

1. ÚVOD

Idea navrhovania experimentov je pravdepodobne tak staré ako samotná matematická štatistika. Výraznú formuláciu dostala táto idea už v predvojnovom období v knihe R. A. Fishera [7]. Typické pre Fishera bolo, že štatistické modelovanie, spracovanie dát a navrhovanie (plánovanie) experimentov tvorili nedeliteľný celok. Teda navrhovanie experimentov bolo podriadené ďalším dvom cieľom: modelovaniu a analýze dát. Dobrý návrh bol taký, ktorý umožňoval jednoduché numerické výpočty, elimináciu systematických vplyvov pomocou randomizácie a pomocou usporiadania pokusov do blokov, zaručoval určité symetrické vlastnosti funkcie odozvy, umožňoval dobre využitie variančnej analýzy a pod. Toto zameranie navrhovania experimentov sa využíva a rozvíja dodnes a existuje veľa kníh na túto tému. Vcelku dosť náhodne uvádzam tri z nich [4, 14, 19]. (Najznámejšia z nich je pravdepodobne kniha Montgomeryho. V podobnom zameraní pracoval v ČSSR J. Likš.)

Vytváranie blokových schém vyžaduje pomerne komplikované kombinatorické úvahy. Postupne sa táto problematika algebraizovala. Ukázalo sa, že kompletne riešenia súvisia napr. s poznatkami projektívnej geometrie, teórie grúp a podobne, a vznikla tak čiste algebraická a kombinatorická teória dobre reprezentovaná nedávno vydanou knihou [2]. Táto teória, i keď sa naďalej nazýva "design theory", má so štatistikou spoločnú len primárnu motiváciu a rozvíja sa z vnútorných matematických podnetov.

Koncom 50-tych rokov sa z Fisherovej teórie odštepil ďalší smer. Začali sa totiž objavovať práce, ktoré riešili problém optimálneho rozmiestňovania uzlov merania pri štatistickej interpelácii polynómov na priamke. Dve takéto práce [8, 10] boli zhodou okolností vydané v tom istom roku, v tom istom časopise, stanovili presne tie isté optimálne návrhy experimentov, avšak pristupovali ku optimalizácii zo zásadne odlišných pozícií. Túto zaujímavosť vysvetlili Kiefer a Wolfowitz v práci [12], kde pomocou dosť komplikovaného aparátu teórie hier dokázali, že tzv. D-optimálne a tzv. G-optimálne návrhy sa zhodujú. (Je kuriózne, že toto slávne tvrdenie bolo pozdejšie dokázané pomocou niekoľkokoriadkového dôkazu využívajúceho iba znalosti o derivovaní funkcií z 2. ročníka VŠ.) Ako sa pozdejšie ukázalo, hlavný prínos Kiefera a Wolfowitzov bol v tom, že miernou preformuláciou pojmu "návrh experimentu" vniesli do tejto teórie konvexné metódy, a tým vyvolali rozvoj nového smeru, ktorý sa zvykne nazývať "teória optimalizácie experimentu".

Celá teória optimalizácie lineárneho experimentu je hodne spájaná s menom J. Kiefera. Pochopiteľne, mal viacerých (menej slávnych) predchodcov (známy je napr. G. Elfving zo Švédska) a veľa nasledovníkov (spomedzi prvých hodno spomenúť napr. S. N. Sokolova zo ZSSR a V. Kurotschku z NSR). Postupne sa objavili aj monografie.

Prvá a veľmi citovaná bola kniha V. V. Fedorova [5] vypracovaná v nadväznosti na prehľadovú prácu [6]. Pozdejšie vyšli ďalšie monografie o optimalizácii experimentu: encyklopedická, ale dosť ťažkopádna kniha Bandemera a kol. [1], sympatická, ale úzko zameraná kniha Silveya [20], autorova kniha [15] a encyklopedická kniha Jermakova a kol. [11]. V súčasnosti je v tlači kniha F. Pukelsheima (vydavateľ Willey), ktorá ovšem dokumentuje, že teórii optimalizácie experimentu hrozí podobný osud ako kombinatorickej "design theory"; že totiž prevážia analytické a algebraické aspekty teórie nad štatistickou a numerickou motiváciou.

Podrobnejšie stanovisko ku metódam a teórii optimalizácie experimentu uvádzame v ďalších paragrafoch.

2. OPTIMALIZÁCIA LINEÁRNEHO EXPERIMENTU

Uspokojivo kompletizovaná teória optimalizácie experimentu existuje dnes len pre prípad lineárneho regresného experimentu s nekorelovanými pozorovaniami. Veľmi stručne uvidíme jej (elementárne) východiskové a základné pohľady s naznačením výsledkov.

Základný "set-up" tejto teórie je veľmi jednoduchý. Je daná množina \mathcal{X} = množina možných pokusov. V každom pokuse možno pozorovať reálnu náhodnú veličinu y_x , pričom sa predpokladá, že

$$E[y_x] = f^T(x)\theta, \quad \text{Var}[y_x] = \sigma^2 k(x),$$

kde $\theta \in \mathbb{R}^m$ je vektor neznámych parametrov, kdežto vektor $f(x)$ a číslo $k(x) > 0$ sú známe. Parameter σ^2 nemusí byť známy. Návrh experimentu je N -tíca x_1, \dots, x_N bodov množiny \mathcal{X} . Niektoré z bodov x_i môžu byť zhodné, teda pokusy v experimente možno opakovat. Jednotlivé (i opakované) pokusy vykonávame nezávisle.

Cieľom navrhovania experimentu je získať nevychýlené odhady parametrov $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m$ tak, aby disperzie odhadov parametrických funkcií boli "v nejakom súhrnnom zmysle" čo najmenšie. Vychádza sa tu z Gauss-Markovovej vety, resp. z Rao-Cramerovej nerovnosti: Ak chceme nevychýlene odhadnúť parametrickú funkciu $h^T\theta$, tak minimálna disperzia odhadu je

$$\text{Var}(h^T\hat{\theta}) = h^T M^{-1}(x_1, \dots, x_N) h,$$

kde

$$M(x_1, \dots, x_N) := \sigma^{-2} \sum_{i=1}^N f(x_i) f^T(x_i) k^{-1}(x_i)$$

je informačná matica. Symbol M^{-1} označuje g -inverziu matice M . (Pozn.: kladieme $\text{Var}(h^T\hat{\theta}) = \infty$ ak funkcia $h^T\theta$ nie je nevychýlene odhadnuteľná.)

Nech $N(x)$ je počet opakovaní pokusu x v N -tici x_1, \dots, x_N . Potom

$$\xi(x) := N(x)/N; \quad (x \in \mathcal{X})$$

je zrejme pravdepodobná miera na \mathcal{X} . Môžeme písať

$$M(x_1, \dots, x_N) = \sigma^{-2N} M(\xi),$$

kde

$$M(\xi) := \sum_{x \in \mathcal{X}} f(x) f^T(x) k^{-1}(x) \xi(x).$$

Kieferova modifikácia: Každá pravdepodobnostná mieražna \mathcal{X} , ktorej suport je konečný, je považovaná za návrh experimentu. Matica $M(\xi)$ je informačná matica tohto návrhu. Je zrejmé, že po takej modifikácii sa množina návrhov experimentu i množina informačných matic stávajú konvexnými množinami.

Značná časť metód optimalizácie experimentu vznikla v podstate induktívnym spôsobom, t.j. riešili sa špeciálne prípady a tvorili sa špeciálne metódy. V dnešnom pohľade možno na niektoré výsledky hľadieť z istého teoretického nadsľadu. Takýto prístup je stručnejší a použijeme ho aj tu.

a) Pohľad z pozície teórie rozhodovania

Úlohu optimalizácie lineárneho experimentu možno považovať za rozhodovací problém

$$(\Xi, H, \text{Var}_{\xi}(h^T \hat{\theta})),$$

kde Ξ = množina všetkých možných návrhov experimentu (= pravdepodobnostných mier na \mathcal{X}), H je istá množina m -rozmerných vektorov (napr. $H = \mathbb{R}^N$); ak zvolíme $\xi \in \Xi$, $h \in H$, tak disperzia $\text{Var}_{\xi}(h^T \hat{\theta})$ je "stratová funkcia" v tomto rozhodovacom probléme.

Návrh ξ považujeme za rovnomerne lepší alebo ekvivalentný ako návrh η (píšeme $\xi \preceq \eta$) práve vtedy, keď

$$\text{Var}_{\xi}(h^T \hat{\theta}) \leq \text{Var}_{\eta}(h^T \hat{\theta}) \quad \forall h \in H$$

Dôležité tvrdenie: Ak $H = \mathbb{R}^N$, tak $\xi \preceq \eta \Leftrightarrow M(\xi) \geq M(\eta)$ (usporiadanie podľa pozitívnej definitnosti).

Prirodzenou otázkou v rozhodovacom probléme je existencia prípustných návrhov (ξ je prípustný ak neexistuje $\eta \in \Xi$, že $\eta \prec \xi$). Existuje niekoľko tvrdení, ktoré obsahujú postačujúce podmienky prípustnosti návrhu experimentu (v [15] sú to tvrdenia III. 5 a III. 6).

b) Optimalizácia experimentu pomocou riešenia duálneho problému

Viacere prakticky užitočné tvrdenia o optimalizácii návrhu experimentu sú založené na vlastnostiach množiny

$$S := \text{co}(\{f(x) : x \in \mathcal{X}\} \cup \{-f(x) : x \in \mathcal{X}\})$$

(tu symbolom $\text{co}(A)$ označujeme konvexný obal množiny A). Ak $\dim \Theta \leq 3$ tak táto množina slúži na tvorbu grafických metód, pre väčšie $\dim \Theta$ je množina S podkladom pre tvorbu niektorých numerických metód. Napr: Návrh ξ je prípustný vtedy a len vtedy keď množina $\{f(x) : \xi(x) > 0\}$ celá leží na hranici množiny S (veta Felmannova, [15], tvrdenie III. 6). Pomocou množiny S možno konštruovať optimálny návrh tak, aby sa minimalizovala variancia $\text{Var}_{\xi}(h^T \hat{\theta})$ pri fixnom vektore h (veta Elfvingova, [15], tvrdenie III. 17). Sú možné i ďalšie metódy optimalizácie využívajúce túto množinu. Z teoretického nadsľadu sa dodatočne ukázalo, že ide o vtipné využitie princípu duality v konvexnej minimalizácii.

b) Kritériá optimality

Rovnomerne najlepší návrh prakticky nikdy neexistuje. Je preto potrebné špecifikovať nejaké kritérium optimality, t.j. zvoliť funkciu Φ na množine informačných matíc $\{M(\xi) : \xi \in \Xi\}$ tak, aby platilo

$$\xi \leq \eta \Rightarrow \Phi[M(\xi)] \leq \Phi[M(\eta)] .$$

Príklady: $\Phi(M) = -\ln \det M$, $\Phi(M) = \sum_i \{M^{-1}\}_{ii}$, atď. Φ -optimálny návrh je ten, ktorý minimalizuje $\Phi[M(\xi)]$.

Dôležitá je štatistická interpretácia kritérií. Napr. kritérium D-optimality ($\Phi(M) = -\ln \det M$) vedie

- ku minimalizácii zovšeobecnenej disperzie odhadov,
- ku minimalizácii objemu elipsoidu spoľahlivosti,
- ku minimalizácii entropie rozdelenia pravdepodobnosti odhadu $\hat{\theta}$.

Z výpočtových dôvodov nemenej dôležité sú aj analytické vlastnosti funkcie Φ : najčastejšie sa stretávame s konvexnosťou, polospojitosťou zdola, niekedy je funkcia Φ diferencovateľná a pod.

c) Základná veta optimalizácie lineárneho experimentu

Platí nasledujúca veta: Nech Φ je konvexná a nech existuje $\nabla \Phi[M(\xi^*)]$ (= gradient funkcie Φ v bode $M(\xi^*)$). Potom návrh ξ^* je Φ -optimálny vtedy a len vtedy, keď

$$\min_{x \in \mathcal{X}} f^T(x) \nabla \Phi[M(\xi^*)] f(x) k^{-1}(x) = \text{tr } M(\xi^*) \nabla \Phi[M(\xi^*)] ,$$

(napr. v prípade D-optimality táto podmienka má tvar

$$\max_{x \in \mathcal{X}} f^T(x) M^{-1}(\xi^*) f(x) k^{-1}(x) = m) .$$

Naviac platí tvrdenie: Nech ξ je ľubovoľný návrh taký, že $\Phi[M(\xi)] < \infty$, $\nabla \Phi[M(\xi)]$ existuje. Potom platí

$$|\Phi[M(\xi)] - \inf_{\mu} \Phi[M(\mu)]| \leq \text{tr } M(\xi) \nabla \Phi[M(\xi)] - \min_{x \in \mathcal{X}} f^T(x) \nabla \Phi[M(\xi)] f(x) k^{-1}(x) .$$

Uvedené tvrdenia dávajú možnosť rýchlo preveriť na počítači či daný (ľubovoľne zvolený) návrh ξ je Φ -optimálny alebo "takmer Φ -optimálny". Takéto preverovanie možno pomerne ľahko vykonať pre rôzne kritériá optimality a získať tak súhrnnú predstavu o kvalite návrhu experimentu.

d) Iteračné metódy výpočtu

Pre výpočet Φ -optimálnych návrhov existuje rad iteračných metód (pozri napr. [15], kap. V), ktoré majú značne univerzálne použitie a sú pomerne jednoduché. Pravidlo za-

stavania takýchto metód je obsažené v horeuvedenej "základnej vete".

Čo dnes možno považovať za klady a zápory metód optimalizácie lineárneho experimentu a aký je stav teórie? Metódy sú dobre aplikovateľné tam, kde presne poznáme regresný model (napr. v geodézii). Zmena modelu však môže znamenať podstatnú zmenu optimálneho návrhu experimentu. Na druhej strane pre použitie metód nie je kritický spôsob odhadovania parametrov (aspoň v asymptotickom prípade). Je kuriózne, že teória optimalizácie lineárneho experimentu nefunguje, ak pozorovania sú korelované. V takom prípade sú potrebné principiálne iné prístupy, ktoré dodnes nie sú uspokojivo vybudované. V prípade nekorelovaných pozorovaní sa teória pocituje ako "zasýtená". Ťažisko sa presúva na aplikácie a na "perfekcionalizovanie" teórie. Objavili sa nečakané aplikácie: kontrola kvality v Japonsku alebo "image processing". Záujem o aplikácie dokumentuje aj niekoľko nedávno vydaných prehľadových článkov v časopise Technometrics. V mnohom však ide o istý návrat ku Fisherovým koncepciám.

3. OPTIMALIZÁCIA NELINEÁRNEHO EXPERIMENTU

V tomto paragrafe naznačíme pokusy o prekonanie úskalí, ktoré vznikajú, ak namiesto lineárneho modelu uvažujeme nelineárny model. Východiskový model je podobný ako v predchádzajúcom paragrafe, avšak je nelineárny. Teda

$$E[y_x] = \eta(x, \theta), \quad \text{Var}[y_x] = \sigma^2_k(x); \quad (x \in \mathcal{X}),$$

kde funkcia $\eta(x, \theta)$ je nelineárna v θ . Je vhodné predpokladať taktiež, že y_x je normálne rozdelená veličina. Odhady parametrov sú tie isté ako v lineárnom modeli, t.j.

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \sum_{i=1}^N k^{-1}(x_i) [y_{x_i} - \eta(x_i, \theta)]^2.$$

Tu $(x_1, \dots, x_N) := X$ je zvolený návrh experimentu. Jednotlivé pozorovania sú nezávislé. Na rozdiel od lineárneho modelu obťažnou otázkou je miera kvality návrhu experimentu. Budeme sa tu zaoberať výlučne touto otázkou.

Už pri predbežnej analýze vlastností odhadu $\hat{\theta}$ zistíme, že na rozdiel od lineárneho modelu

a) kvalita odhadu $\hat{\theta}$ môže výrazne závisieť od lokalizácie skutočného θ v parametrickom priestore Θ .

b) Podľa veľkosti disperzie pozorovaných veličín a podľa zakrivenia plochy

$$\mathcal{E} := \{z \in \mathbb{R}^N : z_1 = \eta(x_1, \theta), \dots, z_N = \eta(x_N, \theta); \theta \in \Theta\}$$

musíme rozlišovať tri značne odlišné prípady,

1) disperzie sú malé. V takom prípade nelineárny model možno približne linearizovať, napr. použitím Taylorovej formuly

$$\eta(x_i, \theta) = \eta(x_i, \theta^*) + \sum_k \frac{\partial \eta(x_i, \theta^*)}{\partial \theta_k} (\theta_k - \theta_k^*)$$

v okolí nejakého bodu θ^* ,

ii) disperzie sú veľmi veľké. V takom prípade aj odhad $\hat{\theta}$ stráca zmysel, výsledky sú zcestné. Je potrebné aproximovať dáta jednoduchším modelom, alebo ďalšími meraniami zlepšiť presnosť odhadov,

iii) disperzie sú "stredné". Tento prípad je prístupný netriviálnej teoretickej analýze so zaujímavými dôsledkami.

Optimalizácia experimentu v prípade i) sa plne zhoduje s optimalizáciou lineárneho experimentu, v ktorom definitóricky kladieme

$$\{f(x)\}_i := \frac{\partial \eta(x, \theta^*)}{\partial \theta_i} .$$

Teda informačná matica návrhu x_1, \dots, x_N má tvar

$$M(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \eta(x_i, \theta^*)}{\partial \theta^T} \frac{\partial \eta(x_i, \theta^*)}{\partial \theta} k^{-1}(x_i)$$

a ďalší postup je zhodný s postupom v lineárnom prípade.

Prípad ii) nie je zatiaľ dost preskúmaný, aby sme mohli formulovať kritériá optimality experimentu.

Situáciu, ktorá dnes existuje v prípade iii) budeme ilustrovať na rôznych prístupoch ku zovšeobecneniu kritéria D-optimality z lineárneho na nelineárny experiment. Ako sme už uviedli, kritérium D-optimality má tri štatistické interpretácie, pričom každá z nich vedie ku iným výsledkom v nelineárnom prípade.

1. Kritérium založené na objeme oblasti spoľahlivosti pre parameter θ

Takéto kritérium optimality bolo navrhnuté v práci [9]. Bola ovšem použitá len približná (i keď dost dobrá) oblasť spoľahlivosti. Funkcia vyjadrujúca kritérium optimality bola získaná aproximáciou objemu oblasti spoľahlivosti pomocou kvadratickej Taylorovej formuly. Výsledná funkcia len veľmi približne vyjadruje tento objem, nie je invariantná na reparametrizáciu regresného modelu (v lineárnom prípade je takáto invariancia) a je natoľko zložitá, že nie sú známe numerické metódy na výpočet optimálneho návrhu experimentu.

2. Kritérium založené na zovšeobecnenej disperzii odhadov $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m$

Takéto kritérium zatiaľ neexistuje, pretože existujú len veľmi približné a ťažkopádne vzťahy pre aproximáciu kovariančnej matice odhadov $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m$ (pozri prácu [3]).

3. Kritérium založené na entropii rozdelenia pravdepodobnosti odhadu $\hat{\theta}$

Ak označíme $q(\hat{\theta}|\theta)$ hustotu pravdepodobnosti odhadu $\hat{\theta}$, tak entropia má tvar

$$- E_{\theta} \{ \ln q(\hat{\theta}|\theta) \}$$

kde $E_{\theta}(\cdot)$ je operátor stredovania pri danom θ .

V autorovej práci [16] bola získaná pomerne presná neasymptotická aproximácia pre $Q(\hat{\theta}|\theta)$ a táto bola použitá pre stanovenie entropie v ďalšej práci [18]. Tu sa ukázalo, že dôležitú úlohu hrajú matice

$$Q(x_1, \dots, x_N) = M(x_1, \dots, x_N) + \Delta(x_1, \dots, x_N)$$

$$W(x_1, \dots, x_N) = Q(x_1, \dots, x_N)M^{-1}(x_1, \dots, x_N)Q(x_1, \dots, x_N) \quad ,$$

kde $\Delta(x_1, \dots, x_N)$ je korekčný člen obsahujúci aj derivácie $\partial^2 \eta(x, \theta) / \partial \theta_i \partial \theta_j$, teda rešpektujúci nelineárnosť modelu (v lineárnom prípade $Q = W = M$). Naviac, v práci [18] je dokázané, že obe matice Q a W majú niekoľko vlastností, ktoré oprávňujú nazvať tieto matice informačnými maticami v nelineárnom regresnom experimente. (V [18] je ukázané na príklade, že klasická Fisherova informačná matica zlyháva v neasymptotickom nelineárnom prípade.) Entropiu rozdelenia pravdepodobnosti odhadu $\hat{\theta}$ možno dobre aproximovať výrazom

$$\text{konst} - E_{\theta} \{ \ln \det [W(x_1, \dots, x_N)] \} \quad .$$

(Analogicky, ľubovoľné lineárne kritérium optimality Φ môže zovšeobecniť pre nelineárny prípad výrazom

$$E_{\theta} \{ \Phi [W(x_1, \dots, x_N)] \} \quad .$$

Takto získané kritérium D-optimality je invariantné na reparametrizáciu modelu, dobre vystihuje informačný obsah odhadu $\hat{\theta}$. Žiaľ, je natoľko zložitá, že ani tu nepoznáme výpočtové metódy pre stanovenie optimálneho návrhu experimentu.

LITERATÚRA

- [1] Bandemer, H. a kol. (1977,1979): Theorie und Anwendung der optimalen Versuchsplanung. Akademie - Verlag, Berlin 1977 (1. diel), 1979 (2. diel).
- [2] Beth, T., Jugnickel, D., Lenz, H. (1987): Design Theory. Cambridge University Press.
- [3] Clarke, G. P. Y. (1980): Moments of the least squares estimators in non-linear regression model. J. R. Statist. Soc. B 42, 227 - 237.
- [4] Das, M. N., Giri, N. C. (1979): Design and Analysis of Experiments. Wiley Eastern, New Delhi.
- [5] Fedorov, V. V. (1971): Teoriya optimal'nogo eksperimenta. Nauka, Moskva (anglický preklad Academia Press 1972).
- [6] Fedorov, V. V., Pázman, A. (1968): Design of physical experiments. Fortschritte der Physik 16, 325 - 358.
- [7] Fisher, R. A. (1935): The Design of Experiments. Oliver and Boyd, Edinburg.
- [8] Guest, P. G. (1958): The spacing of observations in polynomial regression. Ann. Math. Stat. 29, 294 - 299.
- [9] Hamilton, D. C., Watts, D. G. (1985): A quadratic design criterion for precise estimation in nonlinear regression models. Technometrics 27, 241 - 250.

- [10] Hoel, P. G. (1958): Efficiency problems in polynomial estimation. *Ann. Math. Stat.* 29, 1134 - 1145.
- [11] Jermakov, S. M. a kol. (1983): *Matematičeskaja teorija planirovanija eksperimenta*. Nauka, Moskva.
- [12] Kiefer, J., Wolfowitz, J. (1959): Optimum design in regression problems. *Ann. Math. Stat.* 30, 271 - 294.
- [13] Kiefer, J. (1980): Optimal design theory in relation to combinatorial design. *Annals of Discrete Mathematics* 6, 225 - 241.
- [14] Montgomery, D. C. (1976): *Design and Analysis of Experiments*. J. Wiley, N. Y.
- [15] Pázman, A. (1980): *Základy optimalizácie experimentu*. Veda, Bratislava.
(Anglický preklad: *Foundations of Optimum Experimental Design*, Reidel, Dordrecht 1986.)
- [16] Pázman, A. (1984): Probability distribution of the multivariate nonlinear least squares estimates. *Kybernetika* 20, 209 - 230.
- [17] Pázman, A. a kol.: *Riešené situácie z navrhovania experimentov*. Alfa, Bratislava, 1986.
- [18] Pázman, A. (1989): On information matrices in nonlinear experimental design. *J. Statist. Planning and Inference* 21, 253 - 263.
- [19] Rasch, D., Herrendörfer, G. (1986): *Experimental Design. Sample Size Determination and Block Design*. D. Reidel, Dordrecht.
- [20] Silvey, S. (1980): *Optimal Design*. Chapman Hall, London.