \mu_2, ..., \mu_{N_0}$, teda počet priamo merateľných veličín je N_0. Ďalej predpokladáme, že poznáme funkciu $\mathbf{f}(\cdot): \quad \mathcal{R}^k \to \mathcal{R}^{N_0}$ (vyjadrujúcu merateľné parametre ako funkcie cieľových parametrov). Túto situáciu popisuje *teoretický model*

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = \begin{pmatrix} f_1(\boldsymbol{\beta}) \\ f_2(\boldsymbol{\beta}) \\ \vdots \\ f_{N_0}(\boldsymbol{\beta}) \end{pmatrix}.$$

Príklad 1.1. *Úlohou je stanoviť súradnice β_1, β_2 bodu $A \equiv (\beta_1, \beta_2)$, keď meriame vzdialenosti μ_1, μ_2, μ_3 (daných) bodov $B \equiv (x_1, y_1)$, $C \equiv (x_2, y_2)$ $D \equiv (x_3, y_3)$ od bodu A.*

Teoretický model merania je

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{(\beta_1 - x_1)^2 + (\beta_2 - y_1)^2} \\ \sqrt{(\beta_1 - x_2)^2 + (\beta_2 - y_2)^2} \\ \sqrt{(\beta_1 - x_3)^2 + (\beta_2 - y_3)^2} \end{pmatrix}.$$

Príklad 1.2. *Treba určiť váhu troch predmetov $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ na ručičkových váhach (majú jednu misku).*

Vážiť môžeme veličiny $\mu_1, ..., \mu_8$, pričom teoretický model váženia je

$$\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \\ \mu_7 \\ \mu_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_0 + \beta_1 \\ \beta_0 + \beta_2 \\ \beta_0 + \beta_3 \\ \beta_0 + \beta_1 + \beta_2 \\ \beta_0 + \beta_1 + \beta_3 \\ \beta_0 + \beta_2 + \beta_3 \\ \beta_0 + \beta_1 + \beta_2 + \beta_3 \end{pmatrix},$$

kde napr. μ_0 znamená, že vážime prázdne váhy, μ_5 znamená, že vážime spolu prvé a druhé závažie, atď. Stretli sme sa tu aj s novým fenoménom, a síce parametrom β_0. Je to nulový údaj váh (prázdne váhy). Voláme ho tzv. rušivým parametrom. Z našich úvah ho vylúčime, hoci z modelu merania ho vylúčiť nemôžeme.

V nasledujúcom budeme predpokladať, že teoretický model merania je lineárny (alebo linearizovaný) v cieľových parametroch, t.j.

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}'_1 \\ \mathbf{f}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{N_0} \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta}, \tag{1.1}$$

kde $\mathbf{F}$ je známa $N_0 \times k$ matica plánu, $\mathbf{f}'_i$ je jej $i-$ty riadok. Model z príkladu 1.2 je lineárny. Model z príkladu 1.1 vieme linearizovať. Ako ?

Príklad 1.1 - pokračovanie. *Nech* $x_1 = 0,00m$, $y_1 = 0,00m$; $x_2 = 2365,22m$, $y_2 = 0,00m$; $x_3 = 3603,67m$, $y_3 = 823,35m$. *Približné (namerané) hodnoty* $\mu_1 \approx 1980,102m$, $\mu_2 \approx 2040,243m$, $\mu_3 \approx 2598,878m$.

Z rovníc

$$1980,102 = \sqrt{(\beta_{10} - 0,00)^2 + (\beta_{20} - 0,00)^2}$$

$$2040,243 = \sqrt{(\beta_{10} - 2365,22)^2 + (\beta_{20} - 0,00)^2}$$

spočítame hodnoty β_{10} a β_{20}, z čoho dostávame

$$\beta_{10} = 1131,5m \quad \text{a} \quad \beta_{20} = 1625,0m.$$

Funkciu $\mathbf{f}$ linearizujeme (rozvinieme do Taylorovho radu a zanedbáme členy rádu druhého a vyšších) okolo hodnôt β_{10} a β_{20}, teda

$$\mu_i \approx \sqrt{(\beta_{10} - x_i)^2 + (\beta_{20} - y_i)^2} + \frac{\beta_{10} - x_i}{\sqrt{(\beta_{10} - x_i)^2 + (\beta_{20} - y_i)^2}} \delta\beta_1$$

$$+ \frac{\beta_{20} - y_i}{\sqrt{(\beta_{10} - x_i)^2 + (\beta_{20} - y_i)^2}} \delta\beta_2, \quad i = 1,2,3.$$

Dostávame linearizovaný model (1.1)

$$\begin{pmatrix} \mu_1 - 1980,131 \\ \mu_2 - 2040,267 \\ \mu_1 - 2598,897 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,571\delta\beta_1 + 0,821\delta\beta_2 \\ -0,605\delta\beta_1 + 0,796\delta\beta_2 \\ -0,951\delta\beta_1 + 0,308\delta\beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,571 & 0,821 \\ -0,605 & 0,796 \\ -0,951 & 0,308 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\beta_1 \\ \delta\beta_2 \end{pmatrix}$$

s (novými) parametrami $\delta\beta_1$ a $\delta\beta_2$.

Observovateľný parameter μ_i samozrejme nepoznáme presne. Výsledok jeho zmerania je číslo y_i, ktoré považujeme za realizáciu náhodnej veličiny Y_i. Váha tohto merania je λ_i a je nepriamo úmerná disperzii $\mathcal{D}(Y_i)$. Všetky merania považujeme v nasledujúcom za neskorelované. Dostávame sa k *stochastickému modelu merania.* V prípade, že práve jedenkrát (nezávisle) meriame každý priamo observovateľný parameter $\mu_i,\ i = 1, 2, ..., N_0$ a váhy jednotlivých meraní sú $\lambda_i,\ i = 1, 2, ..., N_0$, stochastický model merania je lineárny regresný model $(\mathbf{Y}_{N_0,1}, \mathbf{F}_{N_0,k}\boldsymbol{\beta}_{k,1}, \sigma^2\Lambda^{-1})$. Observačný vektor (vektor meraní) $\mathbf{Y}$ má vektor stredných hodnôt $\mathbf{F}\boldsymbol{\beta}$ a kovariančnú maticu $\sigma^2\boldsymbol{\Lambda}^{-1}$, kde

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{N_0} \end{pmatrix}.$$

Ďalšia fáza prípravy experimentu spočíva v rešpektovaní pravidiel optimálneho návrhu (regresného) experimentu, kedy odpovedáme na otázku, koľkokrát ktorý priamo observovateľný parameter treba merať, aby výsledok spracovania rešpektoval určité dopredu zadané kritéria optimality, napr. aby experiment pri zadanej presnosti cieľových parametrov bol čo najlacnejší, aby určité vybrané parametre boli odhadnuté s najväčšou možnou presnosťou, t.j. s minimálnou možnou disperziou ich odhadov, atď.

Príklad 1.3. *Každý priamo observovateľný parameter meriame práve jedenkrát.*

Lineárny regresný model merania je

$$(\mathbf{Y}_{N_0,1}, \mathbf{F}_{N_0,k}\boldsymbol{\beta}_{k,1}, \sigma^2\Lambda^{-1}),$$

teda stredná hodnota observačného vektora je

$$\mathcal{E}_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1' \\ \mathbf{f}_2' \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{N_0}' \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}$$

a jeho kovariančná matica je $\sigma^2\boldsymbol{\Lambda}^{-1}$. Najlepším lineárnym nevychýleným odhadom (NNLO) parametra $\boldsymbol{\beta}$ je $\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}) = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{Y}$. Kovariančná matica NNLO $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ je

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = \sigma^2(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{F})^{-1} =$$

$$= \sigma^2 \left\{ (\mathbf{f}_1, ..., \mathbf{f}_{N_0}) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{N_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1' \\ \mathbf{f}_2' \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{N_0}' \end{pmatrix} \right\}^{-1} = \sigma^2 \left\{ \sum_{i=1}^{N_0} \lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i' \right\}^{-1}.$$

Predpokladáme, že experiment je navrhnutý tak, že matica $\mathbf{F}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{F}$ je regulárna (váhy $\lambda_i,\ i = 1, 2, ..., N_0$ sú kladné a hodnosť matice $\mathbf{F}$, teda $h(\mathbf{F}) = k \leqq N_0$).

Príklad 1.4. *Vyberme r rôznych priamo observovateľných veličín $\mu_{i_1}, ..., \mu_{i_r}$. Veličinu μ_{i_j} merajme n_{i_j} krát, pričom všetkých meraní nech je opäť N_0, čiže* $\sum_{j=1}^{r} n_{i_j} = N_0$.

Observačný vektor a matica plánu v tomto prípade sú

$$
{}^*\mathbf{Y}_{N_0,1} = \begin{pmatrix} Y_{i_1,1} \\ \vdots \\ Y_{i_1,n_1} \\ Y_{i_2,1} \\ \vdots \\ Y_{i_2.n_2} \\ \vdots \\ Y_{i_r,1} \\ \vdots \\ Y_{i_r,n_r} \end{pmatrix}, \quad {}^*\mathbf{F}_{N_0,k} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}'_{i_1} \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{i_1} \\ \mathbf{f}'_{i_2} \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{i_2} \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{i_r} \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{i_r} \end{pmatrix}
$$

(riadok $\mathbf{f}'_{i_j}$ je práve n_{i_j} krát, $j = 1, 2, ..., r$). Matica váh observačného vektora je ${}^*\mathbf{\Lambda} = diag\{\lambda_{i_1}, ..., \lambda_{i_1}, \lambda_{i_2}, ..., \lambda_{i_2}, ..., \lambda_{i_r}, ..., \lambda_{i_r}\}$, pričom na diagonále je λ_{i_j} práve n_{i_j} krát, $j = 1, 2, ..., r$. Ľahko vidíme, že NNLO $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ je v tomto prípade

$$
\hat{\boldsymbol{\beta}}({}^*\mathbf{Y}) = ({}^*\mathbf{F}'\ {}^*\mathbf{\Lambda}\ {}^*\mathbf{F})^{-1}\ {}^*\mathbf{F}'\ {}^*\mathbf{\Lambda}\ {}^*\mathbf{Y} = ({}_*\mathbf{F}'\ {}_*\mathbf{\Lambda}\ {}_*\mathbf{F})^{-1}\ {}_*\mathbf{F}'\ {}_*\mathbf{\Lambda}\ {}_*\mathbf{Y} = \hat{\boldsymbol{\beta}}({}_*\mathbf{Y}),
$$

kde

$$
{}_*\mathbf{F}_{r,k} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}'_{i_1} \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{i_r} \end{pmatrix}, \quad {}_*\mathbf{\Lambda}_{r,r} = \begin{pmatrix} n_{i_1}\lambda_{i_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_{i_2}\lambda_{i_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & n_{i_r}\lambda_{i_r} \end{pmatrix}, \quad {}_*\mathbf{Y}_{r,1} = \begin{pmatrix} \overline{Y}_{i_1} \\ \vdots \\ \overline{Y}_{i_r} \end{pmatrix},
$$

pričom $\overline{Y}_{i_j} = \frac{1}{n_{i_j}} \sum_{t=1}^{n_{i_j}} Y_{i_j,t}$, $j = 1, 2, ..., r$, $Y_{i_j,1}, Y_{i_j,2}, ..., Y_{i_j,n_{i_j}}$ sú nezávislé merania veličiny μ_{i_j}. Kovariančná matica odhadu $\hat{\boldsymbol{\beta}}({}_*\mathbf{Y})$ je

$$
\mathbf{\Sigma}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = \sigma^2({}_*\mathbf{F}'\ {}_*\mathbf{\Lambda}\ {}_*\mathbf{F})^{-1} =
$$

$$
= \sigma^2 \left\{ (\mathbf{f}_{i_1}, ..., \mathbf{f}_{i_r}) \begin{pmatrix} n_{i_1}\lambda_{i_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_{i_2}\lambda_{i_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & n_{i_r}\lambda_{i_r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}'_{i_1} \\ \mathbf{f}'_{i_2} \\ \vdots \\ \mathbf{f}'_{i_r} \end{pmatrix} \right\}^{-1} =
$$

$$
= \sigma^2 \left(\sum_{j=1}^{r} n_{i_j}\lambda_{i_j} \mathbf{f}_{i_j} \mathbf{f}'_{i_j} \right)^{-1}.
$$

Zadefinujme si niektoré základné pojmy.

Definícia 1.5. *Funkcia*

$$\delta \ : \ \{1,2,...,N_0\} \ \rightarrow <0,1>$$

pre ktorú platí $\sum_{i=1}^{N_0} \delta(i) = 1$ *sa nazýva návrh, plán alebo projekt experimentu (design of experiment). Ak celkový počet meraní je* N*, potom číslo* $n_i = N\delta(i)$ *udáva počet opakovaných meraní hodnoty* μ_i*. Číslo* $\delta(i)$ *je relatívny počet replikácií (opakovaní) merania hodnoty* μ_i*.*

Definícia 1.6. *Množinu indexov* $Sp(\delta) = \{i : \ \delta(i) > 0\}$ *nazývame spektrom (suportom, nosičom) návrhu* δ*.*

Samozrejme $Sp(\delta) \subset \{1,2,...,N_0\}$. Meráme tie veličiny $\mu_{i_1}, \mu_{i_2}, ..., \mu_{i_r}$ spomedzi všetkých experimentálnych bodov (observovateľných veličín, parametrov), teda z množiny $\mathcal{E} = \{\mu_1, ..., \mu_{N_0}\}$, ktorých indexom plán δ priradil nenulovú hodnotu, čiže pre ktoré $\delta(i_j) > 0$.

Definícia 1.7. *Matica*

$$\mathbf{M}(\delta) = \sum_{i \in Sp(\delta)} \delta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i',$$

kde $\mathbf{f}_i'$ *je daný vektor, pre ktorý platí* $\mathbf{f}_i'\boldsymbol{\beta} = \mu_i$*, sa nazýva informačná matica experimentu pri návrhu* δ*.*

Definícia 1.8. *Majme* $\mathcal{E} = \{\mu_1, ..., \mu_{N_0}\}$ *(množinu priamo observovateľných parametrov) a návrh* δ*. Celkový počet meraní je* N*. Cieľové parametre sú* $\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{R}^k$*. Poznáme* $\mathbf{f}_i$ *- vektor, pre ktorý platí* $\mathbf{f}_i'\boldsymbol{\beta} = \mu_i$ *a* λ_i *- váhu merania veličiny* μ_i*,* $i = 1,2,...,N_0$*. Rešpektujeme plán* δ*, t.j. opakujeme* $n_i = N\delta(i)$ *krát meranie veličiny* μ_i*, ak prirodzené číslo* $i \in \ Sp(\delta)$*. Potom lineárny regresný model experimentu s (presným) návrhom* δ *je*

$$(\mathbf{Y}_\delta, \mathbf{F}_\delta\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\boldsymbol{\Lambda}_\delta). \tag{1.2}$$

Ak $\{i_1, ..., i_r\} = Sp(\delta)$*, tak matica* $\mathbf{F}_\delta$ *je vytvorená riadkami* $\mathbf{f}_{i_j}'$*,* $j = 1,2,...,r$ *a* $\boldsymbol{\Lambda}_\delta$ *je diagonálna matica*

$$\boldsymbol{\Lambda}_\delta = \begin{pmatrix} \lambda_{i_1} n_{i_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_{i_2} n_{i_2} & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{i_r} n_{i_r} \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \lambda_{i_1}\delta(i_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_{i_2}\delta(i_2) & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{i_r}\delta(i_r) \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{Y}_\delta$ *je* r *rozmerný náhodný vektor, ktorého* j *- ta súradnica je* $\{\mathbf{Y}_\delta\}_j = \frac{1}{n_j}(Y_{i_j,1} + Y_{i_j,2} + ... + Y_{i_j,n_{i_j}})$*,* $j = 1,2,...,r$*.*

Veta 1.9. *Majme lineárny regresný model (1.2) z definície 1.8. Platí*

1. Lineárny funkcionál $g(\cdot)$ *vektora parametrov* $\boldsymbol{\beta}$ *je (lineárne a nevychýlene) odhadnuteľný práve vtedy ak* $g(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{g}'\boldsymbol{\beta}$*, pričom*

$$\mathbf{g} \in \mathcal{M}(\mathbf{M}(\delta)) = \{\mathbf{M}(\delta)\mathbf{u} : \ \ \mathbf{u} \in \mathcal{R}^k\}.$$

2. Vektor parametrov $\boldsymbol{\beta}$ je (lineárne a nevychýlene) odhadnuteľný práve vtedy ak $\mathbf{M}(\delta)$ je regulárna matica.

3. Najlepší nevychýlený lineárny odhad (NNLO) parametra $\boldsymbol{\beta}$ je

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}_\delta) = (\mathbf{F}'_\delta \boldsymbol{\Lambda}_\delta \mathbf{F}_\delta)^{-1} \mathbf{F}'_\delta \boldsymbol{\Lambda}_\delta \mathbf{Y}_\delta.$$

4. Kovariančná matica NNLO $\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}_\delta)$ je

$$cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}_\delta), N) = \sigma^2 (\mathbf{F}'_\delta \boldsymbol{\Lambda}_\delta \mathbf{F}_\delta)^{-1} = \frac{\sigma^2}{N} \mathbf{M}^{-1}(\delta).$$

Dôkaz. Spravte ako cvičenie.

Pre experiment s cieľovými parametrami $\beta_1, ..., \beta_k$ a observovateľnými parametrami $\mu_1, ..., \mu_{N_0}$ možno určiť toľko návrhov, koľko je funkcií $\delta : \{1, 2, ..., N_0\} \to < 0, 1 >$ splňajúcich podmienku $\sum_{i=1}^{N_0} \delta(i) = 1$. Pre $N_0 \geqq 2$ je týchto funkcií nekonečne veľa. Triedu všetkých návrhov označme Δ. Návrh $\delta \in \Delta$ nazveme regulárnym, ak $det(\mathbf{M}(\delta)) \neq 0$. Triedu všetkých regulárnych návrhov označíme Δ_{reg}.

Príklad 1.10. *(podľa [7], str. 13) Majme tri predmety A_1, A_2, A_3, ktorých hmotnosti sú $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ (neznáme). Pomocou $N = 4$ vážení treba určiť (odhadnúť). na ručičkových váhach tieto hmotnosti.*

Vytvorme si teoretický model váženia podľa príkladu 1.2 a stochastický model podľa príkladu 1.3. $N_0 = 8$, $\mathcal{E} = \{\mu_1, ..., \mu_8\}$,

$$\mathbf{Y}_{8,1} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_8 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_{8,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{I}_{8,8}.$$

I. organizácia váženia (nazvime ju bežnou):

1. váženie - zistenie nulovej výchylky váh κ
2. váženie - váženie predmetu A_1
3. váženie - váženie predmetu A_2
4. váženie - váženie predmetu A_3

Podľa príkladu 1.2 sme si vybrali 4 observateľné veličiny, a síce $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4$. Počet všetkých vážení je $N = 4$, plán tohto (bežného) experimentu je δ_b, pre ktorý platí $\delta_b(1) = \delta_b(2) = \delta_b(3) = \delta_b(4) = \frac{1}{4}$, $\delta_b(5) = \delta_b(6) = \delta_b(7) = \delta_b(8) = 0$, teda $Sp(\delta_b) = \{1, 2, 3, 4\}$. Observačný vektor je $\mathbf{Y}_{\delta_b} = (Y_{1,1}, Y_{2,1}, Y_{3,1}, Y_{4,1})'$. Jeho stredná hodnota je

$$\mathbf{F}_{\delta_b} \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{\gamma},$$

pričom $\boldsymbol{\gamma} = (\kappa, \beta_1, \beta_2, \beta_3)'$. Matica váh meraní je $\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_b} = \mathbf{I}_{4,4}$. NNLO parametra $\boldsymbol{\gamma}$ je $(\mathbf{F}'_{\delta_b}\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_b}\mathbf{F}_{\delta_b})^{-1}\mathbf{F}'_{\delta_b}\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_b}\mathbf{Y}_{\delta_b}$ a kovariančná matica tohto odhadu je

$$\sigma^2(\mathbf{F}'_{\delta_b}\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_b}\mathbf{F}_{\delta_b})^{-1} = \frac{\sigma^2}{4}\mathbf{M}^{-1}(\delta_b) = \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

II. organizácia váženia (nazvime ju premyslenou):

1. váženie - váženie všetkých troch predmetov
2. váženie - váženie predmetu A_1
3. váženie - váženie predmetu A_2
4. váženie - váženie predmetu A_3

Tentokrát sme si vybrali 4 observateľné veličiny $\mu_8, \mu_2, \mu_3, \mu_4$. Počet všetkých vážení je opäť $N = 4$, plán (premysleného) experimentu je δ_p, pre ktorý platí $\delta_p(8) = \delta_p(2) = \delta_p(3) = \delta_p(4) = \frac{1}{4}$, $\delta_p(5) = \delta_p(6) = \delta_p(7) = \delta_p(1) = 0$, teda $Sp(\delta_p) = \{8, 2, 3, 4\}$. Observačný vektor je $\mathbf{Y}_{\delta_p} = (Y_{8,1}, Y_{2,1}, Y_{3,1}, Y_{4,1})'$. Jeho stredná hodnota je

$$\mathbf{F}_{\delta_p}\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\boldsymbol{\gamma},$$

$\boldsymbol{\gamma} = (\kappa, \beta_1, \beta_2, \beta_3)'$. matica váh meraní je opäť $\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_p} = \mathbf{I}_{4,4}$. NNLO parametra $\boldsymbol{\gamma}$ je $(\mathbf{F}'_{\delta_p}\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_p}\mathbf{F}_{\delta_p})^{-1}\mathbf{F}'_{\delta_p}\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_p}\mathbf{Y}_{\delta_p}$ a kovariančná matica tohto odhadu je

$$\sigma^2(\mathbf{F}'_{\delta_p}\boldsymbol{\Lambda}_{\delta_p}\mathbf{F}_{\delta_p})^{-1} = \frac{\sigma^2}{4}\mathbf{M}^{-1}(\delta_p) = \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & -0,5 & -0,5 & -0,5 \\ -0,5 & 1 & 0 & 0 \\ -0,5 & 0 & 1 & 0 \\ -0,5 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Keď porovnávame oba organizácie váženia (oba plány), vidíme, že pri oboch dostávame nevychýlené odhady neznámych hmotností $\beta_1, \beta_2, \beta_3$. Pri bežnom pláne majú tieto odhady disperzie $2\sigma^2$, pokial pri premyslenom pláne sú disperzie odhadov σ^2, teda menšie. Navyše pri premyslenom pláne sú odhady neskorelované.

2. Najdôležitejšie kritériá optimality

Návrh δ treba vybrať tak, aby spĺňal nejaké kritéruim. Máme napr. určiť čo najpresnejšie hodnotu $\mathbf{h}'\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta} \in \mathcal{R}^k$ ($\mathbf{h}$ je daný vektor). Merať môžeme N- krát. Za optimálny budeme považovať ten návrh δ^*, pre ktorý platí

$$\mathbf{h}'\mathbf{M}^{-1}(\delta^*)\mathbf{h} = min\{\mathbf{h}'\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{h} : \ \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Návrh δ^* v tomto prípade minimalizuje disperziu odhadu $\widehat{\mathbf{h}'\boldsymbol{\beta}}$.

V praxi sa najčastejšie vyskytujú tie kriteriálne funkcie, ktoré sú uvedené v nasledujúcom. Používa sa pre ne označenie $D-$optimalita (podľa slova dispersion), $A-$optimalita (average), $L-$optimalita, reštringovaná $A-$optimalita a reštringovaná $D-$optimalita. Iné kritériá pozri napr. v [7].

Definícia 2.1. *Zobrazenie* $L(\cdot):\ \mathcal{R}^k \to \mathcal{R}$ *je lineárny pozitívny funkcionál definovaný na priestore* $\mathcal{S}_k$ *symetrických matíc typu* $k \times k$, *pre ktorý platí*
(i) $\forall\{\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathcal{S}_k\}\ \ L(\mathbf{A}+\mathbf{B}) = L(\mathbf{A}) + L(\mathbf{B})$,
(ii) $\forall\{a \in \mathcal{R}\}\forall\{\mathbf{A} \in \mathcal{S}_k\}\ \ L(a\mathbf{A}) = aL(\mathbf{A})$,
(iii) $\forall\{\mathbf{A} \in \mathcal{S}_k:\ \mathbf{A}$ *je pozitívne definitná matica* $\}\ \ L(\mathbf{A}) > 0$.

Definícia 2.2. *Návrh* $\delta_D^* \in \Delta_{reg}$ *je* $D-$*optimálny ak*

$$det[\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)] = min\{det[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]:\ \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Definícia 2.3. *Návrh* $\delta_A^* \in \Delta_{reg}$ *je* $A-$*optimálny ak*

$$Tr[\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)] = min\{Tr[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]:\ \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Definícia 2.4. *Návrh* $\delta_L^* \in \Delta_{reg}$ *je* $L-$*optimálny ak*

$$L[\mathbf{M}^{-1}(\delta_L^*)] = min\{L[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]:\ \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Nech je vektorový parameter $\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{R}^k$ vyjadrený v tvare

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \boldsymbol{\beta}_2 \end{pmatrix},$$

kde $\boldsymbol{\beta}_1$ (užitočný parameter) je k_1 rozmerný a $\boldsymbol{\beta}_2$ (rušivý parameter) je k_2 rozmerný, pričom $k_1 + k_2 = k$. V súlade s týmto rozkladom je rozložená aj informačná matica a jej inverzia. Teda platí, že pri použití plánu δ a celkovom počte meraní N je kovariančná matica $cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}_1) = \dfrac{\sigma^2}{N}\mathbf{M}^{1,1}(\delta)$, kde

$$\mathbf{M}^{-1}(\delta) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}^{1,1}(\delta) & \mathbf{M}^{1,2}(\delta) \\ \mathbf{M}^{2,1}(\delta) & \mathbf{M}^{2,2}(\delta) \end{pmatrix}. \tag{2.1}$$

Definícia 2.5. *Návrh* $\delta_{D_r}^* \in \Delta_{reg}$ *je reštringovane* $D-$*optimálny ak*

$$det[\mathbf{M}^{1,1}(\delta_{D_r}^*)] = min\{det[\mathbf{M}^{1,1}(\delta)]:\ \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Definícia 2.6. *Návrh* $\delta_{A_r}^* \in \Delta_{reg}$ *je reštringovane* $A-$*optimálny ak*

$$Tr[\mathbf{M}^{1,1}(\delta_{A_r}^*)] = min\{Tr[\mathbf{M}^{1,1}(\delta)]:\ \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Trochu odlišné je kritérium $\boldsymbol{\Sigma}-$optimality.

Definícia 2.7. *Návrh* $\delta_\Sigma^* \in \Delta_{reg}$ *je* $\boldsymbol{\Sigma}-$*optimálny ak*

$$\left\|\boldsymbol{\Sigma} - \frac{\sigma^2}{N^*}\mathbf{M}^{-1}(\delta_\Sigma^*)\right\| = min\left\{\left\|\boldsymbol{\Sigma} - \frac{\sigma^2}{N}\mathbf{M}^{-1}(\delta)\right\|:\ \delta \in \Delta_{reg}, N = 1, 2, ...\right\},$$

kde $\mathbf{\Sigma}$ *je dopredu zadaná cieľová kovariančná matica výsledného odhadu vektorového parametra* $\boldsymbol{\beta}$*, pričom* $||\mathbf{A}|| = \sqrt{Tr(\mathbf{A}\mathbf{A}')}$.

V prípade $\mathbf{\Sigma}-$optimality hľadáme nielen plán δ^*_Σ, ale aj optimálny počet meraní N^*.

Kritérium $D-$optimality má nasledovnú interpretáciu:

Ak $\mathbf{Y}_\delta \sim N_n(\mathbf{F}_\delta\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{\Lambda}_\delta^{-1})$, tak $(1-\alpha)-$konfidenčný elipsoid pre vektor $\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{R}^k$ pri N meraniach je

$$\mathcal{E}_{1-\alpha}(\boldsymbol{\beta}) = \left\{\mathbf{u}: \ (\mathbf{u}-\hat{\boldsymbol{\beta}})' N \frac{\mathbf{F}'_\delta \mathbf{\Lambda}_\delta \mathbf{F}_\delta}{\sigma^2}(\mathbf{u}-\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leqq \chi^2_k(0; 1-\alpha)\right\}$$

a jeho objem je

$$V(\delta) = \frac{\pi^{\frac{k}{2}}}{\Gamma(1+\frac{k}{2})} \frac{[\chi^2_k(0;1-\alpha)]^{\frac{k}{2}}}{\sqrt{det[\frac{N}{\sigma^2}(\mathbf{F}'_\delta \mathbf{\Lambda}_\delta \mathbf{F}_\delta)]}}$$

(pozri [1], kapitola 11.12). Pretože

$$\frac{1}{\sqrt{det[\frac{N}{\sigma^2}(\mathbf{F}'_\delta \mathbf{\Lambda}_\delta \mathbf{F}_\delta)]}} = \frac{\sigma^k}{N^{\frac{k}{2}}}\sqrt{det[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]},$$

$D-$optimalita návrhu zaručuje minimálny objem konfidenčného elipsoidu. Pri použití tohoto kritéria je niekedy potrebné kontrolovať približnú guľatosť konfidenčného elipsoidu. Príliš veľké rozdiely medzi veľkosťami jeho hlavných poloosí môžu niekedy signalizovať nežiadúce vlastnosti návrhu. Na druhej strane $D-$optimalita má tzv. minimaxnú vlastnosť (pozri vetu 3.1 v kapitole 3). Táto vlastnosť návrhu δ môže byť v niektorých prípadoch veľmi dôležitá. Preto sa $D-$optimalita v praxi pomerne často používa.

Pretože

$$cov[\hat{\boldsymbol{\beta}}_\delta] = \frac{\sigma^2}{N}\mathbf{M}^{-1}(\delta),$$

$A-$optimálny plán minimalizuje súčet disperzií odhadov zložiek vektora $\boldsymbol{\beta}$.

Kritérium A ($A-$optimalita) je špeciálnym prípadom $L-$optimality, lebo $Tr(\cdot)$ je lineárny a pozitívny funkcionál. Pri riešení odhadu lineárnej funkcie $h(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{h}'\boldsymbol{\beta}$ s minimálnou disperziou odhadu (pozri začiatok tejto kapitoly) ide zase o $L-$optimálny plán, lebo funkcionál $L(\cdot)$ definovaný vzťahom $L(\mathbf{A}) = \mathbf{h}'\mathbf{A}\mathbf{h}$ ($\mathbf{h}$ je daný pevný vektor) je opäť pozitívny lineárny funkcionál.

Špeciálnym prípadom $L-$optimality je aj reštringovaná $A-$optimalita, keď minimalizujeme $Tr[\mathbf{M}^{1,1}(\delta)]$ (pozri (1.2)) vhodnou voľbou $\delta \in \Delta_{reg}$. Matica $\mathbf{M}^{1,1}(\delta)$ patrí parametrom, pre ktoré chceme minimalizovať súčet disperzií ich odhadov.

V prípade $\mathbf{\Sigma}-$optimality ide o maximálne priblíženie (v danej norme) matice $cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \dfrac{\sigma^2}{N}\mathbf{M}^{-1}(\delta)$ k cieľovej matici $\mathbf{\Sigma}$.

Okrem uvedených kritérií sa objavujú kritériá motivované špeciálnymi požiadavkami užívateľa. Obyčajne majú konvexnú (alebo konkávnu) kriteriálnu funkciu. Niekedy sa použije kritérium, ktoré je konvexnou kombináciou uvedených kritérií. Jedná sa o snahu udržať dobré vlastnosti oboch kritérií, alebo potlačiť nežiadúcu vlastnosť návrhu optimálneho podľa jedného kritéria priblížením k návrhu optimálneho podľa iného kritéria. Podrobná teória o kritériách optimality je napr. v [7], kde je uvedená aj bohatá literatúra o optimálnom navrhovaní regresného experimenta.

3. Vety o ekvivalencii pre niektoré kritériá optimality

Veta 3.1. *Nasledujúce tvrdenia sú ekvivalentné. 1. Návrh* $\delta_D^* \in \Delta_{reg}$ *je* $D-$*optimálny, teda* $det[\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)] = min\{det[\mathbf{M}^{-1}(\delta)] : \delta \in \Delta_{reg}\}$.

2. Návrh $\delta_D^* \in \Delta_{reg}$ *minimalizuje* $d(\delta) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\}$, *teda* $d(\delta_D^*) = min\{d(\delta) : \quad \delta \in \Delta_{reg}\}$.

3. $d(\delta_D^*) = k$ *(dimenzia vektora* $\boldsymbol{\beta}$*).*

Dôkaz. Dôkaz vety realizujeme nasledovným spôsobom: 1. $\Rightarrow$ 2. a súčasne 2. $\Leftrightarrow$ 3. a 2. $\Rightarrow$ 1.

1. $\Rightarrow$ 2. a súčasne 2. $\Leftrightarrow$ 3.

Nech $\delta_D^* \in \Delta_{reg}$ je $D-$optimálny, teda $det[\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)] = min\{det[\mathbf{M}^{-1}(\delta)] : \delta \in \Delta_{reg}\}$. Vezmime ľubovoľný návrh δ a $\alpha \in <0, 1)$. Návrh $\tilde{\delta} = (1-\alpha)\delta_D^* + \alpha\delta$ je podľa lemy 8.11 regulárny, pričom

$$\mathbf{M}(\tilde{\delta}) = \sum_{i \in Sp(\tilde{\delta})} [(1-\alpha)\delta_D^*(i) + \alpha\delta(i)]\lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i' = (1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_D^*) + \alpha \mathbf{M}(\delta).$$

Podľa lemy 8.12 je pre $\alpha \in <0, 1)$ funkcia $g(\alpha) = lndet\mathbf{M}(\tilde{\delta})$ spojitá diferencovateľná, pričom $g(0) = max\{g(\alpha) : \alpha \in <0, 1)\}$. Teda $g(0) \geqq g(\alpha)$ pre $\alpha \in <0, 1)$ a musí byť

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} g(\alpha) \leqq 0$$

(ide o deriváciu sprava). Dostávame (pomocou lemy 8.6)

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} lndet[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_D^*) + \alpha \mathbf{M}(\delta)] =$$

$$= \lim_{\alpha \to 0} Tr\{[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_D^*) + \alpha\mathbf{M}(\delta)]^{-1}[\frac{d}{d\alpha}((1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_D^*) + \alpha\mathbf{M}(\delta))]\} =$$

$$= Tr\{\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)[-\mathbf{M}(\delta_D^*) + \mathbf{M}(\delta)]\} = -Tr\mathbf{I}_{k,k} + Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)\mathbf{M}(\delta) =$$

$$= Tr[\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*) \sum_{i \in Sp(\delta)} \delta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i'] - k = \sum_{i \in Sp(\delta)} \delta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)\mathbf{f}_i - k \leqq 0,$$

teda

$$\sum_{i \in Sp(\delta)} \delta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)\mathbf{f}_i \leqq k. \tag{3.1}$$

Ak vezmeme jednobodový návrh δ so $Sp(\delta) = \{i_0\}$, tak z (3.1) pre $i_0 = 1, 2, ..., N_0$ je

$$\lambda_{i_0} \mathbf{f}_{i_0}' \mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)\mathbf{f}_{i_0} \leqq k,$$

čiže

$$d(\delta_D^*) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} \leqq k. \tag{3.2}$$

Pravda pre každý regulárny návrh $\delta \in \Delta_{reg}$ platí

$$k = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{M}(\delta) = Tr[\mathbf{M}^{-1}(\delta)\sum_{i=1}^{N_0} \lambda_i \delta(i)\mathbf{f}_i \mathbf{f}_i'] = \sum_{i=1}^{N_0} \delta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i. \tag{3.3}$$

Okrem toho pre každý $\delta \in \Delta_{reg}$ je

$$max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} \geqq k. \tag{3.4}$$

Dôkaz tvrdenia (3.4) vykonáme sporom. Ak by pre nejaký návrh $\eta \in \Delta_{reg}$ bolo

$$max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\eta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} < k,$$

tak

$$\sum_{i=1}^{N_0} \eta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\eta)\mathbf{f}_i \leqq \sum_{i=1}^{N_0} \eta(i) max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\eta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} =$$

$$= max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\eta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} \sum_{i=1}^{N_0} \eta(i) =$$

$$= max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\eta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} < k,$$

čo je v spore s (3.3). Z (3.2) a (3.4) pre δ_D^* (pretože $\delta_D^* \in \Delta_{reg}$) dostávame

$$k \leqq d(\delta_D^*) \leqq k,$$

čiže

$$d(\delta_D^*) = k = min\{d(\delta) : \quad \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Dokázali sme 1. $\Rightarrow$ 2. a tiež 2. $\Leftrightarrow$ 3.

2. $\Rightarrow$ 1.

Ak teda máme regulárny návrh $\delta \in \Delta_{reg}$, tak

$$d(\delta) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} \geqq d(\delta_D^*) = k,$$

kde δ_D^* je (ľubovoľný) $D-$optimálny návrh. Nech $\delta \in \Delta_{reg}$ minimalizuje

$$d(\delta) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\}$$

na množine Δ_{reg}. Musí byť

$$d(\delta) = k, \tag{3.5}$$

(lebo podľa (3.4) pre každý $\delta \in \Delta_{reg}$ je $d(\delta) \geqq k$ a pre (ľubovoľný) $D-$optimálny návrh δ_D^* je $d(\delta_D^*) = k$). Platí (pretože δ_D^* je $D-$optimálny)

$$0 < det\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*) \leqq det\mathbf{M}^{-1}(\delta),$$

teda (podľa lemy 8.9)

$$1 \leqq det\mathbf{M}(\delta_D^*)det\mathbf{M}^{-1}(\delta) = det[\mathbf{M}(\delta_D^*)\mathbf{M}^{-1}(\delta)] = \prod_{i=1}^{k} \gamma_i \tag{3.6}$$

($\gamma_1, ..., , \gamma_k$ sú vlastné hodnoty matice $\mathbf{M}(\delta_D^*)\mathbf{M}^{-1}(\delta)$, ktoré sú podľa lemy 8.8 reálne a kladné), čiže

$$1 \leqq \left(\prod_{i=1}^{k} \gamma_i\right)^{\frac{1}{k}}. \tag{3.7}$$

Na druhej strane podľa lemy 8.10, lemy 8.9 a (3.5) je

$$\left(\prod_{i=1}^{k} \gamma_i\right)^{\frac{1}{k}} \leqq \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} \gamma_i =$$

$$= \frac{1}{k} Tr\mathbf{M}(\delta_D^*)\mathbf{M}^{-1}(\delta) = \frac{1}{k} Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) \sum_{i \in Sp(\delta_D^*)} \delta_D^*(i)\lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i' =$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{i \in Sp(\delta_D^*)} \delta_D^*(i)\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i \leqq$$

$$\leqq \frac{1}{k} \sum_{i \in Sp(\delta_D^*)} \delta_D^*(i) max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} =$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{i \in Sp(\delta_D^*)} \delta_D^*(i) d(\delta) = \frac{1}{k} k \sum_{i \in Sp(\delta_D^*)} \delta_D^*(i) = 1, \tag{3.8}$$

z čoho dostávame

$$\prod_{i=1}^{k} \gamma_i = 1. \tag{3.9}$$

Zo vzťahov (3.6) a (3.9) máme

$$1 \leqq det\mathbf{M}(\delta_D^*)det\mathbf{M}^{-1}(\delta) \leqq 1,$$

teda

$$det\mathbf{M}(\delta_D^*) = det\mathbf{M}(\delta),$$

čo znamená, že

$$det\mathbf{M}(\delta) = max\{det\mathbf{M}(\mu) : \quad \mu \in \Delta_{reg}\},$$

alebo ekvivalentne

$$det\mathbf{M}^{-1}(\delta) = min\{det\mathbf{M}^{-1}(\mu) : \quad \mu \in \Delta_{reg}\}.$$

Dokázali sme 2. $\Rightarrow$ 1. a aj celú vetu. $\square$

Veta 3.2. *Nasledujúce tvrdenia sú ekvivalentné.*

1. Návrh $\delta_A^* \in \Delta_{reg}$ *je* $A-$*optimálny, teda* $Tr[\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)] = min\{Tr[\mathbf{M}^{-1}(\delta)] : \delta \in \Delta_{reg}\}$.

2. Návrh $\delta_A^* \in \Delta_{reg}$ *minimalizuje* $A(\delta) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]^2\mathbf{f}_i : \ i = 1, 2, ..., N_0\}$, *teda* $A(\delta_A^*) = min\{A(\delta) : \delta \in \Delta_{reg}\}$.

3. $A(\delta_A^*) = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)$.

Dôkaz. Dôkaz vety realizujeme nasledovným spôsobom: 1. $\Rightarrow$ 2., 1. $\Rightarrow$ 3., 2. $\Rightarrow$ 1., 3. $\Rightarrow$ 1.

1. $\Rightarrow$ 2.

Nech $\delta_A^* \in \Delta_{reg}$ je $A-$optimálny, teda $Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) = min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) : \ \delta \in \Delta_{reg}\}$. Vezmime ľubovoľný návrh δ a $\alpha \in < 0, 1)$. Návrh $\tilde{\delta} = (1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta$ je podľa lemy 8.11 regulárny, pričom

$$\mathbf{M}(\tilde{\delta}) = \sum_{i \in Sp(\tilde{\delta})} [(1-\alpha)\delta_A^*(i) + \alpha\delta(i)]\lambda_i \mathbf{f}_i\mathbf{f}_i' = (1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_D^*) + \alpha\mathbf{M}(\delta).$$

Pre $\alpha \in < 0, 1)$ je funkcia $h(\alpha) = Tr\mathbf{M}^{-1}(\tilde{\delta})$ spojitá diferencovateľná, pričom $h(0) = min\{h(\alpha) : \ \alpha \in < 0, 1)\}$. Teda $h(0) \leqq h(\alpha)$ pre $\alpha \in < 0, 1)$ a musí byť

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} h(\alpha) \geqq 0$$

(ide o deriváciu sprava). Pomocou dôsledku 8.4 (položíme tam $\mathbf{C} = \mathbf{I}$) dostávame

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} Tr\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta) =$$

$$= -\lim_{\alpha \to 0} Tr\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta)\left[\frac{d}{d\alpha}\mathbf{M}((1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta)\right]\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta) =$$

$$= -\lim_{\alpha \to 0} Tr\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta)\left[\frac{d}{d\alpha}[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_A^*) + \alpha\mathbf{M}(\delta)]\right]$$
$$\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta_A^* + \alpha\delta) =$$

$$= -Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)[-\mathbf{M}(\delta_A^*) + \mathbf{M}(\delta)]\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)[\mathbf{M}(\delta_A^*) - \mathbf{M}(\delta)]\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) \geqq 0. \tag{3.10}$$

Ak si vezmeme jednobodový návrh δ so spektrom $Sp(\delta) = \{i_0\}$, tak z (3.10) pre $i_0 = 1, 2, ..., N_0$ je

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)[\mathbf{M}(\delta_A^*) - \lambda_{i_0}\mathbf{f}_{i_0}\mathbf{f}_{i_0}']\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) - Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)\lambda_{i_0}\mathbf{f}_{i_0}\mathbf{f}_{i_0}'\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) - \lambda_{i_0}\mathbf{f}_{i_0}'\mathbf{M}^{-2}(\delta_A^*)\mathbf{f}_{i_0} \geqq 0,$$

čiže pre $i = 1, 2, ..., N_0$

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) \geqq \lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-2}(\delta_A^*)\mathbf{f}_i,$$

teda

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) \geqq max\{\lambda_i \mathbf{f}_i' \mathbf{M}^{-2}(\delta_A^*)\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} = A(\delta_A^*). \tag{3.11}$$

Pre ľubovoľný regulárny návrh $\delta \in \Delta_{reg}$ platí

$$\sum_{i=1}^{N_0} \delta(i)[\lambda_i Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta)] = Tr \sum_{i=1}^{N_0} \delta(i)\lambda_i \mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta) =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) \sum_{i=1}^{N_0} \delta(i)\lambda_i \mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta) = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{M}(\delta)\mathbf{M}^{-1}(\delta) = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta), \tag{3.12}$$

teda pre ľubovoľný regulárny návrh $\delta \in \Delta_{reg}$ je

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) = \sum_{i=1}^{N_0} \delta(i)[\lambda_i Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta)] \leqq$$

$$\leqq \sum_{i=1}^{N_0} \delta(i) max\{\lambda_i Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta) : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} =$$

$$= max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]^2\mathbf{f}_i : \quad i = 1, 2, ..., N_0\} = A(\delta),$$

čiže

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) \leqq A(\delta).$$

Z predpokladu $Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) = min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) : \quad \delta \in \Delta_{reg}\}$ teda

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) = min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta) : \quad \delta \in \Delta_{reg}\} \leqq min\{A(\delta) : \quad \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Ale z (3.11) máme

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) \geqq A(\delta_A^*).$$

Dostávame

$$A(\delta_A^*) \leqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) \leqq min\{A(\delta : \quad \delta \in \Delta_{reg}\},$$

čím sme dokázali 1. $\Rightarrow$ 2.

Súčasne musí byť

$$A(\delta_A^*) \leqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) = min\{A(\delta : \quad \delta \in \Delta_{reg}\}, \tag{3.13}$$

teda

$$A(\delta_A^*) = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) \tag{3.14}$$

a dokázali sme 1. $\Rightarrow$ 3.

Teraz 2. $\Rightarrow$ 1.

Nech $\delta^* \in \Delta_{reg}$ minimalizuje $A(\delta)$ na množine Δ_{reg}.Z predpokladu

$$TrM^{-1}(\delta^*) > min\{TrM^{-1}(\delta): \quad \delta \in \Delta_{reg}\} = TrM^{-1}(\delta_A^*) \tag{3.15}$$

vyplynie spor. Potom totiž musí existovať návrh δ, že pre funkciu

$$s(\alpha) = Tr\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\Delta^* + \alpha\delta), \quad \alpha \in <0,1)$$

platí

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} Tr\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta^* + \alpha\delta) < 0. \tag{3.16}$$

Keďže δ^* minimalizuje $A(\delta)$, je

$$max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]^2\mathbf{f}_i: \quad i = 1,2,...,N_0\} \leqq$$

$$\leqq max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)]^2\mathbf{f}_i: \quad i = 1,2,...,N_0\} =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) = min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta): \quad \delta \in \Delta_{reg}\}$$

a súčasne z platnosti (3.15) vyplýva (analogickou cestou ako odvodzovanie (3.10)), že

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} Tr\mathbf{M}^{-1}((1-\alpha)\delta^* + \alpha\delta) =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*)[\mathbf{M}(\delta^*) - \mathbf{M}(\delta)]\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) - Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*)[\sum_{i=1}^{N_0} \lambda_i \delta(i) \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i']\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) \geqq$$

$$\geqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) - max\{\lambda_i Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta^*)\} =$$

$$= Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) - A(\delta^*) \geqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*) - A(\delta^*) \geqq 0, \tag{3.17}$$

čiže (3.17) je v spore s (3.16). Z toho vyplýva, že nemôže platiť $Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) > Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*)$, čiže

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) \leqq min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta): \quad \delta \in \Delta_{reg}\} = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_A^*). \tag{3.18}$$

Samozrejme

$$min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta): \quad \delta \in \Delta_{reg}\} \leqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) \tag{3.19}$$

a dostávame, že

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^*) = min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta): \quad \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Dokázali sme 2. $\Rightarrow$ 1.

Konečne dokážeme sporom 3. $\Rightarrow$ 1.

Nech $\delta^{**} \in \Delta_{reg}$ je taký návrh, ktorý neminimalizuje $Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta)$, čiže

$$Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}) > Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{*}_{A}) = min\{Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta): \quad \delta \in \Delta_{reg}\}.$$

Potom ale musí existovať návrh δ, že $\tilde{\delta} = (1-\alpha)\delta^{**} + \alpha\delta$ má vlastnosť, že

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} Tr\mathbf{M}^{-1}(\tilde{\delta}) < 0. \tag{3.20}$$

Položme

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} Tr\mathbf{M}^{-1}(\tilde{\delta}) = d < 0. \tag{3.21}$$

Podobnou cestou ako pri odvodzovaní (3.17) a s využitím (3.12) a (3.21) dostávame

$$d = \lim_{\alpha \to 0} \frac{d}{d\alpha} Tr\mathbf{M}^{-1}(\tilde{\delta}) = Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}) - \sum_{i=1}^{N_0} \lambda_i \delta(i) Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**})\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}) \geqq$$

$$\geqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}) - max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**})]^2\mathbf{f}_i: \quad i = 1, 2, ..., N_0\},$$

čiže

$$d + max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**})]^2\mathbf{f}_i: \quad i = 1, 2, ..., N_0\} \geqq Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}),$$

alebo

$$-Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}) + max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**})]^2\mathbf{f}_i: \quad i = 1, 2, ..., N_0\} \geqq -d > 0,$$

teda

$$A(\delta^{**}) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'[\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**})]^2\mathbf{f}_i: \quad i = 1, 2, ..., N_0\} > Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta^{**}).$$

Dokázali sme 3. $\Rightarrow$ 1. aj celú vetu. $\square$

$A-$optimalita je špeciálnym prípadom $L-$optimality, keď funkcionál $L(\cdot)$ je definovaný pre daný pevný vektor $\mathbf{h} \in \mathcal{R}^k$ ako $L(\mathbf{A}) = \mathbf{h}'\mathbf{A}\mathbf{h}$ (pozri záver 2. kapitoly). Vetu o ekvivalencii pre $L-$optimálny návrh dokazujeme analogicky ako pre $A-$optimálitu (pozri [5], str. 68). Tu si ju len sformulujeme.

Veta 3.3. *Nasledujúce tvrdenia sú ekvivalentné.*

1. Návrh $\delta^*_L \in \Delta_{reg}$ *je* $L-$*optimálny, teda* $L[\mathbf{M}^{-1}(\delta^*_L)] = min\{L[\mathbf{M}^{-1}(\delta)]: \ \delta \in \Delta_{reg}\}$.

2. Návrh $\delta^*_L \in \Delta_{reg}$ *minimalizuje* $l(\delta) = max\{\lambda_i L[\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta)]: \quad i = 1, 2, ..., N_0\}$, *teda* $l(\delta^*_L) = min\{l(\delta): \ \delta \in \Delta_{reg}\}$.

3. $l(\delta^*_L) = L[\mathbf{M}^{-1}(\delta^*_L)]$.

Veta o ekvivalencii pre reštringovaný $A-$optimálny plán vyplýva z vety 3.3, keď minimalizujeme $L[\mathbf{M}^{-1}(\delta)] = Tr[\mathbf{M}^{1,1}(\delta)]$ (pozri (2.1).

Teraz si ešte uvedieme vetu o ekvivalencii pre reštringovaný $D-$optimálny plán.

Veta 3.4. *Nasledujúce tvrdenia sú ekvivalentné.*

1. Návrh $\delta^*_{D_r} \in \Delta_{reg}$ je reštringovane $D-$optimálny, teda $det[\mathbf{M}^{1,1}(\delta^*_{D_r})] = min\{det[\mathbf{M}^{1,1}(\delta)] : \delta \in \Delta_{reg}\}$.

2. Návrh $\delta^*_{D_r} \in \Delta_{reg}$ minimalizuje $d_r(\delta) = max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i - \lambda_i(\mathbf{f}_i^{(2)})'\mathbf{M}_{2,2}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i^{(2)} : \ i = 1,2,...,N_0\}$, teda $d_r(\delta^*_{D_r}) = min\{d_r(\delta) : \ \delta \in \Delta_{reg}\}$.

Tu $\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{\beta}_1', \boldsymbol{\beta}_2')'$ a rozklad $\mathbf{M}(\delta)$ a $\mathbf{f}_i$ zodpovedá rozkladu vektora $\boldsymbol{\beta}$ na jednotlivé subvektory,

$$\mathbf{M}(\delta) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,1}(\delta) & \mathbf{M}_{1,2}(\delta) \\ \mathbf{M}_{2,1}(\delta) & \mathbf{M}_{2,2}(\delta) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_i^{(1)} \\ \mathbf{f}_i^{(2)} \end{pmatrix}.$$

3. $d_r(\delta^*_{D_r}) = k_1$ (dimenzia vektora $\boldsymbol{\beta}_1$).

Dôkaz. je zložitejší a vynechávame ho (pozri [2], str. 115).

Skúsený užívateľ môže na základe intuície alebo predchádzajúcich skúseností vypracovať taký návrh, že je blízko optimálneho (podľa zvoleného kritéria optimality). Napr. ak $max\{\lambda_i \mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta^*)\mathbf{f}_i : \quad i = 1,2,...,N_0\}$ je len nepodstatne väčší ako dimenzia k vektora $\boldsymbol{\beta}$, potom návrh δ^* je z hľadiska praktického použitia $D-$optimálny a nemusíme ho už nijako vylepšovať.

Podobne uvažujeme i pri ostatných vyššieuvedených kritériách. Používame pritom 3. tvrdenia viet o ekvivalencii.

Ak predbežný návrh výrazne nesplňa požiadavku 3. tvrdenia príslušnej vety o ekvivalencii, potom tento návrh iteračne vylepšíme postupom uvedeným v ďalšej kapitole.

4. Iteračné určenie optimálneho návrhu

Lema 4.1. *Nech $d(i,\delta) = \mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta)\mathbf{f}_i$, pričom $\delta \in \Delta_{reg}$* a *$i \in \{1,2,...,N_0\}$. Pre ľubovoľný plán $\delta \in \Delta_{reg}$, $i \in \{1,2,...,N_0\}$* a *$\alpha \in (0,1)$ platí*

$$det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta) + \alpha\lambda_i \mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'] = (1-\alpha)^k \left\{1 + \frac{\alpha}{(1-\alpha)}\lambda_i d(i,\delta)\right\} det\mathbf{M}(\delta).$$

Dôkaz. Ak si zvolíme v leme 8.14 $\mathbf{A} = (1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)$, $\mathbf{B} = \sqrt{\alpha\lambda_i}\mathbf{f}_i$, $\mathbf{C} = -\sqrt{\alpha\lambda_i}\mathbf{f}_i'$, $\mathbf{D} = 1$, dostávame z rovnosti $det\mathbf{A}det(\mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}) = det\mathbf{D}det(\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})$ tvrdenie lemy. $\square$

Lema 4.2. *Nech $\delta \in \Delta_{reg}$, $\delta \neq \delta^*_D$. Potom*

$$max\{det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta) + \alpha\lambda_i \mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'] : \ \alpha \in (0,1), i = 1,2,...,N_0\} =$$

$$= \left(\frac{\lambda_{i^*} d(i_*,\delta)}{k}\right)^k \left(\frac{k-1}{\lambda_{i^*} d(i_*,\delta) - 1}\right)^{k-1} det\mathbf{M}(\delta) > det\mathbf{M}(\delta),$$

pričom i^* je také číslo z množiny $\{1,2,...,N_0\}$, že

$$\lambda_{i^*} d(i^*,\delta) = max\{\lambda_i d(i,\delta) : \ i = 1,2,...,N_0\}.$$

Dôkaz. Z lemy 4.1 je vidieť, že $det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)+\alpha\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i']$ je rastúca funkcia veličiny $\lambda_i d(i,\delta)$ (táto veličina nezávisí od α). Aby sme (pre daný plán $\delta \in \Delta_{reg}$) dosiahli maximum $det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)+\alpha\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i']$, musíme použiť hodnotu $\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)$ a maximalizovať $(1-\alpha)^k\left\{1+\frac{\alpha}{(1-\alpha)}\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)\right\}det\mathbf{M}(\delta)$ vzhľadom na α. Budeme maximalizovať $lndet[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)+\alpha\lambda_{i^*}\mathbf{f}_{i^*}\mathbf{f}_{i^*}']$ vzhľadom na α.

$$\frac{d}{d\alpha}lndet[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)+\alpha\lambda_{i^*}\mathbf{f}_{i^*}\mathbf{f}_{i^*}'] =$$

$$= \frac{d}{d\alpha}\left\{k\,ln(1-\alpha)+ln\left\{1+\frac{\alpha}{(1-\alpha)}\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)\right\}+lndet\mathbf{M}(\delta)\right\} =$$

$$= -\frac{k}{1-\alpha}+\frac{1}{1-\alpha}\frac{\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)}{1-\alpha+\alpha\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)} = 0,$$

čiže

$$\alpha^* = \frac{\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)-k}{[\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)-1]k}.$$

Pretože z predpokladu návrh δ nie je $D-$optimálny, musí byť $\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)-k>0$, teda $\alpha^*>0$. Ľahko sa presvedčíme, že

$$\frac{d^2}{d\alpha^2}lndet[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)+\alpha\lambda_{i^*}\mathbf{f}_{i^*}\mathbf{f}_{i^*}']\Big|_{\alpha=\alpha^*} < 0,$$

čiže takto určený extrém je maximum. Teda

$$max\{det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta)+\alpha\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i'] :\ \alpha\in(0,1), i=1,2,...,N_0\} =$$

$$= max\{(1-\alpha)^k\left\{1+\frac{\alpha}{(1-\alpha)}\lambda_i d(i,\delta)\right\}det\mathbf{M}(\delta) :\quad \alpha\in(0,1), i=1,2,...,N_0\} =$$

$$= (1-\alpha^*)^k\left\{1+\frac{\alpha^*}{(1-\alpha^*)}\lambda_{i^*}d(i^*,\delta)\right\}det\mathbf{M}(\delta) =$$

$$= \left(\frac{\lambda_{i^*}d(i_*,\delta)}{k}\right)^k\left(\frac{k-1}{\lambda_{i^*}d(i_*,\delta)-1}\right)^{k-1}det\mathbf{M}(\delta) > det\mathbf{M}(\delta). \qquad \square$$

Veta 4.3. *Nech pre postupnosť plánov $\delta_0,\delta_1,...$ platí*

$$\delta_{s+1} = (1-\alpha_{s+1}^*)\delta_s+\alpha_{s+1}^*\lambda_{i_{s+1}^*}\mathbf{f}_{i_{s+1}^*}\mathbf{f}_{i_{s+1}^*}',$$

pričom i_{s+1}^* je určené z rovnice

$$\lambda_{i_{s+1}^*}d(i_{s+1}^*,\delta_s) = max\{\lambda_i d(i,\delta_s) :\ i=1,2,...,N_0\} =$$

$$= max\{\lambda_i\mathbf{f}_i'\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_i :\quad i=1,2,...,N_0\}$$

a

$$\alpha_{s+1}^* = \frac{\lambda_{i_{s+1}^*} d(i_{s+1}^*, \delta_s) - k}{[\lambda_{i_{s+1}^*} d(i_{s+1}^*, \delta_s) - 1]k}.$$

Nech $\delta_i \neq \delta_D^*,\ i = 1, 2, ...,$ *potom*

$$\lim_{s \to \infty} det\mathbf{M}(\delta_s) = det\mathbf{M}(\delta_D^*).$$

Dôkaz. je zložitý a potrebuje hlbšie vniknúť do teórie, pozri napr. [7],[2]. Preto ho tu vynecháme.

V predchádzjúcich tvrdeniach opísaná optimálna voľba čísel $\alpha_s^*,\ s = 1, 2, ...,$ je dosť zložitá. Jednoduchší postup pre voľbu čísel α_s a tiež iteračný postup, ktorý sa osvedčil v praxi je nasledovný.

Nech δ_0 je štartovací návrh. Prvé zlepšenie, ktoré vedie k navrhu δ_1 je konvexná kombinácia plánu δ_0 a vhodne zvoleného "jednobodového" návrhu δ_1^* so spektrom $Sp(\delta_1^*) = \{i_1^*\}$, teda

$$\delta_1 = (1 - \alpha_0)\delta_0 + \alpha_0 \delta_1^*, \quad \alpha_0 \in (0, 1).$$

Návrh δ_2 je opäť konvexná kombinácia plánu δ_1 a vhodne zvoleného "jednobodového" návrhu δ_2^* so spektrom $Sp(\delta_2^*) = \{i_2^*\}$, teda

$$\delta_2 = (1 - \alpha_1)\delta_1 + \alpha_1 \delta_2^*, \quad \alpha_1 \in (0, 1).$$

Takto postupujeme, až získame návrh δ_{opt}, ktorý spĺňa zvolené kritérium optimality dostatočne presne.

Voľba štartovacieho návrhu δ_0, voľba čísel $\alpha_0, \alpha_1, ...$ a voľba postupnosti $i_1^*, i_2^*, ...,$ je daná nasledujúcimi pravidlami.

Nech $Sp(\delta_0) = \{i_1, i_2, ..., i_k\}$ a hodnoty návrhu δ_0 v bodoch spektra nech sú $\delta_0(i) = \dfrac{1}{k},\ i \in Sp(\delta_0)$. Je vhodné, aby štartovací plán mal v spektre práve k indexov, alebo len o málo väčší počet indexov ako k (k je dimenzia vektora parametrov $\boldsymbol{\beta}$). Voľba štartovacieho plánu δ_0 musí byť taká aby jeho informačná matica $\mathbf{M}(\delta_0)$ bola regulárna. Regularita tejto matice je ekvivalentná nevychýlenej (nestrannej) odhadnuteľnosti vektora parametrov $\boldsymbol{\beta}$ (pozri vetu 1.9). V ďalšom budeme pokračovať tak, že počet bodov spektra štartovacieho plánu bude rovný k. ľahko sa dajú upraviť nižšie uvedené vzťahy pre prípad inej voľby (väčšieho počtu) bodov spektra štartovacieho plánu.

Ak $i_1^* \in Sp(\delta_0)$, potom zrejme $Sp(\delta_1) = Sp(\delta_0)$. Hodnoty $\delta_1(j)$ zvolíme podľa nasledujúceho pravidla

$$\delta_1(j) = \begin{cases} \dfrac{2}{k+1}, & \text{ak } j = i_1^*, \\ \dfrac{1}{k+1}, & \text{ak } j \neq i_1^* \text{ a súčasne } j \in Sp(\delta_0), \\ 0, & \text{inak.} \end{cases}$$

Ak $i_1^* \notin Sp(\delta_0)$, potom $Sp(\delta_1) = Sp(\delta_0) \cup \{i_1^*\}$ a

$$\delta_1(j) = \begin{cases} \dfrac{1}{k+1}, & \text{ak } j = i_1^*, \\ \dfrac{1}{k+1}, & \text{ak } j \neq i_1^* \text{ a súčasne } j \in Sp(\delta_0), \\ 0, & \text{inak.} \end{cases}$$

Úplne analogicky postupujeme v ďalších iteráciach.

Ak $Sp(\delta_p) = \{i_1, i_2, ..., i_{k_p}\}$ a $i_{p+1}^* \in Sp(\delta_p)$, potom

$$Sp(\delta_{p+1}) = Sp(\delta_p),\ \ \delta_{p+1}(i_{p+1}^*) = \frac{(k+p)\delta_p(i_{p+1}^*) + 1}{k+p+1}$$

a pre ostatné indexy $j \in Sp(\delta_p)$ je

$$\delta_{p+1}(j) = \frac{(k+p)\delta_p(j)}{k+p+1}.$$

Ak $i_{p+1}^* \notin Sp(\delta_p)$, potom

$$Sp(\delta_{p+1}) = Sp(\delta_p) \cup \{i_{p+1}^*\}$$

a pre $j \in Sp(\delta_p)$ je

$$\delta_{p+1}(j) = \frac{(k+p)\delta_p(j)}{k+p+1}$$

a pre i_{p+1}^* je

$$\delta_{p+1}(i_{p+1}^*) = \frac{1}{k+p+1}.$$

Takto popísaný postup, ktorý určuje $\delta_{p+1} = (1 - \alpha_{p+1})\delta_p + \alpha_{p+1}\delta_{p+1}^*$, dáva pre čísla α vzťahy $\alpha_p = \dfrac{1}{k+p+1}$, $p = 0, 1, 2, ...$. V literatúre [7],[2] sú i iné voľby čísel $\alpha_0, \alpha_1, ...$.

Určenie postupnosti $i_1^*, i_2^*, ...,$ pri jednotlivých kritériach optimality:

D−optimalita:

$$\lambda_{i_{s+1}^*} \mathbf{f}'_{i_{s+1}^*} \mathbf{M}^{-1}(\delta_s) \mathbf{f}_{i_{s+1}^*} = max\{\lambda_j \mathbf{f}'_j \mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_j : \quad j = 1, 2, ..., N_0\},$$

$s = 0, 1, 2, ...$.

Reštringovaná D−optimalita pre určenie prvých k_1 súradníc vektora $\boldsymbol{\beta}$:

$$\lambda_{i_{s+1}^*}[\mathbf{f}'_{i_{s+1}^*} \mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_{i_{s+1}^*} - (\mathbf{f}^{(2)}_{i_{s+1}^*})' \mathbf{M}^{-1}_{2,2}(\delta_s) \mathbf{f}^{(2)}_{i_{s+1}^*}] =$$

$$= max\{\lambda_j[\mathbf{f}'_j \mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_j - (\mathbf{f}^{(2)}_j)' \mathbf{M}^{-1}_{2,2}(\delta_s)\mathbf{f}^{(2)}_j] : \quad j = 1, 2, ..., N_0\},$$

$s = 0, 1, 2, ...$.

A–optimalita:

$$\lambda_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}'_{i^*_{s+1}}[\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)]^2\mathbf{f}_{i^*_{s+1}} = max\{\lambda_j\mathbf{f}'_j[\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)]^2\mathbf{f}_j : \quad j = 1,2,...,N_0\},$$

$s = 0,1,2,\dots$.

L–optimalita:

$$\lambda_{i^*_{s+1}}L[\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}'_{i^*_{s+1}}\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)]$$
$$= max\{\lambda_j L[\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_j\mathbf{f}'_j M^{-1}(\delta_s)] : \quad j = 1,2,...,N_0\},$$

$s = 0,1,2,\dots$.

Pri uvedenom sekvenčnom vylepšovaní štartovacieho návrhu δ_0 je potrebné na každom ďalšom kroku znovu určiť inverziu príslušnej informačnej matice plánu. Pri väčšom počte parametrov k a väčšom počte iterácií (niekedy rádovo $100-1000$ iterácií) je iterovanie informačných matíc náročnou numerickou úlohou.

Poznámka 4.4. *Pri iteratívnom vylepšovaní štartovacieho návrhu δ_0 s výhodou používame vzťah*

$$\mathbf{M}^{-1}(\delta_{s+1}) = [\mathbf{M}(\delta_s) + \mathbf{u}\mathbf{u}']^{-1} = \mathbf{M}^{-1}(\delta_s) - \frac{\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{u}\mathbf{u}'\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)}{1+\mathbf{u}'\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{u}},$$

(pozri Lemu 8.15). V našom prípade (ak v štartovacom návrhu bolo práve k experimentálnych bodov) je

$$\mathbf{M}(\delta_{s+1}) = \sum_{i\in Sp(\delta_{s+1})}\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}'_i\delta_{s+1}(i) =$$

$$= \sum_{\substack{i\in Sp(\delta_{s+1})\\ i\neq i^*_{s+1}}}\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}'_i\delta_s(i)\frac{k+s}{k+s+1} + \lambda_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}'_{i^*_{s+1}}\delta_{s+1}(i^*_{s+1}) =$$

$$= \frac{k+s}{k+s+1}\mathbf{M}(\delta_s) + \frac{1}{k+s+1}\lambda_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}'_{i^*_{s+1}}.$$

Preto

$$\mathbf{M}^{-1}(\delta_{s+1}) = \frac{k+s+1}{k+s}\left[\mathbf{M}^{-1}(\delta_s) - \frac{\lambda_{i^*_{s+1}}\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}'_{i^*_{s+1}}\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)}{k+s+\lambda_{i^*_{s+1}}\mathbf{f}'_{i^*_{s+1}}\mathbf{M}^{-1}(\delta_s)\mathbf{f}_{i^*_{s+1}}}\right].$$

5. Pravidlá pre zastavenie iterácií

Pravidlá z predchádzjúcej kapitoly zaručujú konvergenciu iteračne vylepšovaných návrhov k návrhu optimálnemu. Konvergencia nemusí vždy postupovať tak rýchle, ako by sme si to priali, ale na druhej strane ani nepotrebujeme, aby proces dokonvergoval. Postačí nám vyhovujúce priblíženie k optimálnemu plánu. Toto priblíženie si stanovíme pravidlom zastavenia pomocou dostatočne malého kladného čísla $\varepsilon > 0$. Iterácie zastavíme pri návrhu, ktorý označíme δ_{posl} (posledný).

D−optimalita: Posledný návrh δ_{posl} bude ten, pre ktorý platí

$$max\{\frac{1}{k}\lambda_j \mathbf{f}_j'\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j : \quad j = 1,2,...,N_0\} < 1+\varepsilon.$$

Dá sa dokázať, že v tomto prípade platí

$$\left[\frac{det\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})}{det\mathbf{M}^{-1}(\delta_D^*)}\right]^{\frac{1}{k}} \leqq max\{\frac{1}{k}\lambda_j \mathbf{f}_j'\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j : \quad j = 1,2,...,N_0\}.$$

A−optimalita: Posledný návrh δ_{posl} bude ten, pre ktorý platí

$$max\{\lambda_j \mathbf{f}_j'[\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})]^2\mathbf{f}_j : \quad j = 1,2,...,N_0\} - Tr\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl}) < \varepsilon.$$

L−optimalita: Posledný návrh δ_{posl} bude ten, pre ktorý platí

$$max\{\lambda_j L[\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j\mathbf{f}_j'\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})] : \quad j = 1,2,...,N_0\} - L[\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})] < \varepsilon.$$

Reštringovaná D−optimalita (určujeme prvých k_1 súradníc vektora $\boldsymbol{\beta}$): Posledný návrh δ_{posl} bude ten, pre ktorý platí

$$max\{\frac{1}{k_1}\lambda_j[\mathbf{f}_j'\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j - (\mathbf{f}_j^{(2)})'\mathbf{M}_{2,2}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j^{(2)}] : \quad j = 1,2,...,N_0\} < 1+\varepsilon.$$

Dá sa dokázať, že potom platí

$$\left[\frac{det\mathbf{M}^{1,1}(\delta_{posl})}{det\mathbf{M}^{1,1}(\delta_{D_r}^*)}\right]^{\frac{1}{k_1}} \leqq$$
$$max\{\frac{1}{k_1}\lambda_j[\mathbf{f}_j'\mathbf{M}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j - (\mathbf{f}_j^{(2)})'\mathbf{M}_{2,2}^{-1}(\delta_{posl})\mathbf{f}_j^{(2)}] : \quad j = 1,2,...,N_0\}.$$

6. $\boldsymbol{\Sigma}$−OPTIMALITA

Podľa definície 2.7 návrh $\delta_\Sigma^* \in \Delta_{reg}$ je $\boldsymbol{\Sigma}$−optimálny ak

$$\left\|\boldsymbol{\Sigma} - \frac{\sigma^2}{N^*}\mathbf{M}^{-1}(\delta_\Sigma^*)\right\| = min\left\{\left\|\boldsymbol{\Sigma} - \frac{\sigma^2}{N}\mathbf{M}^{-1}(\delta)\right\| : \ \delta \in \Delta_{reg}, N = 1,2,...\right\},$$

kde $\boldsymbol{\Sigma}$ je dopredu zadaná cieľová kovariančná matica výsledného odhadu vektorového parametra $\boldsymbol{\beta}$. Hľadáme δ_Σ^* a N^*. Označme

$$\mathbf{g}_i = \frac{\sqrt{\lambda_i}}{\sigma}\mathbf{f}_i, \quad i = 1,2,...,N_0$$

a

$$\mathbf{G}' = (\mathbf{g}_1 \vdots \mathbf{g}_2 \vdots ..., \vdots \mathbf{g}_{N_0}).$$

Pri nejakom N a návrhu δ^*_Σ má NNLO $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ kovariančnú maticu $\dfrac{\sigma^2}{N}\mathbf{M}^{-1}(\delta^*_\Sigma)$, ktorej inverzia je

$$\frac{N}{\sigma^2}\mathbf{M}(\delta^*_\Sigma) = \mathbf{G}'N \begin{pmatrix} \delta^*_\Sigma(1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta^*_\Sigma(2) & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & & \delta^*_\Sigma(N_0) \end{pmatrix} \mathbf{G}.$$

Ak existujú nezáporné čísla $\delta^*_\Sigma(1), \delta^*_\Sigma(2), ..., \delta^*_\Sigma(N_0)$, (pre ktoré $\sum_{i=1}^{N_0} \delta^*_\Sigma(i) = 1$) že platí

$$\mathbf{G}'N \begin{pmatrix} \delta^*_\Sigma(1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta^*_\Sigma(2) & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & & \delta^*_\Sigma(N_0) \end{pmatrix} \mathbf{G} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}, \tag{6.1}$$

tak sme našli δ^*_Σ aj $N^* = N$. Podľa lemy 8.18 sa dá systém (6.1) prepísať ako

$$(\mathbf{G}' \otimes \mathbf{G}')vec \begin{pmatrix} \delta^*_\Sigma(1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta^*_\Sigma(2) & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & & \delta^*_\Sigma(N_0) \end{pmatrix} = vec\boldsymbol{\Sigma}^{-1},$$

ktorý sa dá ešte zjednodušiť tým, že sa vynechajú rovnice pre $\{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\}_{i,j}$, pre ktoré $i < j$ (dostaneme $\dfrac{k(k-1)}{2}$ rovníc). Ak označíme $\mathbf{y}$ taký vektor, ktorý dostaneme keď vo vektore $vec\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ vynecháme súradnice $\{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\}_{i,j}$, pre $i < j$ a $\mathbf{A}$ takú maticu, ktorú dostaneme keď v matici $\mathbf{G}' \otimes \mathbf{G}'$ vynecháme práve tie isté riadky, ktoré zodpovedajú súradniciam vynechaným vo vektore $vec\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$, tak nájsť $\boldsymbol{\Sigma}-$optimálny návrh (pri nejakom N) je ekvivalentné hľadaniu vektora $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{N_0} \cap M$, kde

$$M = \{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{N_0} : \quad x_1 \geqq 0, x_2 \geqq 0, ..., x_{N_0} \geqq 0, \sum_{j=1}^{N_0} x_j = N\},$$

ktorý (vektor) minimalizuje veličinu

$$K(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{x} - 2\mathbf{y}'\mathbf{A}\mathbf{x}.$$

Problém riešime ako úlohu kvadratického programovania (pozri napr. [3], str. 118). Riešenie $\mathbf{x}_0 = N(\delta^*_\Sigma(1), \delta^*_\Sigma(2), ..., \delta^*_\Sigma(N_0))'$ nám dáva optimálny návrh δ^*_Σ pri danom počte meraní N.

Uvažujme teraz dva návrhy s rôznym počtom meraní. Pri prvom experimente nech je tento počet N_1, pri druhom N_2. V obidvoch experimentoch nech sú matica

$\mathbf{A}$ a vektor $\mathbf{y}$ rovnaké. Nech $\mathbf{x}_1$ je riešenie našej úlohy pre prvý experiment a $\mathbf{x}_2$ je riešenie úlohy pre druhý experiment. Môže nastať situácia, že $K(\mathbf{x}_1) < K(\mathbf{x}_2)$, teda s menším počtom meraní sa v prvom experimente lepšie priblížime k predpísanej matici $\mathbf{\Sigma}^{-1}$. Samozrejme dáme prednosť návrhu prvého experimentu. Táto úvaha nás vedie k nasledovnej modifikácii definície $\mathbf{\Sigma}-$optimálneho návrhu, s ktorou v praxi vystačíme.

Vektor $\mathbf{x}_0 = N_{opt}\boldsymbol{\delta}^*_\Sigma$ nazveme približne $\mathbf{\Sigma}-$optimálnym, ak minimalizuje veličinu $K(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{x} - 2\mathbf{y}'\mathbf{A}\mathbf{x}$, jeho komponenty $x_{0,1}, x_{0,2}, ..., x_{0,N_0}$ sú nezáporné a pre komponenty vektora $\boldsymbol{\delta}^*_\Sigma$ platí $\sum_{i=1}^{N_0} \delta^*_\Sigma(i) = 1$. Číslo N_{opt} je optimálny počet meraní, pričom $N_{opt} \leqq N_{max}$, kde N_{max} je maximálny počet meraní, ktorý v danom experimente ešte pripúšťame. Zrejme

$$\delta^*_\Sigma(i) = \frac{x_{0i}}{\sum_{i=1}^{N_0} x_{0i}}, \quad N_{opt} = \sum_{i=1}^{N_0} x_{0i}.$$

Ak použijeme označenie

$$K(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{x} - 2\mathbf{y}'\mathbf{A}\mathbf{x}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} -\mathbf{I}_{N_0,N_0} \\ 1, 1, ..., 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{N_0,1} \\ N_{max} \end{pmatrix},$$

tak $\mathbf{x}_0$ minimalizuje $K(\mathbf{x})$, pričom spĺňa podmienky $\mathbf{B}\mathbf{x}_0 \leqq \mathbf{b}$ (toto označenie chápeme tak, že pre zvolený komponent vektora na ľavej strane zodpovedajúci komponent vektora na pravej strane nie je menší).

Problém riešime opäť metódami kvadratického programovania.

7. Určenie optimálneho návrhu experimentu v niektorých špeciálnych prípadoch

Niekedy máme za úlohu určiť optimálny návrh experimentu, keď množina priamo observovateľných parametrov nie je konečná. Predpokladajme, že množina priamo observovate'lných parametrov je

$$\{\mu_x = \mathbf{f}'_x\boldsymbol{\beta} : \quad x \in < a, b >\},$$

kde $\mathbf{f}_x = (1, x, x^2, ..., x^{k-1})'$. Majme tiež dané váhy λ_x ako $\lambda_x = \dfrac{1}{\sigma^2(x)}$, pričom $\sigma^2(\cdot)$ je polynóm, ktorý nemá korene v intervale $< a, b >$ a jeho stupeň je menší alebo sa rovná $2(k-1)$. V tomto prípade existuje $D-$optimálny návrh δ^*_D, že $Sp(\delta^*_D) = \{x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(k)}\}$. Pre návrh δ^*_D platí

$$\delta^*_D(x^{(i)}) = \frac{1}{k}, \quad i = 1, 2, ..., k.$$

Dôkaz tvrdenia nájdete v [7]. Ako určiť body $x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(k)}$ spektra tohto $D-$optimálneho návrhu ? Dostaneme ich riešením maximalizačnej úlohy

$$\max_{x^{(1)} \in <a,b>, ..., x^{(k)} \in <a,b>} \prod_{j=1}^{k} \sigma^{-2}(x^{(j)}) \prod_{\substack{i,j,=1 \\ i>j}}^{k} (x^{(i)} - x^{(j)})$$

za podmienky $x^{(1)} < x^{(2)} < ... < x^{(k)}$. Ide o úlohu maximalizácie reálnej funkcie k reálnych premenných.

Iný prípad, keď vieme napísať optimálny návrh je ak

$$\{\mu_x = \mathbf{f}_x'\boldsymbol{\beta} : \quad x \in < a, b > \},$$

kde $\mathbf{f}_x = (1, x, x^2, ..., x^{k-1})'$ a váhy λ_x sú konštantné. Nech $y \in \mathcal{R} - < a, b >$. Odhadujeme hodnotu $\mathbf{f}_y'\boldsymbol{\beta} = \sum_{j=1}^{k} y^{j-1}\beta_j$ (predikcia, alebo extrapolácia). Optimálny návrh experimentu v tomto prípade je ten, ktorý vedie k minimalizácii disperzie odhadu $\widehat{\mathbf{f}_y'\boldsymbol{\beta}}$, čiže je to $L-$optimálny návrh, kde lineárny funkcionál $L(\cdot)$ je definovaný ako $L(\mathbf{A}) = \mathbf{f}_y'\mathbf{A}\mathbf{f}_y$. Označme

$$z^{(i)} = \cos\left(\frac{k-i}{k-1}\pi\right), \quad i = 1, 2, ..., k.$$

Hľadaný $L-$ optimálny návrh pre extrapoláciu δ_L^* má spektrum pozostávajúce z bodov

$$x^{(i)} = \frac{a + b + (b-a)z^{(i)}}{2}, \quad i = 1, 2, ..., k$$

takých, že platí

$$\delta_L^*(x^{(i)}) = \prod_{j \neq i} \left| \frac{(x^{(i)} - y)}{(x^{(j)} - x^{(i)})} \right|.$$

Dôkaz pozrite v [7], kde sú dokázané aj iné podobné tvrdenia pre nájdenie optimálnych návrhov v niektorých špeciálnych situáciach.

8. Pomocné tvrdenia

Nech $\mathbf{B}$ je regulárna $n \times n$ matica, ktorej prvky sú diferencovateľnými funkciami premennej t, čiže $\{\mathbf{B}\}_{i,j} = b_{ij} = b_{ij}(t),\ i, j = 1, 2, ..., n$,

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \text{ je } n \times n \text{ matica, ktorej prvky sú } \frac{\partial b_{ij}(t)}{\partial t},\ i, j = 1, 2, ..., n$$

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial \mathbf{B}} \text{ je } n \times n \text{ matica, ktorej prvky sú } \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{ij}},\ i, j = 1, 2, ..., n,$$

$$diag\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \{\mathbf{B}\}_{1,1} & 0 & \dots & 0 & \\ 0 & \{\mathbf{B}\}_{2,2} & \dots & 0 & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \{\mathbf{B}\}_{n,n} \end{pmatrix}.$$

Lema 8.1. *Platí*

$$\frac{\partial \mathbf{B}^{-1}}{\partial t} = -\mathbf{B}^{-1}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\mathbf{B}^{-1}.$$

Dôkaz. Prvky matice $\mathbf{B}^{-1}$ označme $b_{ij}^{(-1)}$, $i,j = 1,2,...,n$. Tiež sú diferencovateľnými funkciami premennej t, čiže $b_{ij}^{(-1)} = b_{ij}^{(-1)}(t), i,j = 1,2,...,n$. Pre $i,j = 1,2,...,n$ je

$$\{\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\}_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} b_{ik}(t) b_{kj}^{(-1)}(t) = \delta_{ij}$$

(δ_{ij} je tzv. Kroneckerovo delta, čiže $\delta_{ij} = 0$ pre $i \neq j$ a $\delta_{ij} = 1$ pre $i = j$.) Preto

$$0 = \frac{\partial}{\partial t}\{\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\}_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial t}\left[b_{ik}(t) b_{kj}^{(-1)}(t)\right] =$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial b_{ik}(t)}{\partial t} b_{kj}^{(-1)}(t) + \sum_{k=1}^{n} b_{ik}(t) \frac{\partial b_{kj}^{(-1)}(t)}{\partial t}, \quad i,j = 1,2,...,n,$$

čo v maticovom zápise je

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{B}\frac{\partial \mathbf{B}^{-1}}{\partial t} = \mathbf{0},$$

čiže

$$\frac{\partial \mathbf{B}^{-1}}{\partial t} = -\mathbf{B}^{-1}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\mathbf{B}^{-1}. \qquad \square$$

Lema 8.2. *Nech* $\mathbf{C}$ *je* $n \times n$ *matica konštánt. Platí*

$$\frac{\partial Tr\mathbf{B}\mathbf{C}}{\partial t} = Tr\mathbf{C}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

Dôkaz.

$$\frac{\partial Tr\mathbf{B}\mathbf{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} b_{ij}(t) c_{ji} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial b_{ij}(t)}{\partial t} c_{ji} = Tr\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\mathbf{C} = Tr\mathbf{C}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \qquad \square$$

Z predchádzajúcich dvoch liem priamo dostávame

Dôsledok 8.3. *Platí*

$$\frac{\partial Tr\mathbf{B}}{\partial t} = Tr\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

Dôsledok 8.4. *Platí*

$$\frac{\partial Tr\mathbf{B}^{-1}(t)\mathbf{C}}{\partial t} = -Tr\mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\frac{\partial \mathbf{B}(t)}{\partial t}\mathbf{B}^{-1}.$$

Lema 8.5. *Platí*

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial\mathbf{B}}=\begin{cases}(\det\mathbf{B})(\mathbf{B}^{-1})', & ak\ je\ \mathbf{B}\ nesymetrická\\ (\det\mathbf{B})(2\mathbf{B}^{-1}-diag\mathbf{B}^{-1}), & ak\ je\ \mathbf{B}\ symetrická.\end{cases}$$

Dôkaz. Determinant regulárnej $n\times n$ matice $\mathbf{B}$ sa dá písať ako

$$det\mathbf{B}=\{\mathbf{B}\}_{i,1}B_{i,1}+\{\mathbf{B}\}_{i,2}B_{i,2}+...+\{\mathbf{B}\}_{i,n}B_{i,n}$$

pre $i\in\{1,2,...,n\}$, pričom $B_{s,t}$ je doplnok $(n-1)$–ho stupňa determinantu $det\mathbf{B}$ patriaci k prvku $\{\mathbf{B}\}_{s,t}$ (pozri napr. [4], str. 270). Preto

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial\{\mathbf{B}\}_{i,j}}=\frac{\partial}{\partial\{\mathbf{B}\}_{i,j}}(\{\mathbf{B}\}_{i,1}B_{i,1}+\{\mathbf{B}\}_{i,2}B_{i,2}+...+\{\mathbf{B}\}_{i,n}B_{i,n}).$$

Dostávame

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial\{\mathbf{B}\}_{i,j}}=B_{i,j}$$

a

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial\mathbf{B}}=\begin{pmatrix}B_{1,1} & B_{1,2} & \dots & B_{1,n}\\ B_{2,1} & B_{2,2} & \dots & B_{2,n}\\ \dots & & & \\ B_{n,1} & B_{n,2} & \dots & B_{n,n}\end{pmatrix}=(\det\mathbf{B})(\mathbf{B}^{-1})',$$

lebo

$$\mathbf{B}^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{B_{1,1}}{\det\mathbf{B}} & \frac{B_{2,1}}{\det\mathbf{B}} & \dots & \frac{B_{n,1}}{\det\mathbf{B}}\\ \frac{B_{1,2}}{\det\mathbf{B}} & \frac{B_{2,2}}{\det\mathbf{B}} & \dots & \frac{B_{n,2}}{\det\mathbf{B}}\\ \vdots & & & \\ \frac{B_{1,n}}{\det\mathbf{B}} & \frac{B_{2,n}}{\det\mathbf{B}} & \dots & \frac{B_{n,n}}{\det\mathbf{B}}\end{pmatrix}$$

(pozri napr. [4], str. 320). Toto platí o nesymetrickej matici $\mathbf{B}$. V prípade, že $\mathbf{B}$ je symetrická, teda

$$\{\mathbf{B}\}_{r,s}=\{\mathbf{B}(b_{11},b_{12},...,b_{1n},b_{22},b_{23},\dots,b_{2n},\dots,b_{n-1\ n-1},b_{n-1\ n},b_{nn})\}_{r,s}=$$

$$=\begin{cases}b_{rs}, & \text{ak } r\leqq s,\\ b_{sr}, & \text{ak } r>s.\end{cases}$$

Pre symetrickú maticu teda

$$\mathbf{B}=\begin{pmatrix}\{\mathbf{B}\}_{1,1} & \{\mathbf{B}\}_{1,2} & \dots & \{\mathbf{B}\}_{1,n}\\ \{\mathbf{B}\}_{2,1} & \{\mathbf{B}\}_{2,2} & \dots & \{\mathbf{B}\}_{2,n}\\ \vdots & & & \\ \{\mathbf{B}\}_{n,1} & \{\mathbf{B}\}_{n,2} & \dots & \{\mathbf{B}\}_{n,n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n}\\ b_{12} & b_{22} & \dots & b_{2n}\\ \vdots & & & \\ b_{1n} & b_{2n} & \dots & b_{nn}\end{pmatrix}.$$

Preto

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{ii}}=\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial\{\mathbf{B}\}_{k,l}}\frac{\partial\{\mathbf{B}\}_{k,l}}{b_{ii}}=\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial\{\mathbf{B}\}_{i,i}}\frac{\partial\{\mathbf{B}\}_{i,i}}{b_{ii}}=$$

$$= \frac{\partial}{\partial \{\mathbf{B}\}_{i,i}} \left[\{\mathbf{B}\}_{i,1} B_{i,1} + \{\mathbf{B}\}_{i,2} B_{i,2} + ... + \{\mathbf{B}\}_{i,n} B_{i,n} \right].1 = B_{i,i}, \quad i = 1, 2, ..., n.$$

Pre $i < j$ je

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{ij}} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial \{\mathbf{B}\}_{k,l}} \frac{\partial \{\mathbf{B}\}_{k,l}}{b_{ij}} = \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial \{\mathbf{B}\}_{i,j}} \frac{\partial \{\mathbf{B}\}_{i,j}}{b_{ij}} + \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial \{\mathbf{B}\}_{j,i}} \frac{\partial \{\mathbf{B}\}_{j,i}}{b_{ij}} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial \{\mathbf{B}\}_{i,j}} \left[\{\mathbf{B}\}_{i,1} B_{i,1} + \{\mathbf{B}\}_{i,2} B_{i,2} + ... + \{\mathbf{B}\}_{i,n} B_{i,n} \right].1 +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \{\mathbf{B}\}_{j,i}} \left[\{\mathbf{B}\}_{j,1} B_{j,1} + \{\mathbf{B}\}_{j,2} B_{j,2} + ... + \{\mathbf{B}\}_{j,n} B_{j,n} \right].1 =$$

$$= B_{i,j} + B_{j,i}.$$

Úplne rovnako pre $i > j$ dostaneme

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{ij}} = B_{j,i} + B_{i,j},$$

čiže

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial \mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{11}} & \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{12}} & \cdots & \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{1n}} \\ \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{12}} & \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{22}} & \cdots & \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{2n}} \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{1n}} & \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{2n}} & \cdots & \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{nn}} \end{pmatrix} = (\det \mathbf{B})(2\mathbf{B}^{-1} - diag\mathbf{B}^{-1}). \qquad \square$$

Lema 8.6. *Pre symetrickú regulárnu $n \times n$ maticu $\mathbf{B}$ platí*

$$\frac{\partial lndet\mathbf{B}(t)}{\partial t} = Tr\mathbf{B}^{-1} \frac{\partial \mathbf{B}(t)}{\partial t}.$$

Dôkaz. Ak si uvedomíme, že $\mathbf{B}$ aj $\mathbf{B}^{-1}$ sú symetrické matice, teda pre $i > j$ platí $\{\mathbf{B}^{-1}\}_{i,j} = \{\mathbf{B}^{-1}\}_{j,i}$, $\left\{ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right\}_{i,j} = \left\{ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right\}_{j,i}$ a tvrdenie predchádzjúcej lemy, čiže

$$\frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{ij}} = \begin{cases} 2\{\mathbf{B}^{-1}\}_{i,j} det\mathbf{B}, & \text{ak } i < j, \\ \{\mathbf{B}^{-1}\}_{i,i} det\mathbf{B}, & \text{ak } i = j, \end{cases}$$

dostávame

$$\frac{\partial lndet\mathbf{B}(t)}{\partial t} = \frac{1}{det\mathbf{B}} \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial t} = \frac{1}{det\mathbf{B}} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i}^{n} \frac{\partial det\mathbf{B}}{\partial b_{ij}} \frac{\partial b_{ij}}{\partial t} = Tr\mathbf{B}^{-1} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \qquad \square$$

Lema 8.7. $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ *nech sú symetrické* $m \times m$ *matice,* $\mathbf{A}$ *je pozitívne definitná. Potom existuje nesingulárna* $m \times m$ *matica* $\mathbf{U}$ *taká, že platí*

$$\mathbf{UAU}' = \mathbf{I}, \quad \mathbf{UBU}' = \mathbf{\Lambda},$$

pričom $\mathbf{\Lambda}$ *je diagonálna.*

Dôkaz. Označme $\mathbf{w}_1, ..., \mathbf{w}_m$ ortonormálne charakteristické vektory matice $\mathbf{A}$ a $d_1, ..., d_m$ jej charakteristické čísla prislúchajúce týmto charakteristickým vektorom. Teda

$$\mathbf{Aw}_i = d_i \mathbf{w}_i, \quad i = 1, 2, ..., m.$$

Čiže existujú matice

$$\mathbf{W} = (\mathbf{w}_1 \vdots \mathbf{w}_2 \vdots \dots \vdots \mathbf{w}_m) \quad \text{a} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & d_m \end{pmatrix},$$

že

$$\mathbf{AW} = \mathbf{WD}, \qquad \mathbf{WW}' = \mathbf{W}'\mathbf{W} = \mathbf{I},$$

alebo

$$\mathbf{W}'\mathbf{AW} = \mathbf{D}, \quad \mathbf{WDW}' = \mathbf{A}, \quad \mathbf{WD}^{-1}\mathbf{W}' = \mathbf{A}^{-1}.$$

Označme

$$\mathbf{D}^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{d_m} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{d_1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{d_2}} & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sqrt{d_m}} \end{pmatrix}$$

a

$$\mathbf{C} = \mathbf{WD}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}'.$$

Matica $\mathbf{C}$ je regulárna, symetrická, pričom $\mathbf{C}^2 = \mathbf{WD}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}'\mathbf{WD}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}' = \mathbf{WDW}' = \mathbf{A}$, teda $\mathbf{WD}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{W}' = \mathbf{C}^{-1}$ a $\mathbf{C}^{-2} = \mathbf{A}^{-1}$. Matica $\mathbf{S} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{BC}^{-1}$ je symetrická. Nech $\mathbf{s}_1, ..., \mathbf{s}_m$ sú jej ortonormálne charakteristické vektory a $\lambda_1, ..., \lambda_m$ charakteristické čísla prislúchajúce týmto vektorom, teda

$$\mathbf{C}^{-1}\mathbf{BC}^{-1}\mathbf{s}_i = \lambda_i \mathbf{s}_i, \quad i = 1, 2, ..., m.$$

Označme

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{s}_i, \quad i = 1, 2, ..., m.$$

Zrejme

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{Bz}_i = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{BC}^{-1}\mathbf{s}_i = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{CC}^{-1}\mathbf{BC}^{-1}\mathbf{s}_i = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\lambda_i\mathbf{s}_i = \mathbf{C}^{-1}\lambda_i\mathbf{s}_i = \lambda_i\mathbf{z}_i.$$

Preto $\mathbf{z}_i,\ i = 1, 2, ..., m$ sú charakteristické vektory matice $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$ a $\lambda_i,\ i = 1, 2, ..., m$ sú im prislúchajúce charakteristické čísla, čiže

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{z}_i = \lambda_i \mathbf{z}_i, \quad i = 1, 2, ..., m.$$

Pre maticu $\mathbf{U}' = (\mathbf{z}_1 \vdots \mathbf{z}_2 \vdots ... \vdots \mathbf{z}_m)$ platí

$$\mathbf{UAU}' = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1' \\ \mathbf{z}_2' \\ \vdots \\ \mathbf{z}_m' \end{pmatrix} \mathbf{A}(\mathbf{z}_1 \vdots \mathbf{z}_2 \vdots ... \vdots \mathbf{z}_m) = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1'\mathbf{A}\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_1'\mathbf{A}\mathbf{z}_2 & \dots & \mathbf{z}_1'\mathbf{A}\mathbf{z}_m \\ \mathbf{z}_2'\mathbf{A}\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2'\mathbf{A}\mathbf{z}_2 & \dots & \mathbf{z}_2'\mathbf{A}\mathbf{z}_m \\ \vdots & & & \\ \mathbf{z}_m'\mathbf{A}\mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_m'\mathbf{A}\mathbf{z}_2 & \dots & \mathbf{z}_m'\mathbf{A}\mathbf{z}_m \end{pmatrix} = \mathbf{I},$$

lebo $\mathbf{z}_i'\mathbf{A}\mathbf{z}_j = \mathbf{z}_i'\mathbf{C}'\mathbf{C}\mathbf{z}_j = \mathbf{s}_i'\mathbf{s}_j = \delta_{ij}$. Ďalej

$$\mathbf{UBU}' = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1' \\ \mathbf{z}_2' \\ \vdots \\ \mathbf{z}_m' \end{pmatrix} \mathbf{B}(\mathbf{z}_1 \vdots \mathbf{z}_2 \vdots ... \vdots \mathbf{z}_m) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_m \end{pmatrix} = \mathbf{\Lambda},$$

lebo $\mathbf{z}_i'\mathbf{B}\mathbf{z}_j = \mathbf{z}_i'\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{z}_j = \mathbf{z}_i'\mathbf{C}^2\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{z}_j = \mathbf{s}_i'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{C}^2\mathbf{C}^{-2}\mathbf{B}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{s}_j =$
$= \mathbf{s}_i\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{s}_j = \lambda_j \mathbf{s}_i'\mathbf{s}_j$. $\square$

Lema 8.8. *Nech $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2$ sú $m \times m$ symetrické a pozitívne definitné matice, $\lambda_1, ..., \lambda_m$ sú charakteristické čísla matice $\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2^{-1}$. Potom sú $\lambda_1, ..., \lambda_m$ reálne a kladné.*

Dôkaz. $\lambda_1, ..., \lambda_m$ sú riešením rovnice

$$det(\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2^{-1} - \lambda\mathbf{I}) = 0,$$

ktorá je ekvivalentná nasledujúcim rovniciam

$$det[(\mathbf{M}_1 - \lambda\mathbf{M}_2)\mathbf{M}_2^{-1}] = 0,$$

$$det(\mathbf{M}_1 - \lambda\mathbf{M}_2) = 0,$$

$$det[\mathbf{M}_2^{\frac{1}{2}}(\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}}\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{M}_2^{\frac{1}{2}}] = 0,$$

$$det(\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}}\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}} - \lambda\mathbf{I}) = 0.$$

Pretože $\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}}\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}}$ je pozitívne definitná matica, všetky jej vlastné čísla, teda riešenia rovnice $det(\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}}\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2^{-\frac{1}{2}} - \lambda\mathbf{I}) = 0$ sú reálne a kladné. $\square$

Lema 8.9. *Majme $n \times n$ maticu $\mathbf{F}$ a nech $\gamma_1, ..., \gamma_n$ sú korene jej charakteristickej rovnice, t.j. rovnice $det(\mathbf{F} - \gamma\mathbf{I}) = 0$. Potom $det\mathbf{F} = \prod_{j=1}^{n} \gamma_j$ a $Tr\mathbf{F} = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i$.*

Dôkaz. Charakteristická rovnica $det(\mathbf{F} - \gamma\mathbf{I}) = 0$ sa dá písať ako

$$(-1)^n \gamma^n + b_1 \gamma^{n-1} + ... + b_{n-1}\gamma + b_n = 0,$$

čiže

$$(-1)^n (\gamma^n + a_1 \gamma^{n-1} + ... + a_{n-1}\gamma + a_n) = 0, \tag{8.1}$$

pričom (priamo z definície determinantu) platí

$$b_n = (-1)^n a_n = det\mathbf{F}, \quad b_1 = (-1)^n a_1 = (-1)^{n-1} Tr\mathbf{F}. \tag{8.2}$$

Rovnicu (8.1) môžeme písať ako

$$(-1)^n (\gamma - \gamma_1)(\gamma - \gamma_2)...(\gamma - \gamma_n) = 0 \tag{8.3}$$

a roznásobením (8.3) dostávame vzťahy medzi koreňmi a koeficientami charakteristickej rovnice, teda

$$\begin{aligned} -a_1 &= \gamma_1 + ... + \gamma_n \\ a_2 &= \gamma_1\gamma_2 + ... + \gamma_{n-1}\gamma_n \\ -a_3 &= \gamma_1\gamma_2\gamma_3 + ... + \gamma_{n-2}\gamma_{n-1}\gamma_n \\ &\vdots \\ (-1)^n a_n &= \gamma_1\gamma_2...\gamma_n. \end{aligned} \tag{8.4}$$

Z (8.2) a (8.4) dostávame tvrdenie lemy. $\square$

Lema 8.10. *Nech $\lambda_1, ..., \lambda_n$ sú nezáporné čísla. Platí*

$$\left(\prod_{i=1}^{n} \lambda_i\right)^{\frac{1}{n}} \leqq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i. \tag{8.5}$$

Dôkaz. Ak $a \geqq 0, \ b \geqq 0$, tak

$$ab \leqq \frac{1}{2}(a^2 + b^2), \tag{8.6}$$

lebo

$$(a - b)^2 \geqq 0,$$

teda postupne

$$a^2 - 2ab + b^2 \geqq 0$$

$$a^2 + b^2 \geqq 2ab$$

$$\frac{1}{2}(a^2+b^2) \geqq ab.$$

Nech $\lambda_1 \geqq 0, \lambda_2 \geqq 0$, a položme v (8.6) $a=\sqrt{\lambda_1}, b=\sqrt{\lambda_2}$. Potom z (8.6)

$$\sqrt{\lambda_1\lambda_2} = ab \leqq \frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2). \tag{8.7}$$

Nech ďalej $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ sú nezáporné. Podľa (8.7) platí

$$\sqrt{\lambda_1\lambda_2} \leqq \frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2) \text{ a } \sqrt{\lambda_3\lambda_4} \leqq \frac{1}{2}(\lambda_3+\lambda_4),$$

čiže (znovu využijúc (8.7))

$$\sqrt[4]{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} = \sqrt{\sqrt{\lambda_1\lambda_2}\sqrt{\lambda_3\lambda_4}} \leqq \sqrt{\frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2)\frac{1}{2}(\lambda_3+\lambda_4)} \leqq$$

$$\leqq \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2)+\frac{1}{2}(\lambda_3+\lambda_4)\right] = \frac{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4}{4}.$$

Matematickou indukciou dokážeme, že (8.5) platí pre $n=2^k$ (k je prirodzené číslo).

Pre $k=2$ (8.5) platí. Nech platí (8.5) pre $n=2^k$, ukážeme, že platí aj pre $n=2^{k+1}$. Teda nech platí

$$\left(\prod_{i=1}^{2^k}\lambda_i\right)^{\frac{1}{2^k}} \leqq \frac{1}{2^k}\sum_{i=1}^{2^k}\lambda_i.$$

Vezmime $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_{2^k}, \lambda_{2^k+1}, ..., \lambda_{2^{k+1}=2.2^k}$. Naozaj

$$\left(\prod_{i=1}^{2^{k+1}}\lambda_i\right)^{\frac{1}{2^{k+1}}} = \sqrt{\left(\prod_{i=1}^{2^k}\lambda_i\right)^{\frac{1}{2^k}}\left(\prod_{j=1}^{2^k}\lambda_{2^k+j}\right)^{\frac{1}{2^k}}} \leqq \sqrt{\frac{1}{2^k}\sum_{i=1}^{2^k}\lambda_i\frac{1}{2^k}\sum_{j=1}^{2^k}\lambda_{2^k+j}} \leqq$$

$$\leqq \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2^k}\sum_{i=1}^{2^k}\lambda_i+\frac{1}{2^k}\sum_{j=1}^{2^k}\lambda_{2^k+j}\right) = \frac{1}{2^{k+1}}\sum_{i=1}^{2^{k+1}}\lambda_i.$$

Teraz ukážeme, že ak (8.5) platí pre nejaké $n \geqq 2$, tak platí aj pre $n-1$ (spätná indukcia).

Uvažujme $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_{n-1}, \lambda_n = \dfrac{\lambda_1+\lambda_2+...+\lambda_{n-1}}{n-1}$. Všetky λ_i sú nezáporné. Teda ak nerovnosť (8.5) platí pre (nejaké) $n \geqq 2$, má tvar

$$\sqrt[n]{\lambda_1\lambda_2...\lambda_{n-1}\frac{\lambda_1+\lambda_2+...+\lambda_{n-1}}{n-1}} \leqq \tag{8.8}$$

$$\frac{1}{n}\left[\lambda_1+\lambda_2+...+\lambda_{n-1}+\frac{\lambda_1+\lambda_2+...+\lambda_{n-1}}{n-1}\right] = \frac{1}{n-1}(\lambda_1+\lambda_2+...+\lambda_{n-1}).$$

Nerovnosť (8.8) sa dá písať tiež ako

$$\left[\left(\prod_{i=1}^{n-1}\lambda_i\right)^{\frac{1}{n-1}}\right]^{\frac{n-1}{n}}\left[\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n-1}\lambda_j\right]^{\frac{1}{n}} \leqq \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n-1}\lambda_i,$$

čiže (ak aspoň jedno $\lambda_i > 0$)

$$\left[\left(\prod_{i=1}^{n-1}\lambda_i\right)^{\frac{1}{n-1}}\right]^{\frac{n-1}{n}} \leqq \left[\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n-1}\lambda_j\right]^{1-\frac{1}{n}}.$$

Umocnením na $\dfrac{n}{n-1}$ dostávame

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

Tým sme lemu dokázali pre každé $n = 1, 2, \ldots$. $\square$

Lema 8.11. *Majme dva návrhy δ_1, δ_2, pričom $\delta_1 \in \Delta_{reg}$. Pre $\alpha \in < 0, 1)$ patrí $\tilde{\delta} = (1-\alpha)\delta_1 + \alpha\delta_2$ do Δ_{reg} a*

$$\mathbf{M}(\tilde{\delta}) = (1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha\mathbf{M}(\delta_2).$$

Dôkaz. Najprv ukážeme, že $\tilde{\delta}$ je návrh. Skutočne $\tilde{\delta}$ je zobrazenie z $\{1, 2, ..., N_0\} \to < 0, 1 >$, pre ktoré platí

$$\sum_{i=1}^{N_0}\tilde{\delta}(i) = \sum_{i\in\{Sp(\delta_1)\cup Sp(\delta_2)\}}(1-\alpha)\delta_1(i) + \alpha\delta_2(i) =$$

$$= (1-\alpha)\sum_{i\in Sp(\delta_1)}\delta_1(i) + \alpha\sum_{i\in Sp(\delta_2)}\delta_2(i) = (1-\alpha) + \alpha = 1.$$

Informačné matice navrhov δ_1, δ_2 sú

$$\mathbf{M}(\delta_1) = \sum_{i\in Sp(\delta_1)}\delta_1(i)\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i' \quad \text{a} \quad \mathbf{M}(\delta_2) = \sum_{j\in Sp(\delta_2)}\delta_2(j)\lambda_j\mathbf{f}_j\mathbf{f}_j',$$

pričom $\mathbf{M}(\delta_1)$ je pozitívne definitná a $\mathbf{M}(\delta_2)$ je pozitívne semidefinitná. Informačná matica návrhu $\tilde{\delta}$ je

$$\mathbf{M}(\tilde{\delta}) = \sum_{i\in\{Sp(\delta_1)\cup Sp(\delta_2)\}}[(1-\alpha)\delta_1(i) + \alpha\delta_2(i)]\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i' =$$

$$= (1-\alpha)\sum_{i\in Sp(\delta_1)}\delta_1(i)\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i' + \alpha\sum_{i\in Sp(\delta_2)}\delta_2(i)\lambda_i\mathbf{f}_i\mathbf{f}_i' = (1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha\mathbf{M}(\delta_2)$$

a pre $\alpha \in < 0, 1)$ to je pozitívne definitná matica (vyplýva priamo z definície pozitívnej definitnosti matice). $\square$

Lema 8.12. *Majme návrhy δ_1, δ_2, pričom $\delta_1 \in \Delta_{reg}$, $\alpha \in <0,1)$, $\tilde{\delta} = (1-\alpha)\delta_1 + \alpha\delta_2$ ($\in \Delta_{reg}$ podľa Lemy 8.11). Reálna funkcia*

$$g(\alpha) = lndet\mathbf{M}(\tilde{\delta}) = lndet[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha\mathbf{M}(\delta_2)]$$

je spojitá, diferencovateľná a konkávna na $<0,1)$.

Dôkaz. Z definície determinantu vyplýva, že $det\mathbf{M}(\tilde{\delta}) = det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_1)+\alpha\mathbf{M}(\delta_2)]$ je polynóm $k-$teho stupňa premennej α, teda to je spojitá a diferencovateľná funkcia. Pretože pre $\alpha \in <0,1)$ je $det[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha\mathbf{M}(\delta_2)] > 0$ a $ln(\cdot)$ je všade na $(0,\infty)$ spojitá, diferencovateľná a konkávna, je $g(\cdot)$ (ako funkcia α) na $<0,1)$ spojitá, diferencovateľná a konkávna. $\Box$

Uveďme jednu z charakteristických vlastností funkcie $lndet\mathbf{M}(\delta)$ na množine $\{\mathbf{M}(\delta): \ \delta \in \Delta_{reg}\}$.

Lema 8.13. *Funkcia $lndet(.)$ je na množine $\{\mathbf{M}(\delta): \ \delta \in \Delta_{reg}\}$ konkávna.*

Dôkaz. Vezmime ľubovoľné $\delta_1, \delta_2 \in \Delta_{reg}$. Podľa lemy 8.7 existuje regulárna matica $\mathbf{U}$, že $\mathbf{U}\mathbf{M}(\delta_1)\mathbf{U}' = \mathbf{I}$ a $\mathbf{U}\mathbf{M}(\delta_2)\mathbf{U}' = \mathbf{\Lambda}$ (diagonálna). Pretože $ln(\cdot)$ je na $(0,\infty)$ (rýdzo)konkávna funkcia, dostávame pre každé $\alpha \in <0,1>$

$$lndet[(1-\alpha)\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha\mathbf{M}(\delta_2)] = lndet\mathbf{U}^{-1}[(1-\alpha)\mathbf{I} + \alpha\mathbf{\Lambda}]\mathbf{U}'^{-1} =$$

$$= ln\{det\mathbf{U}^{-2}det[(1-\alpha)\mathbf{I} + \alpha\mathbf{\Lambda}]\} = lndet\mathbf{U}^{-2} + ln\prod_{i=1}^{k}[(1-\alpha)1 + \alpha\lambda_i] =$$

$$= lndet\mathbf{U}^{-2} + \sum_{i=1}^{k} ln[(1-\alpha)1 + \alpha\lambda_i] \geqq lndet\mathbf{U}^{-2} + \sum_{i=1}^{k}[(1-\alpha)ln1 + \alpha ln\lambda_i] =$$

$$= lndet\mathbf{U}^{-2} + \alpha lndet\mathbf{\Lambda} = (1-\alpha)lndet\mathbf{U}^{-2} + \alpha[lndet\mathbf{U}^{-2} + lndet\mathbf{\Lambda}] =$$

$$= (1-\alpha)lndet\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha lndet\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}'^{-1}\mathbf{\Lambda} = (1-\alpha)lndet\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha lndet\mathbf{U}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}'^{-1} =$$

$$= (1-\alpha)lndet\mathbf{M}(\delta_1) + \alpha lndet\mathbf{M}(\delta_2).$$

Nerovnosť je ostrá, ak $\alpha \in (0,1)$ a ak $\lambda_i \neq 1$ aspoň pre jedno $i \in \{1,2,...,k\}$, t.j. ak $\mathbf{M}(\delta_1) \neq \mathbf{M}(\delta_2)$. $\Box$

Lema 8.14. *Nech $\mathbf{A}$, $\mathbf{D}$ sú regulárne matice. Potom platí*

$$det\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ \mathbf{C} & \mathbf{D}\end{pmatrix} = det\mathbf{A}det(\mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}) = det\mathbf{D}det(\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}).$$

Dôkaz. Zrejme

$$det\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ \mathbf{C} & \mathbf{D}\end{pmatrix} = det\left[\begin{pmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{0}\\ -\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ \mathbf{C} & \mathbf{D}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{I} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{pmatrix}\right] =$$

$$= det\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\end{pmatrix} = det\mathbf{A}det(\mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}).$$

Tiež

$$det\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ \mathbf{C} & \mathbf{D}\end{pmatrix} = det\left[\begin{pmatrix}\mathbf{I} & -\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ \mathbf{C} & \mathbf{D}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{0}\\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} & \mathbf{I}\end{pmatrix}\right] =$$

$$= det\begin{pmatrix}\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{D}\end{pmatrix} = det\mathbf{D}det(\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}). \qquad \Box$$

Lema 8.15. *Nech* $\mathbf{A}$ *je regulárna* $n \times n$ *matica,* $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{R}^n$*. Platí:*

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}')^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}'\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}.$$

Dôkaz. Lemu ľahko dokážeme vynásobením matíc $(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}')(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}')^{-1}$. □

Definícia 8.16. *Nech*

$$\mathbf{A}_{m,n} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}, \mathbf{B}_{r,s} = \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1s} \\ b_{21} & \dots & b_{2s} \\ \vdots & & \\ b_{r1} & \dots & b_{rs} \end{pmatrix}.$$

Kroneckerov súčin matíc $\mathbf{A}$ *a* $\mathbf{B}$ *je*

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} & \dots & a_{1n}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} & \dots & a_{2n}\mathbf{B} \\ \vdots & & & \\ a_{m1}\mathbf{B} & a_{m2}\mathbf{B} & \dots & a_{mn}\mathbf{B} \end{pmatrix}_{mr,ns}.$$

Vlastnosti kroneckerovho súčinu matíc pozri napr. v [9].

Definícia 8.17. *Ak napíšeme "pod seba" stĺpce matice* $\mathbf{K}$*, povieme, že sme vykonali na matici operáciu vec. Teda*

$$vec\mathbf{K}_{m,n} = vec(\mathbf{k}_1 \vdots \mathbf{k}_2 \vdots \dots \vdots \mathbf{k}_n) = \begin{pmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{k}_n \end{pmatrix}.$$

Lema 8.18. *Pre matice príslušných rozmerov platí*

$$vec\mathbf{ABC} = (\mathbf{C}' \otimes \mathbf{A})vec\mathbf{B},$$
$$Tr\mathbf{AB} = (vec\mathbf{B}')'vec\mathbf{A}.$$

Dôkaz. Lemu dokážte ako cvičenie.

Viac o optimálnom návrhu experimentu nájdete v monografii [7], príklady sú v [8]. V [7] sa nachádza aj obšírny zoznam ďalšej literatúry k danej téme.

References

[1] Cramer, H., *Mathematical Methods of Statistics*, Princeton University Press, Princeton, N.J., 1946.

[2] Fedorov, V., V., *Theory of Optimal Experiment*, Duxbury Advanced Series, Second Edition, Belmont CA, 1990.

[3] Hamala, M., *Nelineárne programovanie*, ALFA, Bratislava, 1972.

[4] Kořínek, V., *Základy algebry*, Nakladatelství ČSAV, Praha, 1953.

[5] Kubáček, L., Kubáčková, L., *Statistika a metrologie*, Univerzita Palackého v Olomouci - vydavatelství, 2000.

[6] Kubáčková, L., Kubáček, L., Kukuča, J., *Pravdepodobnosť a štatistika v geodézii a geofyzike*, VEDA, Bratislava, 1982.

[7] Pázman, A., *Základy optimalizácie experimentu*, VEDA, Bratislava, 1980.

[8] Pázman, A., Mikulecká, J., Raffaj, J., Tokošová, M., *Riešené situácie z navrhovania experimentov*, ALFA, Bratislava, 1986.

[9] Rao, C. R., *Lineární metody statistické indukce a jejich aplikace*, Academia, Praha, 1978.