

Rafał Róžański

**EKSPERYMENTY OPTYMALNE
ZE WZGLĘDU NA WYBRANE KRYTERIA
W MODELACH WSPÓŁDZIAŁYWANIA**

Praca przygotowana pod kierunkiem
Prof. dra hab. Augustyna Markiewicza
i przedłożona jako rozprawa doktorska
Radzie Wydziału Matematyki i Informatyki
Uniwersytetu im. A. Mickiewicza w Poznaniu

POZNAŃ, 2010

Chciałbym wyrazić wdzięczność
mojemu Promotorowi
Prof. dr. hab. Augustynowi Markiewiczowi
za ogromną pomoc, okazaną mi troskę
oraz za wszystko co dla mnie zrobił.

mojej żonie Monice

SPIS TREŚCI

Wstęp	1
1. Podstawowe pojęcia oraz oznaczenia	5
1.1. Model liniowy doświadczenia blokowego	5
1.2. Macierz informacji	9
1.3. Estymowalność i spójność	12
1.4. Kryteria optymalności	13
1.5. Narzędzia algebraiczne	20
2. Spójność układów doświadczalnych	23
2.1. Spójność układów w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$	23
2.2. Spójność układów w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$	26
3. Układy E-optymalne	35
3.1. Układy E-optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$, $p \in \mathbf{N}$	35
3.2. Układy E-optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t}$, $p \in \mathbf{N}$	42
3.3. Konstrukcja układów E-optymalnych	45
4. Układy D-optymalne	54
4.1. Układy D-optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$	55
4.2. Układy D-optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t,t}$	64
4.2. Konstrukcja układów D-optymalnych	71
5. Wnioski końcowe	73
Bibliografia	76

Wstęp

Jednym z zagadnień rozważanych w teorii eksperymentu jest wyznaczanie układów optymalnych. Użycie optymalnego planu eksperymentu pozwala na najbardziej precyzyjną ocenę nieznanymi parametrów. Jeśli w eksperymencie obiekty wzajemnie na siebie oddziałują, to rozważać można blokowy model współoddziaływania. Model ten stosuje się między innymi w serologii przy badaniu wirusów (Rees, 1967) oraz w doświadczeniach leśniczych (Monod, 1992). Ma on również zastosowanie w eksperymentach rolniczych i ogrodniczych, przy badaniu wzajemnego wpływu sąsiadujących ze sobą roślin, w tym w analizie rozprzestrzeniania się chorób (Jenkyn i Dyke, 1985).

W ostatnich latach zostały opublikowane pewne wyniki dotyczące uniwersalnej optymalności binarnych układów doświadczalnych w modelach współoddziaływania (zobacz między innymi Bailey i Druilhet, 2004, Druilhet, 1999, Filipiak i Markiewicz, 2003, 2004, 2005, 2007). Prace te dotyczą głównie optymalności kołowych układów zrównoważonych ze względu na sąsiedztwo oraz tablic ortogonalnych typu I w stałym oraz mieszanym modelu współoddziaływania, gdy obserwacje są lub nie są skorelowane.

Warunkiem koniecznym istnienia układów uniwersalnie optymalnych jest spełnienie dość restrykcyjnego wymagania nałożonego na parametry układu. W związku z tym, dla wielu zestawów parametrów nie istnieją eksperymenty uniwersalnie optymalne, o których mowa w literaturze. W takiej sytuacji bada się efektywność pewnych układów szeroko stosowanych w praktyce lub rozważa się optymalność ze względu na wybrane kryteria.

Częściowe wyniki dotyczące wyznaczania eksperymentów A-, D- oraz E- optymalnych w modelu blokowym, w którym jedynym czynnikiem zakłócającym są efekty blokowe, zostały przedstawione między innymi w pracach Balasubramanian i Dey (1996), Constantine (1981), (1982), (1986), Gaffke (1982), Jacroux (1982), (1983), (1991), Krafft i Schaefer (1997) czy też Srivastav i Shankar (2003).

Problem wyznaczania układów optymalnych ze względu na wybrane kryteria w modelach współoddziaływania nie był do tej pory w literaturze rozważany. Głównym celem niniejszej pracy jest podanie charakterystyki układów D- oraz E- optymalnych w kołowych modelach współoddziaływania. Układy optymalne zostaną wyznaczone poprzez zbadanie własności algebraicznych, w szczególności własności spektralnych ich macierzy informacji Fishera dla estymacji efektów obiektowych. Dodatkowe parametry zakłócające znacznie komplikują wyznaczenie macierzy informacji, co czyni charakterystykę układów optymalnych znacznie trudniejszą niż w przypadku standardowego modelu doświadczenia blokowego. Ponadto w doświadczeniach, w których występują efekty współoddziaływania, istotną rolę odgrywa kolejność obiektów rozmieszczonych w blokach, co powoduje zdecydowany wzrost liczby układów eksperymentalnych dla zadanych parametrów i sprawia, że numeryczne wyznaczenie układów optymalnych jest trudne i czasochłonne dla małej liczby obiektów i wręcz niemożliwe, gdy liczba ta jest duża.

Wyniki zawarte w pracy dotyczą eksperymentów założonych w blokach kompletnych, to znaczy takich, w których pojemność bloków jest równa liczbie obiektów. Układy takie są często stosowane w praktyce. Na przykład w doświadczeniach prowadzonych przez UPOV (The International Union for the Protection of New Varieties of Plants) stosowane są układy o blokach kompletnych z liczbą obiektów mniejszą niż 16. Eksperymenty takie są stosowane również w doświadczeniach klinicznych (Rees, 1967).

W pracy Constantine (1981) poszukiwane były układy E- optymalne w modelu blokowym bez dodatkowych efektów zakłócających w klasach układów, w których liczba bloków jest o jeden lub dwa mniejsza oraz większa od takiej, dla

której istnieje układ uniwersalnie optymalny. Podobne podejście zostanie zastosowane w pracy do wyznaczania układów D- oraz E-optymalnych. Z uwagi na bardziej skomplikowaną postać macierzy informacji techniki dowodowe zastosowane w pracy są odmienne od dotychczas stosowanych w literaturze i bazują głównie na metodach algebry liniowej, w tym na najnowszych wynikach z tej dziedziny. Podanie charakterystyki układów D-optymalnych okazało się możliwe między innymi dzięki wynikom algebraicznym zawartym w pracy Molinari (2008). Również konstrukcja układów optymalnych w modelu współoddziaływania jest w ogólności bardziej złożona, niż analogiczne konstrukcje w modelu blokowym bez dodatkowych efektów zakłócających, gdzie sprowadza się ona do usunięcia lub dodania bloków do układu uniwersalnie optymalnego; porównaj np. Constantine (1981).

Ważnym problemem rozważanym w teorii eksperymentu jest także wyznaczanie zbioru układów spójnych w zadanym modelu. Charakterystyka takich układów w kołowych modelach współoddziaływania nie była dotychczas w literaturze analizowana. Celem tej pracy jest zatem również wyznaczenie oraz podanie charakterystyki układów spójnych. Dodatkową motywacją do opisanego warunków spójności jest fakt, iż eksperymenty D- oraz E-optymalne należą do klasy układów spójnych. Jak zostanie pokazane, charakteryzowanie układów spójnych w modelach współoddziaływania można w pewnych sytuacjach wiązać z poszukiwaniem układów spójnych w modelu, w którym jedynym czynnikiem zakłócającym są efekty blokowe. Podobnie jak w przypadku badania optymalności eksperymentów, metody poszukiwania układów spójnych zostały oparte na własnościach macierzy informacji.

W Rozdziale 1 przedstawione zostały najważniejsze pojęcia oraz zagadnienia poruszane w pracy. Na początku zaprezentowany został model liniowy doświadczenia blokowego. Następnie model ten został rozbudowany o dodatkowy komponent związany ze współoddziaływaniem obiektów. W dalszej części rozdziału przedstawione zostały różne typy układów doświadczalnych oraz ich macierze informacji. Kolejny podrozdział poświęcony został estymowalności efektów obiektowych oraz spójności układów doświadczalnych. Na koniec zostały

zaprezentowane kryteria optymalności rozważane w kolejnych rozdziałach oraz najważniejsze narzędzia algebraiczne stosowane w pracy.

Rozdział 2 poświęcony jest zagadnieniu spójności układów eksperymentalnych w modelu współoddziaływania z efektami sąsiedztwa. Zostały tu podane warunki konieczne spójności w klasie wszystkich układów. Wyznaczona została również minimalna liczba bloków konieczna do zapewnienia istnienia układu spójnego. W dalszym ciągu scharakteryzowana została pewna podklasa układów binarnych pełniąca istotną rolę w zagadnieniu optymalności, a następnie pokazane zostało, że wszystkie układy z tej klasy są spójne. Przedstawiony również został związek między spójnością eksperymentów w modelu współoddziaływania a spójnością pewnych układów w modelu blokowym bez dodatkowych efektów zakłócających. Na zakończenie podano warunek konieczny i dostateczny spójności w sytuacji, gdy macierz lewego sąsiedztwa układu jest permutacyjnie podobna do macierzy cyrkulentnej.

Celem Rozdziałów 3 i 4 jest scharakteryzowanie układów E-optymalnych oraz D-optymalnych. W pierwszej części tych rozdziałów sformułowany został warunek dostateczny, aby układ był odpowiednio E- oraz D-optymalny w pewnej podklasie układów binarnych w modelu współoddziaływania. Następnie zostało wykazane, że eksperymenty te są optymalne w klasie wszystkich układów. Wyniki te zostały uzyskane dla układów o blokach kompletnych. Rozważana liczba bloków jest związana z wielokrotnością $t - 1$, gdzie t jest liczbą obiektów, gdyż dla takiej liczby bloków w klasie układów o blokach kompletnych istnieje układ uniwersalnie optymalny. W przypadku układów E-optymalnych rozważano liczbę bloków $p(t - 1) - 1$ oraz $p(t - 1) + 1$, gdzie $p \in \mathbf{N}$. Dla układów D-optymalnych analizowana liczba bloków wynosiła $t - 2$ oraz t . Na końcu tych rozdziałów podane zostały metody konstrukcji układów optymalnych.

W Rozdziale 5 zaprezentowane zostały hipotezy wynikające ze wstępnych analiz dotyczących układów A-optymalnych. Na zakończenie przedstawione zostało krótkie omówienie wyników dotyczących własności układów cyklicznych w modelu współoddziaływania, które mogą być zarówno układami niespójnymi jak i uniwersalnie optymalnymi.

1. Podstawowe pojęcia oraz oznaczenia

W rozdziale tym przedstawione zostaną najważniejsze pojęcia oraz zagadnienia poruszane w pracy. Na początku zaprezentowany zostanie model liniowy doświadczenia blokowego oraz model współoddziaływania z efektami sąsiedztwa. W dalszej części rozdziału przedstawione zostaną różne typy układów doświadczalnych oraz macierz informacji eksperymentu opisanego kołowym modelem współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa. Kolejny podrozdział poświęcony zostanie estymowalności efektów obiektowych oraz spójności układów. Na koniec zdefiniowane zostaną kryteria optymalności rozważane w kolejnych rozdziałach oraz zaprezentowane zostaną najważniejsze narzędzia algebraiczne stosowane w niniejszej pracy.

1.1. Model liniowy doświadczenia blokowego

Rozważmy eksperyment, w którym porównujemy t obiektów rozmieszczonych na $n = bk$ niejednorodnych jednostkach doświadczalnych, pogrupowanych w b jednorodnych bloków o jednakowej pojemności k . *Układem blokowym* nazywamy rozmieszczenie t obiektów na wszystkich k jednostkach doświadczalnych w każdym z b bloków. Tak zdefiniowane układy będziemy oznaczać przez d . Niech $\mathcal{D}_{t,b,k}$ będzie zbiorem układów blokowych o parametrach t , b i k oraz niech $d(i, j) \in \{1, 2, \dots, t\}$ będzie obiektem przyporządkowanym j -tej jednostce eksperymentalnej w i -tym bloku, $i = 1, 2, \dots, b$, $j = 1, 2, \dots, k$. Modelem blokowym takiego doświadczenia nazywamy następujący model liniowy

$$y_{ij} = \tau_{d(i,j)} + \beta_i + \epsilon_{ij}, \quad (1.1)$$

gdzie y_{ij} oznacza wartość obserwacji na j -tej jednostce eksperymentalnej w i -tym bloku, $\tau_{d(i,j)}$ jest efektem obiektu $d(i,j)$, β_i oznacza efekt i -tego bloku, natomiast ϵ_{ij} jest błędem losowym o rozkładzie normalnym, z wartością oczekiwaną równą 0 oraz wariancją σ^2 , $i = 1, 2, \dots, b$, $j = 1, 2, \dots, k$.

Wektor obserwacji można zapisać jako $\mathbf{y} = (y_{11}, y_{12}, \dots, y_{1k}, y_{21}, \dots, y_{bk})'$. Oznaczmy przez $\mathbf{T}_{di} \in \mathbf{R}_{k \times t}$ macierz układu dla efektów obiektowych w i -tym bloku, $1 \leq i \leq b$. Wówczas $\mathbf{T}_d = (\mathbf{T}'_{d1} : \dots : \mathbf{T}'_{db})'$ jest macierzą układu dla efektów obiektowych. Ponieważ macierz ta jest zależna od układu, będziemy ją indeksować przez d . Przyjmując, że \mathbf{I}_b jest macierzą jednostkową stopnia b , $\mathbf{1}_k \in \mathbf{R}^k$ jest wektorem kolumnowym, którego składowymi są jedynki, natomiast symbol \otimes oznacza iloczyn Kroneckera, z założenia o jednakowej pojemności bloków macierz układu dla efektów blokowych można zapisać w postaci $\mathbf{B} = \mathbf{I}_b \otimes \mathbf{1}_k$, która nie zależy od układu doświadczalnego. Model (1.1) w zapisie wektorowym przyjmuje wówczas postać

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}_d \boldsymbol{\tau} + \mathbf{B} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (1.2)$$

gdzie $\boldsymbol{\tau} \in \mathbf{R}^t$ jest nieznanym wektorem efektów obiektowych, $\boldsymbol{\beta} \in \mathbf{R}^b$ jest nieznanym wektorem efektów blokowych, natomiast $\boldsymbol{\epsilon} \in \mathbf{R}^n$ jest wektorem błędów losowych, podlegającym wielowymiarowemu rozkładowi normalnemu z zerowym wektorem wartości oczekiwanych $\mathbf{0}_n \in \mathbf{R}^n$ i macierzą wariancji-kowariancji $\text{Var}(\boldsymbol{\epsilon}) = \boldsymbol{\Sigma}$, gdzie $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbf{R}_n$ jest macierzą określoną dodatnio.

Przyjmijmy, że jednorodne jednostki doświadczalne tworzą liniowe bloki oraz, że na obiekt w bloku może oddziaływać obiekt umieszczony na sąsiedniej jednostce eksperymentalnej. W takiej sytuacji będziemy rozpatrywać model blokowy, w którym występują dodatkowe efekty zakłócające. W przypadku, gdy na obiekt $d(i,j)$ oddziałuje obiekt $d(i,j-1)$, model taki nazywamy *modelem współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa* i przyjmuje on następującą postać

$$y_{ij} = \tau_{d(i,j)} + \lambda_{d(i,j-1)} + \beta_i + \epsilon_{ij},$$

gdzie $\lambda_{d(i,j-1)}$ są efektami lewego sąsiedztwa obiektu $d(i,j)$, natomiast $\tau_{d(i,j)}$, β_i oraz ϵ_{ij} określone są tak samo jak w modelu (1.1).

Dla każdego $1 \leq i \leq b$ oznaczymy przez $\mathbf{L}_{di} \in \mathbf{R}_{k \times t}$ macierz układu d dla efektów lewego sąsiedztwa w i -tym bloku. Macierz $\mathbf{L}_d = (\mathbf{L}'_{d1} : \dots : \mathbf{L}'_{db})'$ jest wówczas macierzą układu dla efektów lewego sąsiedztwa. Przy powyższych oznaczeniach model współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa dla układu $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ można zapisać w następującej postaci wektorowej

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}_d \boldsymbol{\tau} + \mathbf{L}_d \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{B} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (1.3)$$

gdzie $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbf{R}^t$ jest nieznanym wektorem efektów lewego sąsiedztwa. W modelu (1.3) macierz układu dla efektów współoddziaływania, \mathbf{L}_d , jest następującym przekształceniem macierzy układu dla efektów obiektowych

$$\mathbf{L}_d = (\mathbf{I}_b \otimes \mathbf{H}_k) \mathbf{T}_d,$$

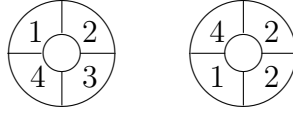
gdzie $\mathbf{H}_k \in \mathbf{R}_k$ jest *macierzą incydencji lewego sąsiedztwa*; porównaj Kunert i Martin (2000). W zależności od postaci tej macierzy możemy rozpatrywać kołowy lub niekołowy model współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa.

Jeśli w eksperymencie każdy obiekt w bloku, poza pierwszym, ma lewego sąsiada, to macierz \mathbf{H}_k przyjmuje postać

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0}'_{k-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{I}_{k-1} & \mathbf{0}_{k-1} \end{pmatrix}.$$

Takie układy nazywamy *układami niekołowymi*. Optymalność układów niekołowych była rozważana zarówno w doświadczeniach z powtórzonymi pomiarami (porównaj np. Kushner, 1997), jak i w eksperymentach opisanych modelem współoddziaływania; porównaj np. Kunert i Martin (2000) oraz Filipiak i Różański (2003).

W pracy rozważać będziemy takie eksperymenty, w których każdy obiekt w bloku ma lewego sąsiada. Założenie to jest spełnione między innymi w sytuacji, gdy bloki mają kształt koła. Na przykład układ, którego jednostki eksperymentalne zostały pogrupowane w 2 bloki po 4 jednostki i na których rozmieszczone zostały cztery objekty oznaczone przez 1, 2, 3, 4, można przedstawić w następującej postaci ($t = k = 4$ oraz $b = 2$).



Jednak w praktyce jednostki eksperymentalne są zwykle ułożone w bloku liniowo. Efekt bloku kołowego można wówczas uzyskać poprzez dodanie do każdego bloku *jednostki brzegowej* na początku lub na końcu bloku oraz umieszczenie na niej obiektu, który znajduje się na przeciwnym końcu bloku. Jednostki brzegowe pełnią jedynie rolę pomocniczą i nie biorą udziału w analizie doświadczenia. Jednostki eksperymentalne wchodzące w skład bloku nazywamy *jednostkami wewnętrznymi*. Zatem powyższy przykład można przedstawić w postaci liniowej następująco

$$d = \left(\begin{array}{c|cccc} 4 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline 2 & 1 & 4 & 2 & 2 \end{array} \right),$$

gdzie jednostki brzegowe umieszczone są na początku każdego bloku.

Układ, w którym każdy obiekt w bloku ma lewego sąsiada nazywamy *układem kołowym*; porównaj np. Kunert (1984), Druilhet (1999) oraz Shah i Sinha (1989), a macierz \mathbf{H}_k przyjmuje wówczas postać

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{0}'_{k-1} & 1 \\ \mathbf{I}_{k-1} & \mathbf{0}_{k-1} \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

W pracy rozważany będzie kołowy model współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa. Niemniej jednak uzyskane wyniki można zaadaptować również do kołowego modelu współoddziaływania z efektami prawego sąsiedztwa, w którym macierz incydencji prawego sąsiedztwa jest macierzą transponowaną do macierzy (1.4).

Ponieważ rozważać będziemy model, w którym efekty obiektowe i blokowe są stałe, dlatego będziemy przyjmować, że macierz wariancji-kowariancji wektora obserwacji jest równa macierzy wariancji-kowariancji wektora błędów losowych, to znaczy $\text{Var}(\mathbf{y}) = \mathbf{\Sigma}$. Ponadto zakładamy, że obserwacje są nieskorelowane z jednakową wariancją σ^2 , gdzie σ^2 jest znaną stałą. Oznacza to, że $\mathbf{\Sigma} = \sigma^2 \mathbf{I}_n$. W przypadku, gdy σ^2 nie jest znana, rezultaty podane w pracy są

nadal prawdziwe, jednakże przedstawione układy są optymalne ze względu na precyzję w estymacji najmniejszych kwadratów.

Modele (1.2) i (1.3) można zapisać w ogólniejszej postaci następująco

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}_d\boldsymbol{\tau} + \mathbf{Z}_d\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (1.5)$$

gdzie $\mathbf{Z}_d \in \mathbf{R}_{n \times m}$ jest macierzą układu dla efektów zakłócających oraz $\boldsymbol{\gamma} \in \mathbf{R}^m$ jest nieznanym wektorem efektów zakłócających. Parametr m jest sumą wymiarów wszystkich wektorów efektów zakłócających. Ponieważ w modelu (1.2) jedynymi parametrami zakłócającymi są efekty blokowe, model ten otrzymujemy z modelu (1.5) dla $\mathbf{Z}_d = \mathbf{B}$ oraz $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\beta}$, a więc $m = b$. Natomiast model (1.3) można zapisać w postaci (1.5), przyjmując $\mathbf{Z}_d = (\mathbf{L}_d : \mathbf{B})$, $\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\lambda}' : \boldsymbol{\beta}')'$ oraz $m = t + b$.

1.2. Macierz informacji

W dalszej części pracy bez straty ogólności będziemy zakładać, że $\sigma^2 = 1$, zatem $\Sigma = \mathbf{I}_n$. W doświadczeniu opisanym modelem (1.2) przy założeniu normalności rozkładu prawdopodobieństwa wektora obserwacji \mathbf{y} , macierz informacji Fishera dla estymacji wektora efektów obiektowych $\boldsymbol{\tau}$, może być wyrażona jako następujące dopełnienie Schura

$$\mathbf{C}_{0d} = [\mathbf{M}_{0d} / \mathbf{B}'\mathbf{B}],$$

gdzie $\mathbf{M}_{0d} = (\mathbf{T}_d : \mathbf{B})'(\mathbf{T}_d : \mathbf{B})$ jest macierzą momentów układu d ; porównaj np. Pukelsheim (1993).

Przypomnijmy, że dla danej określonej nieujemnie macierzy blokowej $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_{ij})_{1 \leq i, j \leq 2}$, dopełnieniem Schura macierzy \mathbf{A}_{22} w macierzy \mathbf{A} nazywamy wyrażenie

$$[\mathbf{A} / \mathbf{A}_{22}] = \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21},$$

gdzie \mathbf{A}_{22}^{-} jest uogólnioną odwrotnością macierzy \mathbf{A}_{22} . Oznaczmy przez $\mathbf{R}_d = \text{diag}(r_{d1}, \dots, r_{dt})$ oraz $\mathbf{K}_d = \text{diag}(k_{d1}, \dots, k_{db})$ macierze diagonalne z odpowiednio replikacjami poszczególnych obiektów w całym doświadczeniu oraz pojemnościami poszczególnych bloków na głównej przekątnej. Przyjmijmy ponadto, że $\mathbf{N}_d = (n_{ij})$, gdzie dla $i = 1, 2, \dots, t$ oraz $j = 1, 2, \dots, b$, element n_{ij} oznacza liczbę wystąpień obiektu i w bloku j , jest *macierzą incydencji* układu d . Macierz informacji można wówczas zapisać następująco

$$\mathbf{C}_{0d} = \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d = \mathbf{R}_d - \mathbf{N}_d \mathbf{K}_d^{-1} \mathbf{N}'_d,$$

gdzie $\mathbf{Q}_X = \mathbf{I}_{m_1} - \mathbf{P}_X$ jest operatorem rzutu ortogonalnego na dopełnienie ortogonalne przestrzeni kolumn macierzy $\mathbf{X} \in \mathbf{R}_{m_1 \times m_2}$ oraz $\mathbf{P}_X = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ jest macierzą rzutu ortogonalnego na przestrzeń kolumn macierzy \mathbf{X} . Ponieważ $\mathbf{B} = \mathbf{I}_b \otimes \mathbf{1}_k$, zatem $\mathbf{Q}_B = \mathbf{I}_b \otimes \mathbf{E}_k$, gdzie $\mathbf{E}_k = \mathbf{I}_k - \frac{1}{k} \mathbf{1}_k \mathbf{1}'_k$. Macierz \mathbf{E}_t jest symetryczna, idempotentna ($\mathbf{E}_t \mathbf{E}_t = \mathbf{E}_t$), $\mathbf{E}_t \mathbf{1}_t = \mathbf{0}_t$ oraz $t - 1$ jej wartości własnych jest równych 1.

Rozważmy model (1.3). Oznaczmy macierz momentów przez \mathbf{M}_d , to znaczy

$$\mathbf{M}_d = (\mathbf{T}_d : \mathbf{L}_d : \mathbf{B})' (\mathbf{T}_d : \mathbf{L}_d : \mathbf{B}) = \begin{pmatrix} \mathbf{T}'_d \mathbf{T}_d & \mathbf{T}'_d \mathbf{L}_d & \mathbf{T}'_d \mathbf{B} \\ \mathbf{L}'_d \mathbf{T}_d & \mathbf{L}'_d \mathbf{L}_d & \mathbf{L}'_d \mathbf{B} \\ \mathbf{B}' \mathbf{T}_d & \mathbf{B}' \mathbf{L}_d & \mathbf{B}' \mathbf{B} \end{pmatrix}.$$

W pracy Markiewicza (1997) zostało pokazane, że macierz informacji \mathbf{C}_d dla estymacji wektora efektów obiektowych $\boldsymbol{\tau}$, przy założeniu normalności rozkładu prawdopodobieństwa wektora obserwacji, może być wyrażona jako funkcja macierzy informacji \mathbf{W}_d dla jednoczesnej estymacji efektów obiektowych i efektów sąsiedztwa. Związek między macierzami \mathbf{W}_d oraz \mathbf{M}_d wyraża się za pomocą następującego dopełnienia Schura

$$\mathbf{W}_d = [\mathbf{M}_d / \mathbf{B}'\mathbf{B}] = \begin{pmatrix} \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d & \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{L}_d \\ \mathbf{L}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d & \mathbf{L}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{L}_d \end{pmatrix}.$$

Oznacza to, że macierz \mathbf{W}_d jest macierzą momentów w modelu zredukowanym, w którym wyeliminowano efekty blokowe.

Z postaci macierzy \mathbf{E}_k oraz ortogonalności macierzy \mathbf{H}_k danej wzorem (1.4) łatwo zauważyć, że

$$\begin{aligned}\mathbf{L}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{L}_d &= \mathbf{L}'_d (\mathbf{I}_b \otimes \mathbf{E}_k) \mathbf{L}_d = \mathbf{T}'_d (\mathbf{I}_b \otimes (\mathbf{H}'_k \mathbf{E}_k \mathbf{H}_k)) \mathbf{T}_d = \\ &= \mathbf{T}'_d (\mathbf{I}_b \otimes \mathbf{E}_k) \mathbf{T}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d.\end{aligned}$$

Zatem macierz informacji dla estymacji wektora efektów obiektowych można wyrazić jako

$$\mathbf{C}_d = [\mathbf{W}_d / \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d] = \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d - \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{L}_d (\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d)^{-1} \mathbf{L}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d. \quad (1.6)$$

Macierz \mathbf{C}_d można również przedstawić w postaci

$$\mathbf{C}_d = \left[\mathbf{M}_d / \begin{pmatrix} \mathbf{L}'_d \mathbf{L}_d & \mathbf{L}'_d \mathbf{B} \\ \mathbf{B}' \mathbf{L}_d & \mathbf{B}' \mathbf{B} \end{pmatrix} \right] = \mathbf{T}'_d \mathbf{T}_d - \mathbf{T}'_d \mathbf{P}_{(L_d:B)} \mathbf{T}_d.$$

Następnie, korzystając z własności $\mathbf{P}_{(L_d:B)} = \mathbf{P}_{L_d} + \mathbf{P}_{Q_{L_d}B} = \mathbf{P}_B + \mathbf{P}_{Q_B L_d}$, otrzymujemy

$$\mathbf{C}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_{L_d} \mathbf{T}_d - \mathbf{T}'_d \mathbf{P}_{Q_{L_d}B} \mathbf{T}_d \quad (1.7)$$

lub równoważnie

$$\mathbf{C}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d - \mathbf{T}'_d \mathbf{P}_{Q_B L_d} \mathbf{T}_d. \quad (1.8)$$

Własności macierzy \mathbf{C}_d jako funkcji macierzy \mathbf{W}_d przedstawione są m.in. w pracach Pukelsheim (1993) oraz Markiewicz (1997).

Ponieważ $\mathbf{R}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{T}_d$, ze wzoru (1.7) otrzymujemy następującą postać macierzy \mathbf{C}_d

$$\mathbf{C}_d = \mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d - \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_{L_d} \mathbf{B} (\mathbf{B}' \mathbf{Q}_{L_d} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}' \mathbf{Q}_{L_d} \mathbf{T}_d, \quad (1.9)$$

gdzie $\mathbf{S}_d = \mathbf{L}'_d \mathbf{T}_d$ będziemy nazywać *macierzą lewego sąsiedztwa*. Element (i, j) macierzy \mathbf{S}_d jest równy liczbie wystąpień obiektu i jako lewego sąsiada obiektu j w układzie doświadczalnym d , $i, j = 1, 2, \dots, t$. Łatwo zauważyć, że w klasie układów, w których żaden obiekt nie jest swoim sąsiadem, elementy diagonalne macierzy \mathbf{S}_d są równe 0, natomiast elementy pozadiagonalne należą do zbioru $\{0, 1, \dots, b\}$. Ponadto, w macierzy tej suma elementów w każdym wierszu i każdej kolumnie jest równa b .

W pracy analizować będziemy *układy binarne*, to znaczy takie, w których każdy obiekt występuje w każdym bloku co najwyżej raz. Klasę układów binarnych będziemy oznaczać przez $\mathcal{B}_{t,b,k} \subset \mathcal{D}_{t,b,k}$. Szczególną rolę pełnić będą *układy o blokach kompletnych*, w których $t = k$.

Rozważmy klasę układów binarnych $\mathcal{B}_{t,b,t}$. Wówczas

$$\mathbf{T}'_d (\mathbf{I}_b \otimes \mathbf{E}_k) \mathbf{T}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{T}_d - \frac{1}{t} \sum_{i=1}^b \mathbf{T}'_{di} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t \mathbf{T}_{di} = b\mathbf{I}_t - \frac{b}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t = b\mathbf{E}_t$$

oraz

$$\mathbf{T}'_d (\mathbf{I}_b \otimes \mathbf{E}_k) \mathbf{L}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{L}_d - \frac{1}{t} \sum_{i=1}^b \mathbf{T}'_{di} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t \mathbf{L}_{di} = \mathbf{S}'_d - \frac{b}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t.$$

Oznaczając $\mathbf{K}_d = \mathbf{S}'_d - \frac{b}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t$, ze wzoru (1.6) otrzymujemy następującą postać macierzy informacji

$$\mathbf{C}_d = b\mathbf{E}_t - \frac{1}{b} \mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d. \quad (1.10)$$

Ponieważ w układach z rozważanej klasy każdy obiekt występuje w doświadczeniu b razy, zachodzi równość $\mathbf{S}'_d \mathbf{1}_t = b\mathbf{1}_t$. Zatem z określenia macierzy \mathbf{K}_d otrzymujemy $\mathbf{K}_d \mathbf{1}_t = \mathbf{K}'_d \mathbf{1}_t = \mathbf{0}_t$. Stąd macierz (1.10) można również przedstawić w następującej postaci

$$\mathbf{C}_d = b\mathbf{I}_t - \frac{1}{b} \mathbf{S}'_d \mathbf{S}_d. \quad (1.11)$$

1.3. Estymowalność i spójność

Celem eksperymentu jest wnioskowanie o efektach obiektowych. Zauważmy, że $\mathbf{C}_d \mathbf{1}_t = \mathbf{0}_t$ i w konsekwencji nie wszystkie funkcje liniowe efektów obiektowych są estymowalne. Funkcję $\boldsymbol{\ell}' \boldsymbol{\tau}$, $\boldsymbol{\ell} \in \mathbf{R}^t$, nazywamy *estymowalną*, gdy istnieje jej liniowy nieobciążony estymator, to znaczy gdy istnieje taki t -wymiarowy wektor \mathbf{a} , że $\boldsymbol{\ell} = \mathbf{C}_d \mathbf{a}$. Ponieważ $\mathbf{1}'_t \mathbf{C}_d = \mathbf{0}'_t$, zatem $\mathbf{1}'_t \boldsymbol{\ell} = \mathbf{1}'_t \mathbf{C}_d \mathbf{a} = \mathbf{0}'_t$. Liniowe funkcje parametryczne wektora efektów obiektowych $\boldsymbol{\ell}' \boldsymbol{\tau}$ spełniające powyższą równość nazywamy *kontrastami obiektowymi*. Stąd jedynymi funkcjami estymowalnymi

wektora efektów obiektowych są kontrasty obiektowe. Jeśli dodatkowo założymy, że wektor $\boldsymbol{\ell}$ ma tylko dwie składowe różne od zera i są one równe 1 oraz -1 , to funkcję taką nazywamy *kontrastem elementarnym*. Kontrasty zdefiniowane poprzez wektory własne macierzy informacji \mathbf{C}_d odpowiadające niezerowym wartościom własnym nazywamy *kontrastami bazowymi*. Stanowią one bazę przestrzeni kontrastów estymowalnych układu d .

Z twierdzenia Gaussa-Markowa wynika, że jeśli funkcja jest estymowalna, to istnieje jej najlepszy nieobciążony liniowy estymator. W ogólnym modelu (1.5) przyjmuje on postać $\widehat{\boldsymbol{\ell}'\boldsymbol{\tau}} = \boldsymbol{\ell}'\hat{\boldsymbol{\tau}}$, gdzie

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} = \left(\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_{Z_d} \mathbf{T}_d\right)^{-} \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_{Z_d} \mathbf{y} = \mathbf{C}_d^{-} \mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_{Z_d} \mathbf{y}. \quad (1.12)$$

Układy eksperymentalne, w których wszystkie kontrasty są estymowalne, nazywamy układami *spójnymi*. Jeśli układ jest spójny, to kontrasty bazowe stanowią bazę przestrzeni wszystkich kontrastów. W odniesieniu do własności macierzy informacji można określić, że układ $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ jest spójny wtedy i tylko wtedy, gdy rząd jego macierzy informacji spełnia warunek $r(\mathbf{C}_d) = t - 1$. Więcej szczegółów na ten temat można znaleźć na przykład w książce Raghavarao i Padgett (2005).

Zauważmy, że macierz lewego sąsiedztwa pojedynczego bloku binarnego kompletnego jest macierzą permutacyjną. Zatem dla $b = 1$ przyjmując $\mathbf{S}_d = \mathbf{P}$ z (1.11) otrzymujemy

$$\mathbf{C}_d = \mathbf{I}_t - \mathbf{P}'\mathbf{P} = \boldsymbol{\Theta}_t,$$

gdzie $\boldsymbol{\Theta}_t \in \mathbf{R}_t$ jest macierzą zerową. Zatem układ d jest niespójny. Stąd w dalszych rozważaniach będziemy zakładać, że liczba bloków wynosi co najmniej 2.

1.4. Kryteria optymalności

W teorii eksperymentu ważnym zagadnieniem jest odpowiednie zaplanowanie doświadczenia, to znaczy takie rozmieszczenie obiektów na jednostkach doświadczalnych, aby możliwe było jak najbardziej precyzyjne oszacowanie nieznanych

efektów obiektowych. Wybór odpowiedniego planu doświadczenia pozwala na uzyskanie maksymalnej, w określonym sensie, ilości informacji zawartej w macierzy informacji Fishera. Eksperymenty najlepsze pod tym względem nazywamy optymalnymi. Wybór najlepszego eksperymentu uzyskuje się poprzez porównanie macierzy informacji. Pełne porównanie macierzy umożliwia jedynie porządek Loewnera. Przypomnijmy, że jeśli $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2 \in \mathbf{R}_m$, to mówimy, że macierz \mathbf{M}_1 poprzedza macierz \mathbf{M}_2 w porządku Loewnera, gdy $\mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_1$ jest macierzą określoną nieujemnie; zobacz Marshall i Olkin (1979). W ogólności nie jest możliwe porównanie macierzy informacji za pomocą porządku Loewnera; porównaj między innymi Pukelsheim (1993).

Należy zatem postawić pytanie, jakim kryterium optymalności się kierować, aby porównać ilość informacji uzyskanej w różnych doświadczeniach. Wybór kryterium pozwala na takie zaplanowanie doświadczenia, aby było ono w wybranym sensie najlepsze. W celu uzyskania możliwości porównywania układów doświadczalnych rozważa się pewną klasę kryteriów. Wśród nich często stosowanymi są A-optymalność, D-optymalność oraz E-optymalność. Najbardziej pożądane jest znalezienie układu, który jest optymalny ze względu na całą klasę kryteriów, w szczególności ze względu na kryteria A-, D- oraz E-optymalności. Takimi eksperymentami są układy uniwersalnie optymalne. Pojęcie uniwersalnej optymalności zostało wprowadzone w pracy Kiefera (1975).

W modelu (1.2) istotną rolę pełnią zrównoważone układy binarne o blokach niekompletnych zdefiniowane następująco.

Definicja 1.1. (John, 1987) *Układy doświadczalne, w których t obiektów jest rozmieszczonych w b blokach o pojemności k ($k < t$) w ten sposób, że każdy obiekt występuje w doświadczeniu r razy oraz każda para różnych obiektów występuje razem w dokładnie l blokach, nazywamy **zrównoważonymi układami binarnymi o blokach niekompletnych (BIBD)**.*

Warunkiem koniecznym istnienia BIBD jest spełnienie przez parametry układu następujących warunków

$$tr = bk, \quad r(k - 1) = l(t - 1).$$

W modelu (1.2) macierz informacji \mathbf{C}_{0d} układu BIB ma postać

$$\mathbf{C}_{0d} = \frac{lt}{k} \mathbf{E}_t;$$

porównaj na przykład John (1987).

W rozważanym w pracy przypadku $t = k$ można zdefiniować klasę zrównoważonych układów binarnych o blokach kompletnych.

Definicja 1.2. (John, 1987) *Układy doświadczalne, w których t obiektów występuje dokładnie raz w każdym z b bloków, nazywamy **zrównoważonymi układami binarnymi o blokach kompletnych (BBD)**.*

W modelu (1.2) macierz informacji \mathbf{C}_{0d} układu BB ma postać

$$\mathbf{C}_{0d} = t \mathbf{E}_t.$$

Podobnie jak układy BIB oraz BB w modelu (1.2), w modelu (1.3) ważną rolę pełnią kołowe układy zrównoważone ze względu na sąsiedztwo. W pracy Druilhet (1999) zostały one zdefiniowane następująco.

Definicja 1.3. *Kołowy układ binarny $d \in \mathcal{B}_{t,b,k}$, zrównoważony w zwykłym sensie, w którym każda uporządkowana para różnych obiektów występuje dokładnie $\frac{bk}{t(t-1)}$ razy na wewnętrznych jednostkach doświadczalnych jako najbliżsi sąsiedzi, nazywamy **kołowym układem zrównoważonym ze względu na sąsiedztwo (CNBD)**.*

Macierz informacji układu CNBD w modelu (1.3) ma postać

$$\mathbf{C}_d = \frac{bk(k-2)}{(t-1)(k-1)} \mathbf{E}_t.$$

Warunkiem koniecznym istnienia układu CNBD jest spełnienie dość restrykcyjnego wymagania nałożonego na parametry układu. Mianowicie wyrażenie $\frac{bk}{t(t-1)}$ musi być liczbą całkowitą. W rozważanej w kolejnych rozdziałach klasie układów o blokach kompletnych warunek ten jest równoważny temu, że liczba

bloków b jest wielokrotnością $t - 1$. Można zatem powiedzieć, że układy CNBD istnieją tylko dla specyficznego zestawu parametrów układu. Katalog układów CNBD został podany w pracy Azaïs i inni (1993).

Oznaczmy przez $\mathcal{D}_{t,b,(n)}$ klasę układów doświadczalnych, w których t obiektów zostało rozmieszczonych na n jednostkach eksperymentalnych pogrupowanych w b jednorodnych bloków, których pojemności mogą być różne; porównaj Kunert (1994). Wprowadzimy teraz pojęcie układów stowarzyszonych.

Definicja 1.4. Niech $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$. **Układem stowarzyszonym** z d będziemy nazywać taki układ $d_s \in \mathcal{D}_{t,b,(n)}$, którego macierz incydencji spełnia warunek $\mathbf{N}_{d_s} = \mathbf{S}'_d$.

Zauważmy, że w i -tym bloku układu d_s znajdują się obiekty, dla których obiekt i -ty jest lewym sąsiadem w układzie doświadczalnym d . Zatem w układzie stowarzyszonym liczba bloków jest równa liczbie obiektów, natomiast pojemność i -tego bloku oraz replikacja i -tego obiektu w d_s jest równa liczbie replikacji i -tego obiektu w d . Jeżeli d jest układem, w którym każdy obiekt występuje r razy, to znaczy $d \in \mathcal{R}_{t,b,k}$, wówczas $d_s \in \mathcal{R}_{t,t,r}$ z liczbą replikacji każdego obiektu równą r . Układ stowarzyszony jest wyznaczony jednoznacznie z dokładnością do kolejności obiektów w blokach. Ponieważ własności układów stowarzyszonych będą w pracy analizowane w modelu (1.2), kolejność ta jest nieistotna.

Przykład 1.1. Niech $t = k = 5$, $b = 3$.

$$d = \left(\begin{array}{c|ccccc} 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 2 & 3 & 5 & 4 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right) \implies \mathbf{N}_{d_s} = \mathbf{S}'_d = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \implies$$

$$\implies d_s = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 5 \\ 1 & 3 & 3 \\ 2 & 4 & 5 \\ 1 & 3 & 5 \\ 1 & 4 & 4 \end{pmatrix}.$$

□

Zdefiniujemy teraz uniwersalną optymalność układów doświadczalnych. Przypomnijmy, że macierz nazywamy *kompletnie symetryczną*, gdy wszystkie jej elementy diagonalne są równe oraz wszystkie elementy pozadiagonalne są równe. Układ doświadczalny $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ nazywamy *uniwersalnie optymalnym* w sensie Kiefera w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$, gdy macierz informacji \mathbf{C}_{d^*} tego układu jest kompletnie symetryczna oraz jej ślad jest maksymalny w tej klasie. Oznacza to, że dla dowolnego układu $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ spełniony jest warunek

$$\text{tr } \mathbf{C}_{d^*} \geq \text{tr } \mathbf{C}_d;$$

porównaj Kiefer (1975). W modelu (1.2) układami uniwersalnie optymalnymi w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$, $k < t$, są BIBD. W tym samym modelu w klasie $\mathcal{D}_{t,b,t}$ uniwersalnie optymalne są BBD. Natomiast w kołowym modelu współoddziaływania uniwersalnie optymalne są układy CNBD (Druilhet, 1999). Własności tych układów były także badane w pracach Filipiak i Markiewicz (2003, 2005, 2007) oraz Bailey i Druilhet (2004).

W sytuacji, gdy parametry układu nie pozwalają na konstrukcję układu uniwersalnie optymalnego, rozważa się zwykle optymalność układów ze względu na specyficzne kryteria. Najczęściej stosowanymi w literaturze są kryteria zdefiniowane poniżej.

Układ $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ nazywamy *A-optymalnym*, gdy suma wariancji znormalizowanych estymatorów kontrastów bazowych jest minimalna w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$. Układem *D-optymalnym* nazywamy taki układ $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$, dla którego iloczyn wariancji znormalizowanych estymatorów kontrastów bazowych jest minimalny w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$. Natomiast przez układ *E-optymalny* rozumiemy taki układ

$d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$, dla którego największa spośród wszystkich wariancji znormalizowanych estymatorów kontrastów bazowych jest minimalna w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$; porównaj John i Williams (1982) oraz John (1987).

Zauważmy, że ze wzoru (1.12) oraz przyjętego założenia o nieskorelowaniu obserwacji, wariancja estymatora kontrastu bazowego ma postać

$$\text{var}(\ell' \hat{\boldsymbol{\tau}}) = \ell' \mathbf{C}_d^- \mathbf{T}_d' \mathbf{Q}_{Z_d} \text{Var}(\mathbf{y}) \mathbf{Q}_{Z_d} \mathbf{T}_d \mathbf{C}_d^- \ell = \ell' \mathbf{C}_d^- \ell.$$

Wynika stąd, że wariancję estymatora kontrastu bazowego można zapisać za pomocą wartości własnych macierzy \mathbf{C}_d^- . Zatem powyższe kryteria optymalności można równoważnie przedstawić, odwołując się do wartości własnych macierzy informacji Fishera \mathbf{C}_d . Wartości własne macierzy informacji \mathbf{C}_d układu $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ oznaczają będziemy przez $\lambda_1(\mathbf{C}_d) \geq \lambda_2(\mathbf{C}_d) \geq \dots \geq \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \geq \lambda_t(\mathbf{C}_d) = 0$.

Układów E- oraz D-optymalnych w klasie wszystkich układów będziemy w pracy poszukiwać wśród układów spójnych, które charakteryzują się maksymalną przestrzenią liniowych funkcji estymowalnych. Zostanie to omówione w dalszej części tego rozdziału. Zatem określając kryteria optymalności będziemy zakładać, że $r(\mathbf{C}_d) = t - 1$, a więc $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) > 0$. W następnym rozdziale pokażemy, że zbiory układów spójnych w rozważanych przez nas klasach układów są niepuste.

Możliwe są dwa podejścia w definiowaniu kryteriów A-, D- oraz E-optymalności w odniesieniu do wartości własnych macierzy \mathbf{C}_d . Pierwsze z nich odnosi się do minimalizowania wariancji estymatorów kontrastów obiektowych; porównaj Raghavarao i Padgett (2005). Wówczas układ jest tym lepszy, im mniejsza jest wartość kryterium. Równoważnie kryteria optymalności można zdefiniować bazując na funkcjonalach wklęsłych; porównaj Pukelsheim (1993). Zgodnie z tym podejściem układ jest tym lepszy, im większa jest wartość funkcjonału, ponieważ niesie on wówczas więcej informacji.

Zgodnie z podejściem odnoszącym się do wariancji estymatorów kontrastów obiektowych, układ $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ nazywamy A-optymalnym, gdy dla dowolnego

układu $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ zachodzi nierówność

$$\sum_{i=1}^{t-1} \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{C}_{d^*})} \leq \sum_{i=1}^{t-1} \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{C}_d)}.$$

Warunek ten można sformułować równoważnie, korzystając z podejścia zaproponowanego przez Pukelsheima w sposób następujący

$$\frac{1}{\sum_{i=1}^{t-1} \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{C}_{d^*})}} \geq \frac{1}{\sum_{i=1}^{t-1} \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{C}_d)}}.$$

Podobnie w odniesieniu do pierwszego podejścia układ $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ nazywamy D- optymalnym, gdy dla dowolnego układu $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ spełniona jest nierówność

$$\left(\prod_{i=1}^{t-1} \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{C}_{d^*})} \right)^{1/t} \leq \left(\prod_{i=1}^{t-1} \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{C}_d)} \right)^{1/t}$$

lub równoważnie bazując na funkcjonalach wklęsłych

$$\left(\prod_{i=1}^{t-1} \lambda_i(\mathbf{C}_{d^*}) \right)^{1/t} \geq \left(\prod_{i=1}^{t-1} \lambda_i(\mathbf{C}_d) \right)^{1/t}.$$

Oznacza to, że układ D- optymalny maksymalizuje wyrażenie $\prod_{i=1}^{t-1} \lambda_i(\mathbf{C}_d)$.

Analogicznie przez układ E- optymalny rozumiemy taki układ $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$, dla którego zachodzi warunek

$$\frac{1}{\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*})} \leq \frac{1}{\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d)},$$

gdzie $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ jest dowolnym układem. Jest to równoważne nierówności

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*}) \geq \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d).$$

Zauważmy, że dla wszystkich podanych typów optymalności, wartość kryterium dla układów niespójnych wynosi nieskończoność, gdy weźmiemy pod uwagę wersję kryteriów, przy której układ optymalny minimalizuje wartość kryterium. Natomiast, gdy rozpatrzemy drugą wersję kryteriów optymalności, wartość kryterium dla układu niespójnego wynosi zero.

Jeśli przez układ φ -optymalny rozumiemy układ A-, D- lub E-optymalny, to prawdziwe jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 1.1. *Układ doświadczalny $d^* \in \mathcal{B}_{t,b,t}$ jest w modelu współoddziaływania (1.3) φ -optymalny w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$ wtedy i tylko wtedy, gdy układ z nim stowarzyszony $d_s^* \in \mathcal{R}_{t,t,b}$ jest w modelu (1.2) φ -optymalny w klasie $\mathcal{R}_{t,t,b}$. Ponadto, jeśli układ d_s^* jest w modelu (1.2) φ -optymalny w całej klasie $\mathcal{D}_{t,t,b}$, to układ d^* jest w modelu (1.3) φ -optymalny w klasie $\mathcal{D}_{t,b,t}$.*

Dowód.

Niech $d^* \in \mathcal{B}_{t,b,t}$. Pierwsza część twierdzenia wynika wprost ze wzoru (1.11) oraz z definicji układów stowarzyszonych.

Przyjmijmy, że $d \in \mathcal{D}_{t,b,t}$ jest dowolnym układem oraz $d_s^* \in \mathcal{B}_{t,t,b}$ jest w modelu (1.2) układem φ -optymalnym w klasie $\mathcal{D}_{t,t,b}$. Wówczas ze wzorów (1.9) i (1.11) oraz z faktu, że macierz informacji jest określona nieujemnie mamy

$$\varphi(\mathbf{C}_d) \leq \varphi(\mathbf{C}_{0d_s}) \leq \varphi(\mathbf{C}_{0d_s^*}) = \varphi(\mathbf{C}_{d_s^*}).$$

Zatem układ d^* jest φ -optymalny w klasie $\mathcal{D}_{t,b,t}$. ■

1.5. Narzędzia algebraiczne

Przedstawimy teraz definicje najważniejszych pojęć algebraicznych, które będą stosowane w pracy. Oznaczmy przez \mathcal{P}_n zbiór macierzy permutacyjnych stopnia n oraz przez $\overline{\mathcal{P}}_n$ zbiór macierzy permutacyjnych, których wszystkie elementy diagonalne są zerami.

Definicja 1.5. (Horn i Johnson, 1985) *Macierz $\mathbf{A} \in \mathbf{R}_n$ nazywamy macierzą podobną do macierzy $\mathbf{B} \in \mathbf{R}_n$, gdy istnieje nieosobliwa macierz $\mathbf{M} \in \mathbf{R}_n$ taka, że $\mathbf{A} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{M}$. Ponadto, jeśli $\mathbf{P} \in \mathcal{P}_n$, to $\mathbf{A} = \mathbf{P}'\mathbf{B}\mathbf{P}$ nazywamy macierzą permutacyjnie podobną do \mathbf{B} .*

Definicja 1.6. (Horn i Johnson, 1985) *Macierz $\mathbf{A} \in \mathbf{R}_n$, która spełnia jeden z poniższych warunków*

1. dla $n = 1$, $\mathbf{A} = 0$,
2. dla $n \geq 2$ istnieje macierz $\mathbf{P} \in \mathcal{P}_n$ oraz $r \in \mathbf{N}$, $1 \leq r \leq n - 1$ takie, że

$$\mathbf{P}'\mathbf{A}\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{\Theta}_{(n-r) \times r} & \mathbf{D} \end{pmatrix},$$

gdzie $\mathbf{B} \in \mathbf{R}_r$, $\mathbf{D} \in \mathbf{R}_{n-r}$, $\mathbf{C} \in \mathbf{R}_{r \times (n-r)}$ oraz $\mathbf{\Theta} \in \mathbf{R}_{(n-r) \times r}$ jest macierzą, której wszystkie elementy są zerami,

nazywamy **macierzą redukowalną**. Macierz, która nie jest redukowalna nazywamy **nieredukowalną**.

Zauważmy, że wszystkie nieredukowalne macierze permutacyjne stopnia t są permutacyjnie podobne do macierzy \mathbf{H}_t określonej wzorem (1.4). Ponadto wszystkie macierze permutacyjne redukowalne są permutacyjnie podobne do macierzy $\text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}, \dots, \mathbf{H}_{t_m})$, gdzie $\sum_{i=1}^m t_i = t$ oraz $m > 1$. Więcej szczegółów na ten temat można znaleźć w książce Horn i Johnson (1985).

Definicja 1.7. (Horn i Johnson, 1985) **Normą spektralną** macierzy $\mathbf{A} \in \mathbf{R}_n$ nazywamy wyrażenie postaci

$$\sigma_1(\mathbf{A}) = \sqrt{\lambda_1(\mathbf{A}\mathbf{A}')}.$$

Definicja 1.8. (Molinari, 2008) *Macierz $\mathbf{A} \in \mathbf{R}_n$, która ma następującą postać*

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & c_0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & & & & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ b_n & 0 & 0 & 0 & \dots & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix},$$

nazywamy **macierzą trójdziagonalną z narożnikami**.

Własności macierzy trójdzielnych z narożnikami będą wykorzystywane do obliczania wyznacznika pewnych macierzy. W pracy Molinari (2008) podana została następująca formuła, pozwalająca na obliczenie wyznacznika macierzy trójdzielnej z narożnikami

$$\det(\mathbf{A}) = (-1)^{n+1} (b_1 \cdot b_2 \cdot \dots \cdot b_n + c_0 \cdot c_1 \cdot \dots \cdot c_{n-1}) + \\ + \text{tr} \left[\begin{pmatrix} a_n & -b_{n-1}c_{n-1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \dots \cdot \begin{pmatrix} a_2 & -b_1c_1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 & -b_0c_0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (1.13)$$

2. Spójność układów doświadczalnych

W rozdziale tym analizować będziemy układy spójne. Na początku zaprezentowane zostaną warunki konieczne spójności układów w modelu współoddziaływania. Następnie podany zostanie związek między spójnością układu w modelu (1.3), a spójnością układu z nimi stowarzyszonego w modelu (1.2) oraz wynikający z niego warunek konieczny spójności układów w modelu (1.3). W kolejnym twierdzeniu określona zostanie minimalna liczba bloków konieczna na to, aby w klasie kompletnych układów binarnych istniał układ spójny. Ponadto scharakteryzowana zostanie pewna klasa układów, pełniąca ważną rolę w kolejnych rozdziałach oraz pokazane zostanie, że wszystkie układy z tej klasy są spójne. Na koniec wyznaczony zostanie warunek konieczny i dostateczny spójności binarnych układów kompletnych, gdy macierz lewego sąsiedztwa układu jest macierzą cyrkulentną.

2.1. Spójność układów w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$

Układów optymalnych będziemy poszukiwać wśród układów spójnych. Stąd ważne jest stwierdzenie istnienia takich układów oraz podanie ich charakterystyki; porównaj Filipiak i Różański (2009).

W modelu blokowym bez dodatkowych efektów zakłócających znane są efektywne charakterystyki układów spójnych związane ze spójnością pewnych grafów. Przypomnijmy, że graf nazywamy spójnym, gdy zawiera on ścieżkę łączącą dowolną parę wierzchołków. Pierwsza charakterystyka związana jest z grafem Levi'ego; porównaj The Encyclopaedia of Design Theory dostępna na stronie internetowej <http://designtheory.org/library/encyc/blockdes/g>. Graf Levi'ego zdefiniowany jest następująco.

Definicja 2.1. *Niech \mathbf{A} będzie dowolną macierzą. Grafem Levi'ego nazywamy graf dwudzielny $\mathcal{B}(\mathbf{A})$ taki, że krawędź łączy wierzchołki v_i oraz w_j wtedy i tylko wtedy, gdy (i, j) -ty element macierzy \mathbf{A} jest niezerowy.*

Mamy zatem następującą charakterystykę układów spójnych.

Twierdzenie 2.1. *Układ d z macierzą incydencji \mathbf{N}_d jest spójny w modelu (1.2) wtedy i tylko wtedy, gdy jego graf Levi'ego $\mathcal{B}(\mathbf{N}_d)$ jest spójny.*

Kolejny warunek spójności układu w modelu (1.2) jest następujący; porównaj m.in. Raghavarao D. i L.V. Padgett (2005).

Twierdzenie 2.2. *Jeśli układ d jest spójny w modelu (1.2), to dla dowolnej pary obiektów θ oraz ϕ , istnieje łańcuch $\theta = \theta_0, \theta_1, \dots, \theta_m, \theta_{m+1} = \phi$ taki, że dla dowolnego $i = 0, 1, \dots, m$ obiekty θ_i oraz θ_{i+1} występują razem w bloku.*

Z Twierdzenia 2.2 wynika, że jeśli układ jest spójny w modelu (1.2), to istnieje ścieżka między dwoma dowolnymi wierzchołkami w grafie, którego wierzchołkami są obiekty układu oraz każde dwa wierzchołki tego grafu są połączone krawędzią tylko wtedy, gdy odpowiednie obiekty występują razem w jednym bloku. Istnienie takiej ścieżki można stwierdzić analizując postać macierzy incydencji \mathbf{N}_d .

W modelu współoddziaływania (1.3) nie jest znana podobna ogólna charakterystyka spójności układu. W kolejnym podrozdziale pokażemy, że spójność układów z klasy $\mathcal{B}_{t,b,t}$ można w modelu (1.3) scharakteryzować podobnie jak w Twierdzeniu 2.2.

Korzystając z postaci macierzy informacji można wyprowadzić warunki konieczne spójności układów w modelu współoddziaływania (1.3). Ponieważ $\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d$ jest macierzą informacji układu d w modelu (1.2), zatem we wzorze (1.8) półokreślona dodatnio macierz \mathbf{C}_d jest różnicą dwóch macierzy półokreślonych dodatnio. Wynika stąd następujące twierdzenie podające warunek konieczny spójności układu doświadczalnego w modelu (1.3).

Twierdzenie 2.3. *Niech $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ będzie dowolnym układem. Warunkiem koniecznym spójności układu d w modelu współoddziaływania (1.3) jest jego spójność w modelu (1.2).*

Zatem układów spójnych w modelu współoddziaływania należy poszukiwać wśród układów spójnych w modelu (1.2). Warunek z Twierdzenia 2.3 nie jest warunkiem dostatecznym spójności układu w modelu (1.3). Pokazuje to następujący przykład.

Przykład 2.1. Niech $t = k = 5$ oraz $b = 2$,

$$d = \left(\begin{array}{c|ccccc} 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 5 & 4 & 3 \end{array} \right), \quad \mathbf{C}_d = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ponieważ rząd macierzy \mathbf{C}_d jest równy 2, układ d jest niespójny w modelu współoddziaływania (1.3). Z Twierdzenia 2.2 wynika, że układ ten jest spójny modelu (1.2). \square

Kolejna charakterystyka układów spójnych w modelu współoddziaływania (1.3) związana jest z układami stowarzyszonymi.

Twierdzenie 2.4. *Niech $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ będzie dowolnym układem. Warunkiem koniecznym spójności układu d w modelu współoddziaływania (1.3) jest spójność układu z nim stowarzyszonego d_s w modelu (1.2).*

Dowód.

Zauważmy, że $\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_{L_d} \mathbf{T}_d$ jest macierzą informacji układu stowarzyszonego d_s w modelu (1.2). Z półokreśloności dodatniej macierzy \mathbf{C}_d oraz obu jej składowych we wzorze (1.7) wynika teza twierdzenia. \blacksquare

Zatem jeśli układ d_s stowarzyszony z układem doświadczalnym d jest niespójny w modelu (1.2), to układ d jest niespójny w modelu (1.3). Poniższy przykład pokazuje, że warunek z Twierdzenia 2.4 nie jest warunkiem dostatecznym.

Przykład 2.2. Niech $t = 9$, $b = 12$ oraz $k = 3$.

$$d = \left(\begin{array}{c|cccc} 3 & 1 & 2 & 3 \\ 6 & 4 & 5 & 6 \\ 9 & 7 & 8 & 9 \\ 7 & 1 & 4 & 7 \\ 8 & 2 & 5 & 8 \\ 9 & 3 & 6 & 9 \\ 9 & 1 & 5 & 9 \\ 8 & 3 & 4 & 8 \\ 7 & 2 & 6 & 7 \\ 8 & 1 & 6 & 8 \\ 9 & 2 & 4 & 9 \\ 7 & 3 & 5 & 7 \end{array} \right) \implies d_s = \left(\begin{array}{cccc} 3 & 7 & 9 & 8 \\ 1 & 8 & 7 & 9 \\ 2 & 9 & 8 & 7 \\ 6 & 1 & 3 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 3 \\ 5 & 3 & 2 & 1 \\ 9 & 4 & 6 & 5 \\ 7 & 5 & 4 & 6 \\ 8 & 6 & 5 & 4 \end{array} \right).$$

Ponieważ macierz informacji układu d w modelu (1.3) ma postać $\mathbf{C}_d = \frac{2}{3}(\mathbf{I}_3 \otimes \mathbf{E}_3)$, układ ten jest niespójny w modelu współoddziaływania. Natomiast z Twierdzenia 2.2 łatwo zauważyć, że układ z nim stowarzyszony d_s jest spójny w modelu (1.2). \square

2.2. Spójność układów w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$

W rozdziale tym będziemy rozważać spójność układów należących do $\mathcal{B}_{t,b,t}$, to znaczy klasy układów binarnych o blokach kompletnych. Pierwszym poruszonym zagadnieniem będzie związek między spójnością układu w modelu (1.3) a spójnością układu z nim stowarzyszonego w modelu (1.2). Jest to jednocześnie ogólne kryterium spójności układów w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$.

Twierdzenie 2.5. *Układ $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$ jest spójny w modelu (1.3) wtedy i tylko wtedy, gdy układ z nim stowarzyszony d_s jest spójny w modelu (1.2).*

Dowód.

Ze wzoru (1.11) oraz z definicji układów stowarzyszonych wynika, że macierz informacji układu $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$ w modelu współoddziaływania jest jednocześnie macierzą informacji układu stowarzyszonego d_s w modelu (1.2). ■

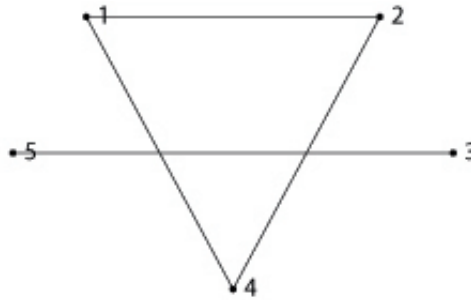
Z Twierdzenia 2.2 oraz Twierdzenia 2.5 wynika następująca uwaga.

Uwaga 2.1. Układ $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$ jest spójny w modelu współoddziaływania, gdy istnieje ścieżka między dwoma dowolnymi wierzchołkami w grafie, którego wierzchołkami są obiekty układu oraz wierzchołki i -ty i j -ty tego grafu są połączone krawędzią wtedy, gdy w pewnym wierszu macierzy lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_d elementy i -ty oraz j -ty są niezerowe.

Przykład 2.3. Niech $t = 5$, $b = 3$.

(a)

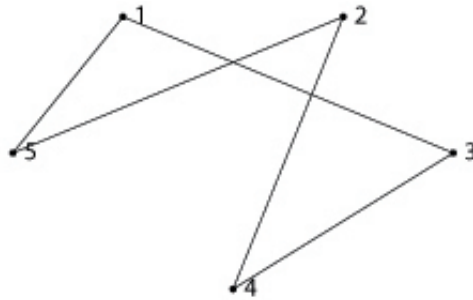
$$d = \left(\begin{array}{c|ccccc} 3 & 1 & 2 & 5 & 4 & 3 \\ 5 & 1 & 4 & 3 & 2 & 5 \\ 3 & 1 & 4 & 5 & 2 & 3 \end{array} \right) \implies \mathbf{S}_d = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \implies$$



W grafie, o którym mowa w Uwadze 2.1 występują dwie składowe spójności: 1, 2, 4 oraz 3, 5. Zatem układ d jest niespójny.

(b)

$$d = \left(\begin{array}{c|ccccc} 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \\ 4 & 1 & 2 & 5 & 3 & 4 \end{array} \right) \implies \mathbf{S}_d = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix} \implies$$



Układ d jest spójny, ponieważ graf z Uwagi 2.1 jest spójny. \square

Następujący wniosek podaje warunek konieczny spójności układów doświadczalnych w modelu (1.3) w klasie układów $\mathcal{B}_{t,b,t}$.

Wniosek 2.1. *Jeśli układ doświadczalny $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$ jest spójny w modelu współdziałania (1.3), to każdy element macierzy lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_d jest mniejszy niż liczba bloków b .*

Dowód.

Założmy nie wprost, że dla spójnego układu d element (i, j) macierzy lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_d jest równy b . Ponieważ suma elementów w każdym wierszu macierzy \mathbf{S}_d jest równa b , pozostałe elementy w i -tym wierszu są równe 0. Z Uwagi 2.1 łatwo zauważyć, że układ d jest niespójny, co jest sprzeczne z założeniem. \blacksquare

Przedstawione poniżej twierdzenie podaje minimalną liczbę bloków konieczną do tego, aby można było skonstruować układ spójny.

Twierdzenie 2.6. *W klasie układów doświadczalnych $\mathcal{B}_{t,b,t}$ istnieje układ spójny wtedy i tylko wtedy, gdy liczba bloków spełnia warunek $b \geq 2$ dla nieparzystego t oraz $b \geq 3$ dla parzystego t .*

Dowód.

Niech $b = 2$. Z Wniosku 2.1 wynika, że jeśli układ d jest spójny, to każdy element macierzy \mathbf{S}_d jest mniejszy od 2. Stąd bez straty ogólności możemy założyć, że $\mathbf{S}_d = \mathbf{H}_t + \mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$, gdzie $\mathbf{P} \in \overline{\mathcal{P}}_t$. Pokażemy, że jeżeli t jest nieparzyste, to istnieje układ d , dla którego $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) > 0$ oraz, że $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) = 0$ dla każdego d , gdy t jest parzyste. Z postaci macierzy informacji (1.11) mamy

$$\mathbf{C}_d = 2\mathbf{I}_t - \frac{1}{2}(\mathbf{H}_t + \mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}')'(\mathbf{H}_t + \mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}') = \mathbf{I} - \frac{1}{2}(\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}' + \mathbf{P}\mathbf{H}_t'\mathbf{P}'\mathbf{H}_t).$$

Wyrażenie w nawiasie jest sumą macierzy permutacyjnej $\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ oraz macierzy transponowanej do niej. Stąd układ d jest spójny wtedy i tylko wtedy, gdy macierz $\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ ma tylko jedną wartość własną równą 1, a więc gdy macierz ta jest nieredukowalna. Macierze \mathbf{H}_t' oraz $\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ są nieredukowalne oraz są macierzowymi reprezentacjami dwóch cykli o długości t . Ponadto $\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ jest macierzową reprezentacją iloczynu dwóch cykli. Rozważmy następujące dwa przypadki.

a) Niech t będzie liczbą parzystą. Iloczyn dwóch cykli o długości parzystej, jako permutacja parzysta, jest cyklem o długości nieparzystej lub iloczynem rozłącznych cykli. Permutacja reprezentowana przez $\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ jest permutacją parzystej liczby elementów i nie może być cyklem o długości nieparzystej. Stąd $\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ musi być macierzową reprezentacją permutacji będącej iloczynem rozłącznych cykli, a więc jest macierzą redukowalną. Zatem każdy układ doświadczalny z parzystą liczbą obiektów i liczbą bloków $b = 2$ jest niespójny.

b) Niech t będzie nieparzyste. Iloczyn dwóch cykli o długości nieparzystej, jako permutacja parzysta, jest cyklem o długości nieparzystej lub iloczynem rozłącznych cykli. Ponieważ $\mathbf{H}_t'\mathbf{P}\mathbf{H}_t\mathbf{P}'$ jest macierzową reprezentacją permutacji nieparzystej, może być cyklem o długości nieparzystej lub iloczynem rozłącznych cykli. Pokażemy, że w tym przypadku istnieje układ spójny.

Niech układ d będzie taki, że $\mathbf{S}_d = \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t$. Ze wzoru (1.11), własności macierzy \mathbf{E}_t oraz $(\mathbf{H}_t^i)' = \mathbf{H}_t^{-i}$ otrzymujemy

$$\mathbf{C}_d = \mathbf{I} - \frac{1}{2}(\mathbf{H}_t\mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t\mathbf{H}'_t).$$

O macierzy \mathbf{H}_t wiadomo, że jej wartości własne są pierwiastkami stopnia t z jedynki; porównaj na przykład John (1987). Stąd

$$\lambda_k(\mathbf{C}_d) = 1 - \cos \frac{2k\pi}{t}, \quad \text{dla } k = 0, 1, \dots, t-1$$

oraz $\lambda_0(\mathbf{C}_d)$ jest jedyną wartością własną macierzy \mathbf{C}_d równą 0. Zatem tak wybrany układ d jest spójny.

Niech teraz $b = 3$. Jeśli t jest nieparzyste, wystarczy zauważyć, że dowolny układ, który powstaje z układu spójnego przez dodanie do niego jednego bloku, jest również spójny.

Niech zatem t będzie parzyste. Pokażemy, że w tym przypadku układ spójny istnieje. Weźmy $\mathbf{S}_d = \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t + \mathbf{G}$, gdzie $\mathbf{G} = \mathbf{P}_1\mathbf{H}'_t\mathbf{P}'_1$ oraz

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{t-2} & \mathbf{0}_{t-2} & \mathbf{0}_{t-2} \\ \mathbf{0}'_{t-2} & 0 & 1 \\ \mathbf{0}'_{t-2} & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ze wzoru (1.11) otrzymujemy

$$\mathbf{C}_d = 2\mathbf{I} - \frac{1}{3}(\mathbf{H}_t^2 + \mathbf{H}_t^{-2} + \mathbf{H}_t\mathbf{G}' + \mathbf{H}'_t\mathbf{G}' + \mathbf{G}\mathbf{H}'_t + \mathbf{G}\mathbf{H}_t). \quad (2.1)$$

Założmy, że układ d jest niespójny. Wówczas krotność zerowej wartości własnej macierzy \mathbf{C}_d wynosi co najmniej dwa. Stąd istnieją dwa liniowo niezależne wektory własne tej macierzy, $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$, odpowiadające wartości własnej zero. Jak łatwo zauważyć, jeden z tych wektorów, powiedzmy \mathbf{x}_1 , jest równy $\mathbf{1}_t$.

Ze wzoru (2.1) wynika, że $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\lambda_1(\mathbf{H}_t^2 + \mathbf{H}_t^{-2} + \mathbf{H}_t\mathbf{G}' + \mathbf{H}'_t\mathbf{G}' + \mathbf{G}\mathbf{H}'_t + \mathbf{G}\mathbf{H}_t) = 6.$$

Ponieważ wszystkie komponenty w (2.1) są macierzami permutacyjnymi, wartość własną równą 6 otrzymujemy, gdy wszystkie komponenty mają ten sam wektor

własny, inny niż $\mathbf{1}_t$, odpowiadający wartości własnej 1. Jedynym takim wektorem dla macierzy \mathbf{H}_t^2 jest $\mathbf{x}_2 = (1, -1, 1, -1, \dots, 1, -1)'$ (John 1987). Jednak wektor ten nie jest wektorem własnym macierzy \mathbf{GH}_t ponieważ

$$\mathbf{GH}_t\mathbf{x}_2 = (1, -1, 1, -1, \dots, 1, -1, 1, 1, -1, -1)' \neq \lambda(\mathbf{GH}_t)\mathbf{x}_2.$$

Stąd $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) > 0$ i układ d jest spójny. ■

Scharakteryzujemy teraz podklasę układów binarnych, w której w kolejnych rozdziałach będziemy poszukiwać układów optymalnych. Więcej szczegółów na ten temat można znaleźć w pracach Filipiak i Różański (2005) oraz Filipiak i inni (2008).

Przypomnijmy, że w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$ dla liczby bloków będącej wielokrotnością $t - 1$, istnieją układy uniwersalnie optymalne; porównaj Druilhet (1999) oraz Filipiak i Markiewicz (2003), (2005) i (2007). W pracy rozważać będziemy optymalność układów, w których $b \neq p(t - 1)$, $p \in \mathbf{N}$.

Niech $b \in \left\langle p(t - 1) - \frac{1}{2}(t - 1), p(t - 1) \right\rangle \cup \left(p(t - 1), p(t - 1) + \frac{1}{2}(t - 1) \right)$, $p \in \mathbf{N}$ oraz $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$. Dla macierzy $\mathbf{K}_d = (k_{ij})_{1 \leq i, j \leq t}$ zdefiniowanej w rozdziale 1.2 określmy następujące klasy

$$\mathcal{K}_{(b)} = \left\{ \mathbf{K}_d : \mathbf{K}_d\mathbf{1}_t = \mathbf{K}'_d\mathbf{1}_t = \mathbf{0}_t, k_{ij} \in \left\{ -\frac{b}{t}, 1 - \frac{b}{t}, \dots, b - \frac{b}{t} \right\}, k_{ii} = -\frac{b}{t} \right\},$$

$$\tilde{\mathcal{K}}_{(b)} = \left\{ \mathbf{K}_d \in \mathcal{K}_{(b)} : \mathbf{K}_d = (-1)^{\frac{b-pt+p}{|b-pt+p|}} \sum_{i=1}^{|b-pt+p|} \mathbf{P}_i + \left(p - \frac{b}{t} \right) \mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t - p\mathbf{I}_t \right\}, \quad (2.2)$$

gdzie $\mathbf{P}_i, \mathbf{P}'_i\mathbf{P}_j \in \bar{\mathcal{P}}_t$, $i \neq j$ oraz $i, j = 1, 2, \dots, |b - pt + p|$.

Klasę układów binarnych, dla których $\mathbf{K}_d \in \tilde{\mathcal{K}}_{(b)}$ oznaczają będziemy $\tilde{\mathcal{B}}_{t,b,t}$. Jest to podklasa należąca do klasy układów sąsiedzkich GN_2 (zobacz między innymi Mishra, 2007). Udowodnimy teraz, że każdy układ $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,b,t}$ jest spójny.

Twierdzenie 2.7. *Jeżeli $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,b,t}$ z liczbą bloków b spełniającą warunki z Twierdzenia 2.5, to układ d jest spójny.*

Dowód.

Ponieważ macierze \mathbf{E}_t oraz \mathbf{K}_d komutują, z (1.10) oraz półokreśloności dodatniej macierzy \mathbf{C}_d wynika, że układ d jest spójny wtedy i tylko wtedy, gdy $\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) < b^2$. Niech $\mathbf{K}_d \in \tilde{\mathcal{K}}_{(b)}$. Ze wzoru (2.2) mamy

$$\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d = (a + p^2)\mathbf{I} + \sum_{i=1}^{a^2-a} \tilde{\mathbf{P}}_i - p \sum_{i=1}^a (\mathbf{P}_i + \mathbf{P}'_i) - \frac{(p-a)^2}{t} \mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t,$$

gdzie $\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_k$ oraz $\tilde{\mathbf{P}}_i = \mathbf{P}_j\mathbf{P}'_k \in \bar{\mathcal{P}}_t$, $i = 1, 2, \dots, a^2 - a$, $j, k = 1, 2, \dots, a$, $j \neq k$ oraz $a = |b - pt + p|$. Stąd dla $t > 2$ otrzymujemy

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) \leq a + p^2 + a^2 - a + 2pa = (2p + b - pt)^2 = (b - p(t-2))^2 < b^2.$$

Zatem układ d jest spójny. ■

W szczególnej sytuacji, gdy macierz lewego sąsiedztwa układu doświadczalnego jest macierzą cyrkulentną, możliwe jest podanie warunku koniecznego i dostatecznego spójności układu w modelu (1.3), bez odwoływania się do układów stowarzyszonych. Sformułowanie tego twierdzenia poprzedzimy przypomnieniem definicji *macierzy cyrkulentnej*.

Definicja 2.2. (John, 1985) *Macierz $\mathbf{A} \in \mathbf{R}_t$, która dla pewnych $\alpha_i \in \mathbf{R}$, ma postać $\mathbf{A} = \sum_{i=1}^t \alpha_i \mathbf{H}_t^i$, nazywamy macierzą cyrkulentną.*

Udowodnimy teraz następujące twierdzenie.

Twierdzenie 2.8. *Układ $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$, którego macierz lewego sąsiedztwa jest macierzą cyrkulentną, to znaczy*

$$\mathbf{S}_d = \sum_{i=1}^t \alpha_i \mathbf{H}_t^i, \quad \text{gdzie} \quad \sum_{i=1}^t \alpha_i = b \quad \text{oraz} \quad \alpha_i \in \mathbf{N} \cup \{0\}, \quad i = 1, 2, \dots, t,$$

jest spójny wtedy i tylko wtedy, gdy nie jest spełniony żaden z warunków:

- (i) *dla wszystkich i_1 oraz i_2 ($i_1, i_2 = 1, 2, \dots, t$, $i_1 \neq i_2$), takich, że $\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2} \neq 0$, istnieje takie $k \in \{1, 2, \dots, t-1\}$, że $\frac{k(i_1-i_2)}{t}$ jest liczbą całkowitą;*
- (ii) *macierz \mathbf{S}_d jest permutacyjnie podobna do $b\mathbf{H}_t$.*

Dowód.

Zauważmy, że twierdzenie to można sformułować równoważnie podając jako warunek konieczny i dostateczny niespójności układu d spełnienie jednego z warunków (i) lub (ii).

Założmy, że układ d jest niespójny. Wówczas $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) = 0$. Ponieważ ze wzoru (1.10) oraz z własności macierzy \mathbf{E}_t otrzymujemy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) = b - \frac{1}{b}\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d),$$

stąd $\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) = b^2$. Z postaci macierzy \mathbf{K}_d oraz z tego, że macierz \mathbf{S}_d jest cyrkulenta, otrzymujemy

$$\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d = \left(\sum_{i=1}^t \alpha_i \mathbf{H}_t^i - \frac{b}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t \right) \left(\sum_{i=1}^t \alpha_i \mathbf{H}_t^i - \frac{b}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t \right)'.$$

Rozpatrzmy dwa przypadki.

1) Założmy, że istnieją $i_1, i_2 \in \{1, 2, \dots, t\}$ takie, że $i_1 \neq i_2$ oraz $\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2} \neq 0$. Wówczas z faktu, że $(\mathbf{H}_t^i)' = \mathbf{H}_t^{-i}$, mamy

$$\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d = \sum_{j=i+1}^t \sum_{i=1}^{t-1} \alpha_i \alpha_j (\mathbf{H}_t^{i-j} + \mathbf{H}_t^{j-i}) + \sum_{i=1}^t \alpha_i^2 \mathbf{I}_t - \frac{b^2}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t.$$

Macierz $\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t$ ma tylko jedną niezerową wartość własną i odpowiada ona wektorowi własnemu $\mathbf{1}_t$. Wektor ten jest również wektorem własnym macierzy \mathbf{C}_d odpowiadającym wartości własnej 0. Ponieważ wartości własne macierzy cyrkulenta \mathbf{H}_t są pierwiastkami stopnia t z jedynki, mamy dalej

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) = \sum_{i=1}^t \alpha_i^2 + \sum_{j=i+1}^t \sum_{i=1}^{t-1} \alpha_i \alpha_j \max_{1 \leq k \leq t} \left[2 \cos \frac{2k(i-j)\pi}{t} \right]. \quad (2.3)$$

Maksimum to jest osiągnięte i wynosi b^2 wtedy i tylko wtedy, gdy $\cos \frac{2k(i-j)\pi}{t} = 1$, a to zachodzi, gdy spełniony jest warunek (i).

2) Przyjmijmy, że nie istnieją takie $i_1, i_2 \in \{1, 2, \dots, t\}$, że $i_1 \neq i_2$ oraz $\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2} \neq 0$. Wówczas macierz \mathbf{S}_d jest permutacyjnie podobna do $b\mathbf{H}_t$, a zatem spełniony jest warunek (ii).

Pokażemy teraz dostateczność niespójności. Załóżmy, że zachodzi warunek (i). Wówczas formuła (2.3) osiąga swoje maksimum, a zatem $\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) = b^2$. Stąd oraz ze wzoru (1.10) wynika, że układ d jest niespójny.

Przyjmijmy, że spełniony jest warunek (ii). Bez straty ogólności możemy przyjąć, że $\mathbf{S}_d = b\mathbf{H}_t$. Wówczas

$$\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d = \left(b\mathbf{H}_t - \frac{b}{t}\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t\right) \left(b\mathbf{H}_t - \frac{b}{t}\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t\right)' = b^2\mathbf{I}_t - \frac{b^2}{t}\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t.$$

Stąd każda niezerowa wartość własna macierzy $\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d$ jest równa b^2 . Zatem układ doświadczalny d jest niespójny. ■

3. Układy E- optymalne

W rozdziale tym poszukiwać będziemy układów E- optymalnych w klasach układów kompletnych, w których nie istnieje CNBD. Kryterium E- optymalności odwołuje się do najmniejszej, niezerowej dla układów spójnych, wartości własnej macierzy informacji. W Rozdziałach 3.1 oraz 3.2 wyprowadzimy charakterystykę układów E- optymalnych dla $b = p(t - 1) - 1$ oraz dla $b = p(t - 1) + 1$, gdzie $p \in \mathbf{N}$. W pierwszym etapie scharakteryzujemy układy E- optymalne w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,b,t}$, a następnie pokażemy, że są one również E- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,b,t}$, dla $b = p(t - 1) - 1$ oraz dla $b = p(t - 1) + 1$, $p \in \mathbf{N}$. W Rozdziale 3.3 podamy metody konstrukcji układów E- optymalnych w oparciu o Twierdzenie 1.1 oraz rezultaty uzyskane w Rozdziałach 3.1 i 3.2. Zaprezentowane w tym rozdziale wyniki zostały częściowo opublikowane w pracach Filipiak i Różański (2005) oraz Filipiak i inni (2008).

3.1. Układy E- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$, $p \in \mathbf{N}$

Jak pokazaliśmy w Rozdziale 1.2, macierz informacji układu $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$ w modelu współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa ma postać (1.10), to znaczy

$$\mathbf{C}_d = b\mathbf{E}_t - \frac{1}{b}\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d.$$

Stąd poszukiwanie układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$ sprowadza się do znalezienia układu d^* takiego, że dla dowolnego układu $d \in \mathcal{B}_{t,b,t}$

$$\lambda_1(\mathbf{K}_{d^*}\mathbf{K}'_{d^*}) \leq \lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) \quad (3.1)$$

co oznacza, że \mathbf{K}_{d^*} minimalizuje normę spektralną w klasie $\mathcal{K}_{(b)}$.

Poniższe twierdzenie charakteryzuje układy E- optymalne w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$, która, zgodnie z Twierdzeniem 2.7, jest klasą układów spójnych.

Twierdzenie 3.1. *Jeśli istnieje układ d^* , którego macierz lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_{d^*} jest permutacyjnie podobna do macierzy $p(\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t) - \mathbf{H}_t$, gdzie dla $t \in \{3, 4\}$, $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$ oraz dla $t \geq 5$, $p \in \mathbf{N}$, to układ d^* jest E -optymalny w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$.*

Dowód.

Niech $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$. Z Twierdzenia 2.6 wynika, że dla $p = 1$ wszystkie układy w rozważanej klasie z liczbą obiektów $t < 5$ są niespójne. Zatem będziemy przyjmować, że dla $t \in \{3, 4\}$, $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$ oraz dla $t \geq 5$, $p \in \mathbf{N}$. Ze wzoru (2.2) mamy

$$\mathbf{K}_d = \frac{p+1}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - p \mathbf{I}_t - \mathbf{P}_d,$$

gdzie $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_t$ zależy od układu doświadczalnego d oraz

$$\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d = (p^2 + 1) \mathbf{I}_t - \frac{(p+1)^2}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t + p(\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d)$$

i niezerowe wartości własne tej macierzy można zapisać następująco

$$\lambda_k(\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d) = p^2 + 1 + p \lambda_{t-k}(\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d),$$

gdzie $k = 1, 2, \dots, t-1$. Zatem analiza wartości własnych macierzy $\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d$ sprowadza się do rozpatrywania wartości własnych macierzy $\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d$.

Przypomnijmy, że macierz permutacyjna $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_t$ jest redukowalna, gdy jest permutacyjnie podobna do macierzy $\text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}, \dots, \mathbf{H}_{t_m})$, gdzie $\sum_{i=1}^m t_i = t$ oraz $m \neq 1$, natomiast jest nieredukowalna, gdy jest permutacyjnie podobna do macierzy \mathbf{H}_t , która jest cyrkulenta. Z uwagi na to, że wartości własne macierzy permutacyjnie podobnych są takie same, nasze rozważania możemy ograniczyć do analizy wartości własnych macierzy \mathbf{H}_t oraz $\text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}, \dots, \mathbf{H}_{t_m})$. Wartości własne macierzy \mathbf{H}_t są pierwiastkami stopnia t z jedynki i są równe $\omega_k = \cos \frac{2k\pi}{t} - i \sin \frac{2k\pi}{t}$, gdzie $k = 0, 1, \dots, t-1$; porównaj John (1987).

Zatem dla $\mathbf{P}_{d^*} = \mathbf{H}_t$ nieuporządkowane wartości własne macierzy $\mathbf{K}_{d^*} \mathbf{K}'_{d^*}$ mają postać

$$\mu_i(\mathbf{K}_{d^*} \mathbf{K}'_{d^*}) = \begin{cases} 0 & \text{dla } i = 0, \\ p^2 + 1 + 2p \cos \frac{2i\pi}{t} & \text{dla } i = 1, 2, \dots, t-1. \end{cases}$$

Maksymalną wartość własną tej macierzy otrzymujemy dla $i = 1$ lub $i = t - 1$.

Stąd

$$\lambda_1(\mathbf{K}_{d^*}\mathbf{K}'_{d^*}) = p^2 + 1 + 2p \cos \frac{2\pi}{t} = (p - 1)^2 + 4p \cos^2 \frac{\pi}{t}. \quad (3.2)$$

Niech teraz $\mathbf{P}_d = \text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \dots, \mathbf{H}_{t_m})$, gdzie $\sum_{i=1}^m t_i = t$, $t_i \geq 2$, dla każdego $i = 1, 2, \dots, m$ oraz $m \geq 2$. Wówczas nieuporządkowane wartości własne macierzy $\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d$ mają następującą postać

$$\mu_u(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) = p^2 + 1 + 2p \cos \frac{2i_j\pi}{t_j},$$

gdzie $u = 1, 2, \dots, t - 1$, oraz $i_1 = 1, 2, \dots, t_1 - 1$, natomiast dla $j = 2, 3, \dots, m$, $i_j = 0, 1, \dots, t_j - 1$. Zatem dla $i_2 = 0$ otrzymujemy następującą maksymalną wartość własną

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) = p^2 + 2p + 1. \quad (3.3)$$

Stąd ostatecznie zachodzi nierówność

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d\mathbf{K}'_d) = p^2 + 2p + 1 > p^2 - 2p + 1 + 4p \cos^2 \frac{\pi}{t} = \lambda_1(\mathbf{K}_{d^*}\mathbf{K}'_{d^*}). \quad (3.4)$$

Korzystając z równoważnego określenia E- optymalności (3.1) oraz z tego, że $\mathbf{K}_d = \mathbf{S}'_d - \frac{b}{t}\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t$ otrzymujemy tezę twierdzenia. ■

Zauważmy, że w Twierdzeniu 3.1 podana jest postać macierzy lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_d , dla której norma spektralna macierzy \mathbf{K}_d jest minimalna. Twierdzenie nie rozstrzyga jednak o istnieniu samego układu. Podamy przykład, że dla pewnych macierzy lewego sąsiedztwa określonych w tym twierdzeniu nie istnieje odpowiadający im układ. Niech $t = 6$ oraz $p = 1$. Zgodnie z Twierdzeniem 3.1 macierz lewego sąsiedztwa, dla której norma spektralna macierzy \mathbf{K}_d jest minimalna, ma postać $\mathbf{1}_6\mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6 - \mathbf{H}_6$. Jednak dla takiej macierzy układ doświadczalny nie istnieje; porównaj Azaïs i inni (1993). Z dokładnością do permutacyjnego podobieństwa wszystkie pozostałe macierze lewego sąsiedztwa są postaci $\mathbf{1}_6\mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6 - \text{diag}(\mathbf{H}_3, \mathbf{H}_3)$, $\mathbf{1}_6\mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6 - \text{diag}(\mathbf{H}_4, \mathbf{H}_2)$ lub $\mathbf{1}_6\mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6 - \text{diag}(\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_2, \mathbf{H}_2)$. Dla każdej z nich wartość E-kryterium jest taka sama. Dla macierzy lewego sąsiedztwa $\mathbf{1}_6\mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6 - \text{diag}(\mathbf{H}_3, \mathbf{H}_3)$ układ również nie istnieje. Istnieje natomiast

układ, którego macierz lewego sąsiedztwa ma postać $\mathbf{1}_6 \mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6 - \text{diag}(\mathbf{H}_4, \mathbf{H}_2)$.
Zatem przykład układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{6,4,6}$ jest następujący.

Przykład 3.1.

$$d^* = \left(\begin{array}{c|cccccc} 6 & 1 & 2 & 3 & 5 & 4 & 6 \\ 5 & 1 & 3 & 6 & 2 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 5 & 2 & 6 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 6 & 4 & 2 & 5 & 3 \end{array} \right).$$

□

Pokażemy teraz, że układy spełniające warunki określone w Twierdzeniu 3.1 są E- optymalne w klasie wszystkich układów $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$.

Twierdzenie 3.2. *Jeżeli układ d^* jest E- optymalny w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$, to jest on również E- optymalny w klasie wszystkich układów $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$, gdzie dla $t \in \{3, 4\}$, $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$ oraz dla $t \geq 5$, $p \in \mathbf{N}$.*

Dowód.

Niech d^* będzie układem E- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$ oraz niech układ $d \in \mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$. Rozważać będziemy dwa przypadki związane z liczbą replikacji obiektów w układzie d .

(i) Niech d będzie układem równoreplikowalnym. Ponieważ dowód dla dowolnego $p \in \mathbf{N}$ nakłada zbyt restrykcyjne warunki na t , gdy $p = 1$, przypadek ten rozpatrzymy osobno.

a) Niech $p = 1$. Dla układu d_s stowarzyszonego z układem d , macierz informacji w modelu (1.2) ma postać $\mathbf{C}_{0d_s} = \mathbf{T}'_{d_s} \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_{d_s}$. Zatem ze wzoru (1.7) oraz z tego, że macierz \mathbf{C}_d jest półokreślona dodatnio, wynika następująca nierówność

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq \lambda_{t-1}(\mathbf{T}'_{d_s} \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_{d_s}).$$

Stąd oraz z faktu, że dla $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ mamy

$$\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d = \mathbf{T}'_d \mathbf{T}_d - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^b \mathbf{r}_{dj} \mathbf{r}'_{dj} = \mathbf{R}_d - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^b \mathbf{r}_{dj} \mathbf{r}'_{dj}, \quad (3.5)$$

gdzie \mathbf{r}_{dj} jest t wymiarowym wektorem replikacji obiektów w j -tym bloku, wstawiając dla układu d_s macierz $\mathbf{R}_{d_s} = (t-2)\mathbf{I}_t$ otrzymujemy dalej

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq t-2 - \frac{1}{t-2} \lambda_1 \left(\sum_{j=1}^t \mathbf{r}_{d_s j} \mathbf{r}'_{d_s j} \right). \quad (3.6)$$

Z faktu, że wektor elementów diagonalnych macierzy określonej nieujemnie jest majoryzowany przez wektor jej wartości własnych oraz z tego, że układ stowarzyszony jest równoreplikowalny, mamy

$$\lambda_1 \left(\sum_{j=1}^t \mathbf{r}_{d_s j} \mathbf{r}'_{d_s j} \right) \geq \max_{1 \leq i \leq t} \left(\sum_{j=1}^t r_{d_s ij}^2 \right) \geq t-2,$$

gdzie $r_{d_s ij}$ jest liczbą replikacji i -tego obiektu w j -tym bloku w układzie d_s . Stąd, z (3.6), (1.10), (3.3) dla $p=1$ oraz (3.4), dla dowolnego $d_1 \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ różnego od d^* otrzymujemy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq t-3 \leq t-2 - \frac{4}{t-2} = \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d_1}) < \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*}),$$

przy czym druga nierówność zachodzi dla $t \geq 6$. Z powyższego wzoru wynika również, że wartość E-kryterium dla dowolnego układu $d \in \mathcal{R}_{t,t-2,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ jest mniejsza lub równa od wartości E-kryterium dla każdego układu $d_1 \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$. Dla $t=5$ z (3.2) mamy

$$\lambda_4(\mathbf{C}_d) \leq 2 < 3 - \frac{1}{3} \cdot 4 \cos^2 \frac{\pi}{5} = \lambda_4(\mathbf{C}_{d^*}).$$

b) Niech $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$. Wstawiając do wzoru (3.5) macierz $\mathbf{R}_d = (p(t-1)-1)\mathbf{I}_t$ otrzymujemy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d) = p(t-1) - 1 - \frac{1}{t} \lambda_1 \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)-1} \mathbf{r}_{dj} \mathbf{r}'_{dj} \right). \quad (3.7)$$

Z faktu, że wektor elementów diagonalnych macierzy określonej nieujemnie jest majoryzowany przez wektor jej wartości własnych, mamy

$$\lambda_1 \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)-1} \mathbf{r}_{dj} \mathbf{r}'_{dj} \right) \geq \max_{1 \leq i \leq t} \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)-1} r_{dij}^2 \right). \quad (3.8)$$

Dla $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ macierz informacji \mathbf{C}_d ma postać (1.6) i zachodzi nierówność

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq \lambda_{t-1}(\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d). \quad (3.9)$$

Zauważmy, że dla układu d spełniona jest nierówność

$$\max_{1 \leq i \leq t} \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)-1} r_{dij}^2 \right) \geq p(t-1) - 1.$$

Stąd oraz ze wzorów (3.9), (3.7) i (3.8) otrzymujemy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq p(t-1) - 1 - \frac{p(t-1) - 1}{t}. \quad (3.10)$$

Zauważmy, że dla $t \geq 5$ i $p = 2$, $t \geq 4$ i $3 \leq p \leq 10$ oraz dla $t \geq 3$ i $p \geq 11$ zachodzi nierówność

$$\frac{p(t-1) - 1}{t} \geq \frac{(p+1)^2}{p(t-1) - 1}. \quad (3.11)$$

Zatem dla dowolnego $d_1 \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$ różnego od d^* , z (3.3), (3.4), (3.10) oraz (3.11) mamy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq p(t-1) - 1 - \frac{(p+1)^2}{p(t-1) - 1} = \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d_1}) < \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*}).$$

Z powyższego wzoru wynika również, że wartość E-kryterium dla dowolnego układu $d \in \mathcal{R}_{t,p(t-1)-1,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$ jest mniejsza lub równa od wartości E-kryterium dla każdego układu $d_1 \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$.

Rozważmy teraz przypadki, gdy nierówność (3.11) nie zachodzi. Niech $p = 2$. Dla $t = 3$ ze wzorów (3.10) oraz (3.2) mamy

$$\lambda_2(\mathbf{C}_d) \leq 2 = 3 - \frac{1}{3} \left(1 + 4 \cdot 2 \cos^2 \frac{\pi}{3} \right) = \lambda_2(\mathbf{C}_{d^*}).$$

Dla $p = 2$ oraz $t = 4$ ze wzorów (3.10) oraz (3.2) otrzymujemy

$$\lambda_3(\mathbf{C}_d) \leq 5 - \frac{5}{4} < 4 = 5 - \frac{1}{5} \left(1 + 4 \cdot 2 \cos^2 \frac{\pi}{4} \right) = \lambda_3(\mathbf{C}_{d^*}).$$

Niech teraz $3 \leq p \leq 10$, oraz $t = 3$. Ze wzorów (3.10) oraz (3.2) mamy

$$\lambda_2(\mathbf{C}_d) \leq 2p - 1 - \frac{2p - 1}{3} < 2p - 1 - \frac{(p-1)^2 + 4p \cos^2 \frac{\pi}{3}}{2p - 1} = \lambda_2(\mathbf{C}_{d^*}),$$

przy czym druga nierówność zachodzi dla każdego p z podanego zakresu.

(ii) Niech d będzie układem nierównoreplikowalnym. Ponieważ wektor elementów diagonalnych macierzy określonej nieujemnie jest majoryzowany przez wektor jej wartości własnych, stosując (3.9) otrzymujemy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq \min_i (\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d)_{ii} \leq p(t-1) - 2 - \frac{p(t-1) - 2}{t}, \quad (3.12)$$

gdzie $(\mathbf{A})_{ii}$, $i = 1, 2, \dots, t$, oznacza i -ty element diagonalny macierzy \mathbf{A} . Zauważmy, że dla $t \geq 5$ i $p = 1$, $t \geq 4$ i $2 \leq p \leq 6$ oraz dla $t \geq 3$ i $p \geq 7$ spełniona jest nierówność

$$-2 - \frac{p(t-1) - 2}{t} \leq -1 - \frac{(p+1)^2}{p(t-1) - 1}. \quad (3.13)$$

Stąd, z (1.10), (3.3) oraz (3.4) dla dowolnego $d_1 \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$ różnego od d^* mamy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq p(t-1) - 1 - \frac{(p+1)^2}{p(t-1) - 1} = \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d_1}) < \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*}).$$

Z powyższego wzoru wynika również, że wartość E-kryterium dla dowolnego układu $d \in \mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t} \setminus \mathcal{R}_{t,p(t-1)-1,t}$ jest mniejsza lub równa od wartości E-kryterium dla każdego układu $d_1 \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$.

Rozważmy sytuację, gdy nierówność (3.13) nie zachodzi to znaczy, gdy $2 \leq p \leq 6$ oraz $t = 3$. Ze wzoru (3.12) mamy

$$\lambda_2(\mathbf{C}_d) \leq 2p - 2 - \frac{2p-2}{3} \leq 2p - 1 - \frac{(p-1)^2 + 4p \cos^2 \frac{\pi}{3}}{2p-1} = \lambda_2(\mathbf{C}_{d^*}),$$

gdzie druga nierówność jest spełniona dla wszystkich $2 \leq p \leq 6$.

Zatem ostatecznie dla dowolnego $d \in \mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)-1,t}$, gdzie $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$ dla $t \in \{3, 4\}$ oraz $p \in \mathbf{N}$ dla $t \geq 5$, układ d^* jest taki, że $\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*})$. Stąd d^* jest E-optymalny w klasie wszystkich układów $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$. ■

3.2. Układy E- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t}$, $p \in \mathbf{N}$

Niech $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$, $p \in \mathbf{N}$. Zgodnie z Twierdzeniem 2.7 jest to klasa układów spójnych. Zatem będziemy przyjmować, że liczba bloków w układzie doświadczalnym wynosi $b = p(t-1) + 1$, gdzie $p \in \mathbf{N}$. Z określenia klasy $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$ wynika, że $\mathbf{K}_d \in \tilde{\mathcal{K}}_{(p(t-1)+1)}$ i na mocy (2.2) macierz tę można zapisać w postaci

$$\mathbf{K}_d = \mathbf{P}_d + \frac{p-1}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - p \mathbf{I}_t,$$

gdzie $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_t$ zależy od układu doświadczalnego d . Zatem

$$\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d = (1+p^2) \mathbf{I}_t - p(\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d) - \frac{(p-1)^2}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t. \quad (3.14)$$

Rozważmy macierz $\mathbf{P}_d = \mathbf{H}_t$. Ze wzoru (3.14) mamy

$$\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d = (1+p^2) \mathbf{I}_t - p(\mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t) - \frac{(p-1)^2}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t.$$

Jest to macierz cyrkulenta i jej wartości własne są równe $1+p^2 - p(\omega_k + \omega_k^{-1}) = 1+p^2 - 2p \cos \frac{2k\pi}{t}$, gdzie $k = 0, 1, \dots, t-1$. Zatem największą wartość własną tej macierzy otrzymujemy dla $k = \frac{t}{2}$, gdy t jest parzyste lub dla $k = \frac{t\pm 1}{2}$, gdy t jest nieparzyste. Stąd mamy

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d) = \begin{cases} (p+1)^2, & \text{dla parzystego } t, \\ 1+p^2 - 2p \cos \frac{(t\pm 1)\pi}{t}, & \text{dla nieparzystego } t. \end{cases} \quad (3.15)$$

Zauważmy, że gdy t jest nieparzyste, wówczas

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d) = 1+p^2 + 2p \cos \frac{\pi}{t} \rightarrow (p+1)^2, \quad \text{gdy } t \rightarrow \infty$$

oraz

$$\lambda_1(\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d) < (p+1)^2. \quad (3.16)$$

Przypomnijmy, że wartościami własnymi macierzy blokowo diagonalnej są wartości własne poszczególnych bloków; porównaj Marcus i Minc (1964).

Poniższe twierdzenie podaje postać macierzy lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_d układu E- optymalnego w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$.

Twierdzenie 3.3. *Jeśli d^* jest układem, którego macierz lewego sąsiedztwa jest permutacyjnie podobna do macierzy*

- (i) $\mathbf{H}_t + p\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t - p\mathbf{I}_t$, *dla $t = 7$;*
- (ii) $\mathbf{I}_2 \otimes \mathbf{H}_2 + p\mathbf{1}_4\mathbf{1}'_4 - p\mathbf{I}_4$ *lub* $\mathbf{H}_4 + p\mathbf{1}_4\mathbf{1}'_4 - p\mathbf{I}_4$, *dla $t = 4$;*
- (iii) $\text{diag}(\mathbf{I}_i \otimes \mathbf{H}_3, \mathbf{I}_j \otimes \mathbf{H}_5) + p\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t - p\mathbf{I}_t$, *dla pozostałych $t \geq 3$,*
gdzie $t = 3i + 5j$ oraz $i \in \mathbf{N} \cup \{0\}$, $j \in \mathbf{N} \cup \{0\}$,

to d^ jest układem E -optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$, $p \in \mathbf{N}$, $t \geq 3$.*

Dowód.

Niech $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$. Wówczas $\mathbf{K}_d \in \tilde{\mathcal{K}}_{(p(t-1)+1)}$. Ze wzorów (3.15) i (3.16) wynika, że macierz \mathbf{P}_{d^*} , dla której norma spektralna macierzy \mathbf{K}_{d^*} osiąga swoje minimum, jest permutacyjnie podobna do macierzy blokowo diagonalnej, z blokami diagonalnymi możliwie najmniejszego oraz, jeśli to możliwe, nieparzystego stopnia. Stąd oraz z faktu, że $\mathbf{K}_d = \mathbf{S}'_d - \frac{p(t-1)+1}{t}\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t$ wynika natychmiast teza (i) oraz (iii) dla $t = 5$ oraz $t = 3m$, $m \in \mathbf{N}$. Dla $t \geq 8$ wystarczy zauważyć, że wszystkie wartości t mogą być przedstawione w postaci $3i + 5j$, gdzie $i \in \mathbf{N}$, $j \in \mathbf{N}$. Zatem ze wzorów (3.1), (3.15) i (3.16) oraz ze związku między macierzami \mathbf{K}_d i \mathbf{S}_d , postać macierzy \mathbf{S}_{d^*} jest taka jak w tezie (iii). Dla $t = 4$ możliwy jest tylko podział na bloki o parzystym wymiarze. Stąd wynika (ii). ■

Dla układów CNBD, które są uniwersalnie optymalne, wszystkie niezerowe wartości własne macierzy informacji są równe. Podobnie jest dla układów E -optymalnych, gdy $t = 3$. W pozostałych przypadkach wartości te są różne. Co więcej, stopień ich zróżnicowania zależy od liczby obiektów t . Interesująca wydaje się sytuacja, gdy macierz informacji układu ma dwie niezerowe wartości własne. Ma to miejsce gdy $t = 3m$, $m \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$, $t = 4$ oraz $t = 5$. Szczegółowo jest to omówione w następującym wniosku, który wynika z Twierdzenia 3.3 oraz ze wzoru (1.11).

Wniosek 3.1. Niezerowe wartości własne macierzy informacji układu, którego macierz lewego sąsiedztwa jest określona w Twierdzeniu 3.3, są następujące:

- (i) $2p + 1 - \frac{a+p}{2p+1}$, dla $t = 3$;
- (ii) $b, b - \frac{a+p}{b}$, dla $t = 3m, m \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$;
- (iii) $3p + 1, 3p + 1 - \frac{(p+1)^2}{3p+1}$ lub $3p + 1 - \frac{a}{3p+1}, 3p + 1 - \frac{(p+1)^2}{3p+1}$, dla $t = 4$;
- (iv) $4p + 1 - \frac{a+p \frac{1-\sqrt{5}}{2}}{4p+1}, 4p + 1 - \frac{a+p \frac{1+\sqrt{5}}{2}}{4p+1}$, dla $t = 5$;
- (v) $b, b - \frac{a+p \frac{1-\sqrt{5}}{2}}{4p+1}, b - \frac{a+p \frac{1+\sqrt{5}}{2}}{4p+1}$, dla $t = 5m, m \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$;
- (vi) $6p + 1 - \frac{a-2p \cos \frac{6\pi}{7}}{6p+1}, 6p + 1 - \frac{a-2p \cos \frac{2\pi}{7}}{6p+1}, 6p + 1 - \frac{a-2p \cos \frac{4\pi}{7}}{6p+1}$, dla $t = 7$;
- (vii) $b, b - \frac{a+p}{b}, b - \frac{a+p \frac{1-\sqrt{5}}{2}}{b}, b - \frac{a+p \frac{1+\sqrt{5}}{2}}{b}$, dla $t \geq 8$ oraz $t = 3i + 5j$, gdzie $i \in \mathbf{N}$ oraz $j \in \mathbf{N}$,

przy czym $a = 1 + p^2$ oraz $b = p(t-1) + 1$ jest liczbą bloków.

Udowodnimy teraz, że układ którego macierz lewego sąsiedztwa ma postać taką jak w Twierdzeniu 3.3, jest E-optymalny w klasie wszystkich układów $\mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t}$.

Twierdzenie 3.4. Jeśli układ d^* jest E-optymalny w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$, to jest również E-optymalny w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t}$, $p \in \mathbf{N}$, $t \geq 3$.

Dowód.

Przyjmijmy, że d^* jest układem spełniającym warunki z Twierdzenia 3.3 oraz, że $d \in \mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,p(t-1)+1,t}$.

(i) Niech d będzie układem równoreplikowalnym. Wówczas $\mathbf{R}_d = (p(t-1) + 1)\mathbf{I}_t$ oraz z (3.5) mamy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d) = p(t-1) + 1 - \frac{1}{t} \lambda_1 \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)+1} \mathbf{r}_{dj} \mathbf{r}'_{dj} \right). \quad (3.17)$$

Z faktu, że wektor elementów diagonalnych macierzy określonej nieujemnie jest majoryzowany przez wektor jej wartości własnych otrzymujemy

$$\lambda_1 \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)+1} \mathbf{r}_{dj} \mathbf{r}'_{dj} \right) \geq \max_{1 \leq i \leq t} \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)+1} r_{dij}^2 \right). \quad (3.18)$$

Ponieważ

$$\max_{1 \leq i \leq t} \left(\sum_{j=1}^{p(t-1)+1} r_{dij}^2 \right) \geq p(t-1) + 1,$$

ze wzorów (1.10), (3.15), (3.16) oraz (3.9), (3.17) i (3.18) mamy

$$\begin{aligned} \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) &\leq p(t-1) + 1 - \frac{p(t-1)+1}{t} \leq p(t-1) + 1 - \frac{(p+1)^2}{p(t-1)+1} \leq \\ &\leq p(t-1) + 1 - \frac{1}{p(t-1)+1} \lambda_1(\mathbf{K}_{d^*} \mathbf{K}'_{d^*}) = \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*}), \end{aligned}$$

przy czym druga nierówność jest prawdziwa dla $t \geq 4$ i $p \in \{1, 2\}$ oraz dla $t \geq 3$ i $p \geq 3$. Dla $t = 3$ i $p \in \{1, 2\}$ tezę otrzymujemy ze wzorów (1.10), (3.15), (3.16) oraz (3.9), (3.17) i (3.18) następująco

$$\lambda_2(\mathbf{C}_d) \leq 2p + 1 - \frac{2p+1}{3} \leq 2p + 1 - \frac{1+p^2+2p \cos \frac{\pi}{3}}{2p+1} = \lambda_2(\mathbf{C}_{d^*}).$$

(ii) Niech d będzie układem nierównoreplikowalnym. Korzystając z faktu, że wektor elementów diagonalnych macierzy określonej nieujemnie jest majoryzowany przez wektor jej wartości własnych oraz ze wzoru (3.9) mamy

$$\lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) \leq \min_i (\mathbf{T}'_d \mathbf{Q}_B \mathbf{T}_d)_{ii} \leq p(t-1) - \frac{p(t-1)}{t}.$$

Stąd oraz ze wzorów (1.10), (3.15) i (3.16) mamy ostatecznie

$$\begin{aligned} \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_d) &\leq p(t-1) - \frac{p(t-1)}{t} \leq p(t-1) + 1 - \frac{(p+1)^2}{p(t-1)+1} \leq \\ &\leq p(t-1) + 1 - \frac{1}{p(t-1)+1} \lambda_1(\mathbf{K}_{d^*} \mathbf{K}'_{d^*}) = \lambda_{t-1}(\mathbf{C}_{d^*}), \end{aligned}$$

przy czym przedostatnia nierówność zachodzi dla $t \geq 3$. ■

3.3. Konstrukcja układów E- optymalnych

W rozdziale tym podamy metodę konstrukcji układów E- optymalnych. Opiera się ona na podanych w poprzednich podrozdziałach postaciach macierzy lewego sąsiedztwa układów E- optymalnych. Ponieważ postaci te są podane z dokładnością do permutacyjnego podobieństwa, metoda ta pozwala na konstrukcję każdego układu E- optymalnego z dokładnością do przenumerowania obiektów.

Rozważmy klasę $\mathcal{D}_{t,b,t}$. Z Twierdzenia 1.1 wynika, że metoda konstrukcji układów optymalnych w tej klasie w modelu (1.3) opiera się na układach optymalnych w modelu (1.2). Katalog układów E-optymalnych w modelu (1.2) dla liczby obiektów $t \leq 15$, liczby bloków $b \leq 15$ oraz pojemności bloków $3 \leq k \leq t - 1$ jest omówiony w pracy Morgan (2007) i podany na stronie internetowej www.designtheory.org/database/. Zatem konstrukcja układu E-optymalnego w modelu współoddziaływania sprowadza się do wyznaczenia tego układu na podstawie jego macierzy lewego sąsiedztwa.

Zauważmy, że każdy blok kompletnego układu binarnego jest reprezentowany przez macierz permutacyjną, która jest cyklem długości t . Przypomnijmy, że każda permutacja jest cyklem lub iloczynem rozłącznych cykli (patrz Birkhoff i Mac Lane, 1954). Na przykład macierz \mathbf{H}'_3 jest macierzową reprezentacją cyklu $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 1$ (są to indeksy elementów równych 1 w macierzy \mathbf{H}'_3). Jeśli zapiszemy ten cykl w postaci [123], może być on traktowany jako sekwencja obiektów reprezentująca pojedynczy blok w układzie. Zatem przedstawienie macierzy lewego sąsiedztwa jako sumy macierzy reprezentujących permutacje jednocyklowe długości t jest równoznaczne z wyznaczeniem układu d . Rozkład macierzy lewego sąsiedztwa na sumę macierzy jest niejednoznaczny, natomiast układ E-optymalny jest wyznaczany jednoznacznie z dokładnością do przenumeroowania obiektów. Zatem w ogólności poszukiwanie opisanego rozkładu sprowadza się do systematycznego przeglądania wszystkich możliwych sum b macierzy permutacyjnych jednocyklowych, aż do uzyskania danej macierzy lewego sąsiedztwa.

Rozważmy klasę $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$, gdzie $p \in \mathbf{N}$. Niech d^* będzie układem E-optymalnym, którego macierz lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_{d^*} jest, zgodnie z Twierdzeniem 3.1, permutacyjnie podobna do $p(\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t) - \mathbf{H}_t$. Zauważmy, że $p(\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t)$ jest macierzą lewego sąsiedztwa układu uniwersalnie optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1),t}$, czyli CNBD. Ponieważ \mathbf{H}_t jest, z dokładnością do przenumeroowania obiektów, macierzową reprezentacją dowolnej permutacji jednocyklowej, konstrukcja układu E-optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)-1,t}$ sprowadza się do usu-

nięcia jednego bloku z układu CNBD. Katalog układów CNBD podany jest w pracy Azaïs i inni (1993).

Przykład 3.2. Dla $t = 5$ układ E- optymalny d^* możemy otrzymać przez usunięcie ostatniego bloku z CNBD, to znaczy

$$CNBD = \left(\begin{array}{c|ccccc} 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \\ 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 3 & 5 & 2 & 4 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 5 & 3 \end{array} \right) \implies d^* = \left(\begin{array}{c|ccccc} 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \\ 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 3 & 5 & 2 & 4 \end{array} \right).$$

□

W pracy Azaïs i inni (1993) podane zostało, że dla $t = 4$ oraz $t = 6$ nie istnieje układ CNBD, gdy $b = t - 1$. Zatem konstrukcję układów E- optymalnych w tych przypadkach należy rozpatryć osobno.

Niech $t = 4$ oraz $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$. Zgodnie z Twierdzeniem 3.1 macierz lewego sąsiedztwa układu E- optymalnego ma postać $\mathbf{S}_d = p(\mathbf{1}_4 \mathbf{1}'_4 - \mathbf{I}_4) - \mathbf{H}_4$. Zatem jeśli dla $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$ oraz $b = 3p$ istnieje CNBD, to konstrukcja układu E- optymalnego polega na usunięciu jednego bloku z CNBD. Ponieważ dla $p = 2$, a więc $b = 6$ istnieje CNBD, układ E- optymalny w klasie $\mathcal{D}_{4,5,4}$ możemy otrzymać przez usunięcie ostatniego bloku z CNBD. Wynika stąd, że opisana konstrukcja jest możliwa dla każdego parzystego p . Przykład układu E- optymalnego dla $p = 2$ jest następujący.

Przykład 3.3.

$$CNBD = \left(\begin{array}{c|cccc} 4 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 3 \\ 4 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 4 & 2 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right) \implies d^* = \left(\begin{array}{c|cccc} 4 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 3 \\ 4 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 4 & 2 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 3 \end{array} \right).$$

□

Niech $t = 6$. Przypadek $p = 1$ został omówiony po Twierdzeniu 3.1, natomiast układ E- optymalny w klasie $\mathcal{D}_{6,4,6}$ został podany w Przykładzie 3.1. W pozostałych przypadkach, to znaczy gdy $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$, może istnieć układ, którego macierz lewego sąsiedztwa ma postać $p(\mathbf{1}_6 \mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6) - \mathbf{H}_6$. Wówczas jego konstrukcja polega na usunięciu jednego bloku z CNBD. Dla $p = 2$ konstrukcja układu E- optymalnego jest następująca.

Przykład 3.4.

$$CNBD = \left(\begin{array}{c|cccccc} 6 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 6 & 5 \\ 2 & 1 & 3 & 5 & 6 & 4 & 2 \\ 4 & 1 & 3 & 6 & 2 & 5 & 4 \\ 6 & 1 & 4 & 2 & 5 & 3 & 6 \\ 3 & 1 & 4 & 5 & 2 & 6 & 3 \\ 3 & 1 & 5 & 2 & 4 & 6 & 3 \\ 4 & 1 & 5 & 3 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & 1 & 6 & 2 & 4 & 3 & 5 \\ 2 & 1 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right) \implies d^* = \left(\begin{array}{c|cccccc} 6 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 6 & 5 \\ 2 & 1 & 3 & 5 & 6 & 4 & 2 \\ 4 & 1 & 3 & 6 & 2 & 5 & 4 \\ 6 & 1 & 4 & 2 & 5 & 3 & 6 \\ 3 & 1 & 4 & 5 & 2 & 6 & 3 \\ 3 & 1 & 5 & 2 & 4 & 6 & 3 \\ 4 & 1 & 5 & 3 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & 1 & 6 & 2 & 4 & 3 & 5 \end{array} \right).$$

□

W przypadku, gdy dla pewnego $p \in \mathbf{N} \setminus \{1, 2\}$ nie istnieje CNBD, konstrukcja układu E- optymalnego sprowadza się do przedstawienia macierzy \mathbf{S}_{d^*} w postaci sumy $p(t - 1) - 1$ macierzy permutacyjnych jednocyklowych. Jeśli taka dekompozycja nie istnieje, należy poszukiwać rozbicia macierzy $p(\mathbf{1}_6 \mathbf{1}'_6 - \mathbf{I}_6) - \mathbf{P}_d$ na sumę $p(t - 1) - 1$ macierzy permutacyjnych jednocyklowych, dla \mathbf{P}_d będącej jedną z macierzy postaci $\text{diag}(\mathbf{H}_3, \mathbf{H}_3)$, $\text{diag}(\mathbf{H}_4, \mathbf{H}_2)$ lub $\text{diag}(\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_2, \mathbf{H}_2)$.

W przypadku, gdy $t = 4$ oraz $t = 6$, konstrukcję układu E- optymalnego dla dużych p można uzyskać poprzez konstrukcję układu E- optymalnego dla małych p oraz uzupełnienie uzyskanego układu o odpowiednią krotność bloków układu CNBD.

W Rozdziale 3.2 udowodnione zostało twierdzenie podające postaci macierzy lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_{d^*} układów E- optymalnych w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t}$. Podamy teraz metodę konstrukcji tych układów.

Zauważmy, że konstrukcja układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,p(t-1)+1,t}$ sprowadza się do konstrukcji układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,t,t}$ oraz rozszerzenia go o bloki układu CNBD, który jest uniwersalnie optymalny w klasie $\mathcal{D}_{t,(p-1)(t-1),t}$. Zatem w dalszej części tego rozdziału ograniczymy się do konstrukcji układów E- optymalnych w klasie $\mathcal{D}_{t,t,t}$.

Z Twierdzenia 3.3 wynika, że macierz lewego sąsiedztwa układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,t,t}$ ma elementy diagonalne równe 0, dokładnie jeden element pozadiagonalny w każdym wierszu i każdej kolumnie równy 2 oraz pozostałe elementy pozadiagonalne są równe 1. Oznacza to, że układ E- optymalny musi mieć dwie klasy uporządkowanych par sąsiadów: $t(t-2)$ uporządkowanych par występujących w układzie d jeden raz oraz t uporządkowanych par występujących w układzie d dwa razy.

Ogólna zasada konstrukcji układów na podstawie ich macierzy lewego sąsiedztwa podana została na początku tego rozdziału. Jednak w tym przypadku można podać metodę, która pozwoli na zmniejszenie liczby koniecznych do rozpatrzenia dekompozycji macierzy lewego sąsiedztwa na sumę macierzy permutacyjnych jednocyklowych. Ponadto w pewnych szczególnych przypadkach konstrukcję układu E- optymalnego można oprzeć na układach CNBD.

Zgodnie z Twierdzeniem 3.3 postać macierzy \mathbf{S}_{d^*} zależy od t . Zatem omawiając konstrukcję układów E- optymalnych, należy rozpatrzeć kilka przypadków, podając różne metody dla różnych t ; porównaj Filipiak i Róžański (2005).

Niech $t = 3, 5$ lub 7 . Macierz lewego sąsiedztwa układu E- optymalnego jest, zgodnie z Twierdzeniem 3.3, permutacyjnie podobna do $\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t$. Oznacza to, że układ E- optymalny możemy w tych przypadkach otrzymać z CNBD poprzez powtórzenie jednego bloku. Dla $t = 5$ układ E- optymalny d^* otrzymany przez powtórzenie ostatniego bloku w CNBD jest następujący.

Przykład 3.5.

$$CNBD = \left(\begin{array}{c|ccccc} 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 3 & 5 & 2 & 4 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 5 & 3 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right) \implies d^* = \left(\begin{array}{c|ccccc} 5 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 1 & 3 & 5 & 2 & 4 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 5 & 3 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right).$$

□

Warto zauważyć, że mimo iż w tych przypadkach konstrukcja układu E- optymalnego d^* polega na dodaniu jednego bloku do układu CNBD, macierz informacji \mathbf{C}_{d^*} nie jest sumą macierzy informacji dla CNBD oraz macierzy informacji powtórzonego bloku \mathbf{C}_1 . Dla układów z Przykładu 3.5 macierze te mają postać $\mathbf{C}_{CNBD} = \frac{15}{4} \mathbf{E}_5$, $\mathbf{C}_1 = \mathbf{\Theta}_5$ oraz $\mathbf{C}_{d^*} = 5 \mathbf{E}_5 - \frac{1}{5} (2\mathbf{I}_5 - \mathbf{H}_5 - \mathbf{H}'_5)$.

Niech $t = 4$. Ponieważ w Twierdzeniu 3.3 podane zostały dwie postaci macierzy lewego sąsiedztwa układu E- optymalnego przypadek ten rozpatrzmy osobno. Dla $p = 1$ macierz lewego sąsiedztwa układu E- optymalnego jest permutacyjnie podobna do $(\mathbf{I}_2 \otimes \mathbf{H}_2) + \mathbf{1}_4 \mathbf{1}'_4 - \mathbf{I}_4$ lub $\mathbf{H}_4 + \mathbf{1}_4 \mathbf{1}'_4 - \mathbf{I}_4$. Jednak nie istnieje układ doświadczalny, którego macierz lewego sąsiedztwa ma postać $\mathbf{S}_{d^*} = \mathbf{H}_4 + \mathbf{1}_4 \mathbf{1}'_4 - \mathbf{I}_4$; zobacz Azaïs i inni (1993). Stąd konstrukcja układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{4,4,4}$ sprowadza się do poszukiwania dekompozycji macierzy lewego sąsiedztwa na sumę macierzy permutacyjnych jednocyklowych. W ten sposób można otrzymać następujący przykład układu E- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{4,4,4}$.

Przykład 3.6.

$$d^* = \left(\begin{array}{c|cccc} 4 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right).$$

□

Dla pozostałych $p \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$ może istnieć układ, którego macierz lewego sąsiedztwa ma postać $\mathbf{S}_{d^*} = \mathbf{H}_4 + p(\mathbf{1}_4 \mathbf{1}'_4 - \mathbf{I}_4)$. Wówczas układ E- optymalny

można skonstruować z CNBD przez powtórzenie jednego bloku. Dla $p = 2$, a więc $b = 7$, otrzymujemy następujący układ E- optymalny skonstruowany przez powtórzenie ostatniego bloku w CNBD.

Przykład 3.7.

$$CNBD = \left(\begin{array}{c|cccc} 4 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 3 \\ 4 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 4 & 2 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right) \implies d^* = \left(\begin{array}{c|cccc} 4 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 3 \\ 4 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 4 & 2 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 2 \end{array} \right).$$

□

We wszystkich pozostałych przypadkach macierz lewego sąsiedztwa układu E- optymalnego można przedstawić jako sumę macierzy lewego sąsiedztwa układu CNBD i pewnej macierzy permutacyjnej będącej iloczynem rozłącznych cykli. Dlatego konstrukcja takich układów nie może być oparta na układach CNBD i sprowadza się do systematycznego przeglądania wszystkich możliwych sum t macierzy permutacyjnych jednocyklowych, aż do uzyskania danej macierzy lewego sąsiedztwa.

Łatwo zauważyć, że wraz ze wzrostem liczby obiektów t , wzrasta również liczba jednocyklowych permutacji. Dla zmniejszenia liczby możliwych dekompozycji macierzy lewego sąsiedztwa rozważać będziemy blokowo diagonalne macierze permutacyjne. Wynika to z blokowo diagonalnej postaci macierzy \mathbf{S}_{d^*} przedstawionej w Twierdzeniu 3.3. W dalszej części rozdziału przedstawione zostaną przykłady konstrukcji układów E- optymalnych dla $t \in \{6, 9, 8, 10\}$.

Niech $t = 3m$, gdzie $m \in \mathbf{N} \setminus \{1\}$. Dla zilustrowania tego przypadku rozpatrzmy $m = 2$ oraz $m = 3$.

Niech $t = 6$. Układ E- optymalny w klasie $\mathcal{D}_{6,6}$ można otrzymać przez dekompozycję macierzy lewego sąsiedztwa układu d^* na sumę trzech macierzy per-

mutacyjnie podobnych do \mathbf{U}_6 oraz trzech macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{V}_6 , gdzie

$$\mathbf{U}_6 = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{Q} \end{pmatrix} \mathbf{H}'_6 \begin{pmatrix} \mathbf{P}' & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{Q}' \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V}_6 = \begin{pmatrix} \mathbf{R} & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_{4 \times 2} & \mathbf{I}_4 \\ \Delta_2 & \Theta_{2 \times 4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}' & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{S}' \end{pmatrix}$$

oraz $\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{S} \in \mathcal{P}_3$, natomiast $\Delta_n = (\delta_{ij}) \in \mathbf{R}_n$ jest macierzą, której elementy spełniają warunki $\delta_{ij} = 1$ gdy $j = n+1-i$ oraz $\delta_{ij} = 0$ w przeciwnym przypadku, $1 \leq i, j \leq n$. Przykład układu E-optimalnego w klasie $\mathcal{D}_{6,6,6}$ jest następujący.

Przykład 3.8.

$$d^* = \left(\begin{array}{c|cccccc} 6 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 6 & 5 & 3 \\ 4 & 1 & 3 & 2 & 5 & 6 & 4 \\ 3 & 1 & 4 & 5 & 2 & 6 & 3 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 3 & 6 & 2 \\ 5 & 1 & 6 & 4 & 2 & 3 & 5 \end{array} \right).$$

□

Niech $t = 9$. Układ E-optimalny w klasie $\mathcal{D}_{9,9,9}$ można otrzymać przez dekompozycję macierzy lewego sąsiedztwa układu d^* na sumę trzech macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{U}_9 , trzech macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{V}_9 oraz trzech macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{Z}_9 , gdzie

$$\mathbf{U}_9 = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \Theta_3 & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{E} & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \Theta_3 & \mathbf{F} \end{pmatrix} \mathbf{H}'_9 \begin{pmatrix} \mathbf{D}' & \Theta_3 & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{E}' & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \Theta_3 & \mathbf{F}' \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V}_9 = \begin{pmatrix} \mathbf{M} & \Theta_3 & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{N} & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \Theta_3 & \mathbf{P} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{7 \times 2} & \mathbf{I}_7 \\ \mathbf{I}_2 & \mathbf{0}_{2 \times 7} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}' & \Theta_3 & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{N}' & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \Theta_3 & \mathbf{P}' \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{Z}_9 = \begin{pmatrix} \mathbf{Q} & \Theta_3 & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{R} & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \Theta_3 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{6 \times 3} & \mathbf{I}_6 \\ \mathbf{I}_3 & \mathbf{0}_{3 \times 6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}' & \Theta_3 & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \mathbf{R}' & \Theta_3 \\ \Theta_3 & \Theta_3 & \mathbf{S}' \end{pmatrix}$$

oraz $\mathbf{D}, \mathbf{E}, \mathbf{F}, \mathbf{M}, \mathbf{N}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{S} \in \mathcal{P}_3$.

Niech $t \geq 8$ oraz $t \neq 3m$, $m \in \mathbf{N}$. Weźmy $t \in \{8, 10\}$.

Niech $t = 8$. Układ E-optymalny w klasie $\mathcal{D}_{8,8,8}$ można otrzymać przez dekompozycję macierzy lewego sąsiedztwa układu d^* na sumę trzech macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{U}_8 , trzech macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{V}_8 oraz dwóch macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{Z}_8 , gdzie

$$\mathbf{U}_8 = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \Theta_{3 \times 5} \\ \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{P} \end{pmatrix} \mathbf{H}'_8 \begin{pmatrix} \mathbf{D}' & \Theta_{3 \times 5} \\ \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{P}' \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V}_8 = \begin{pmatrix} \mathbf{E} & \Theta_{3 \times 5} \\ \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_{6 \times 2} & \mathbf{I}_6 \\ \Delta_2 & \Theta_{2 \times 6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}' & \Theta_{3 \times 5} \\ \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{Q}' \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{Z}_8 = \begin{pmatrix} \mathbf{F} & \Theta_{3 \times 5} \\ \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{I}_5 \\ \mathbf{H}'_3 & \Theta_{3 \times 5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}' & \Theta_{3 \times 5} \\ \Theta_{5 \times 3} & \mathbf{R}' \end{pmatrix}$$

oraz $\mathbf{D}, \mathbf{E}, \mathbf{F} \in \mathcal{P}_3$, $\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R} \in \mathcal{P}_5$.

Niech $t = 10$. Układ E-optymalny w klasie $\mathcal{D}_{10,10,10}$ można otrzymać przez dekompozycję macierzy lewego sąsiedztwa układu d^* na sumę pięciu macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{U}_{10} oraz pięciu macierzy permutacyjnie podobnych do \mathbf{V}_{10} , gdzie

$$\mathbf{U}_{10} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \Theta_5 \\ \Theta_5 & \mathbf{Q} \end{pmatrix} \mathbf{H}'_{10} \begin{pmatrix} \mathbf{P}' & \Theta_5 \\ \Theta_5 & \mathbf{Q}' \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V}_{10} = \begin{pmatrix} \mathbf{R} & \Theta_5 \\ \Theta_5 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_{6 \times 4} & \mathbf{I}_6 \\ \mathbf{H}_4 & \Theta_{4 \times 6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}' & \Theta_5 \\ \Theta_5 & \mathbf{S}' \end{pmatrix}$$

oraz $\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{S} \in \mathcal{P}_5$.

4. Układy D- optymalne

W rozdziale tym scharakteryzowane zostaną eksperymenty D- optymalne. Poszukiwać będziemy układu, który maksymalizuje iloczyn wszystkich, poza jedną zerową, wartości własnych macierzy informacji. Podobnie jak w poprzednim rozdziale układów D- optymalnych poszukiwać będziemy w klasach układów kompletnych, w których nie istnieje CNBD. Charakterystykę układów D- optymalnych w klasie $\mathcal{R}_{t,b,t}$ wyprowadzimy dla $b = t - 2$ oraz dla $b = t$. W pierwszym etapie scharakteryzujemy układy D- optymalne w klasach $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ oraz $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$, a następnie pokażemy, że układy te są również optymalne w klasach $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$ oraz $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$.

Zgodnie z definicją podaną w Rozdziale 1.4 wyznaczenie układu D- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,b,k}$, jest równoznaczne ze znalezieniem takiego układu $d^* \in \mathcal{D}_{t,b,k}$, że dla dowolnego $d \in \mathcal{D}_{t,b,k}$ spełniony jest warunek

$$\prod_{i=1}^{t-1} \lambda_i(\mathbf{C}_{d^*}) \geq \prod_{i=1}^{t-1} \lambda_i(\mathbf{C}_d). \quad (4.1)$$

Literatura dotycząca układów D- optymalnych w modelu (1.2) jest znacznie uboższa niż odnosząca się do układów E- optymalnych w tym modelu. Wynika to z dużo większej złożoności tego kryterium. Katalog eksperymentów D- optymalnych w klasie układów regularnego grafu, a właściwie spis literatury dla tych układów, gdy $t \leq 12$, $r \leq 10$ oraz $t \leq b$, podany jest w pracy John i Mitchell (1977). Ograniczenie do tej klasy wynika z intuicyjnego przekonania, że układów optymalnych należy poszukiwać wśród układów możliwie najbardziej zrównoważonych przy danym zestawie parametrów układu; porównaj na przykład John i Williams (1982). Przypuszczenie to, choć wydaje się intuicyjnie właściwe, okazuje się nie zawsze prawdziwe. Znane są przykłady układów E- optymalnych w modelu (1.2), które nie są układami regularnego grafu; zobacz na przykład Constantine (1986) oraz Bagchi (1994).

Układy D- optymalne w modelu (1.2), w których liczba jednostek doświadczalnych jest bliska minimum koniecznego do uzyskania układu spójnego, są

rozważane w pracach Balasubramanian i Dey (1996) oraz Gaffke (1982). W pierwszej z nich zawarte są również metody konstrukcji analizowanych układów.

4.1. Układy D- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$

W rozdziale tym scharakteryzowane zostaną eksperymenty D- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$. Z uwagi na to, że układów D- optymalnych poszukujemy wśród układów spójnych, ograniczymy nasze rozważania do $t \geq 5$. Wynika to z Twierdzenia 2.6 podającego minimalną liczbę bloków konieczną do skonstruowania układu spójnego oraz z faktu, że liczba bloków wynosi $b = t - 2$. Na początku rozdziału podana zostanie postać macierzy lewego sąsiedztwa układu D- optymalnego w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$. Następnie wykazane zostanie, że układ ten jest również D- optymalny w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$.

Niech układ $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$. Wówczas $\mathbf{K}_d \in \tilde{\mathcal{K}}_{(t-2)}$ oraz ze wzoru (2.2) macierz tę można zapisać w postaci

$$\mathbf{K}_d = \frac{2}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t - \mathbf{P}_d,$$

gdzie $\mathbf{P}_d \in \bar{\mathcal{P}}_t$ zależy od układu doświadczalnego d . Zatem

$$\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d = 2\mathbf{I}_t - \frac{4}{t} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t + \mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d.$$

Stąd oraz ze wzoru (1.10) macierz informacji układu $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ można zapisać w postaci

$$\mathbf{C}_d = \frac{t^2 - 4t + 2}{t - 2} \mathbf{I}_t - \frac{t - 4}{t - 2} \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \frac{1}{t - 2} (\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d). \quad (4.2)$$

Będziemy porównywać wartości D- kryterium dla macierzy \mathbf{C}_d postaci (4.2) dla różnych układów, a więc dla różnych macierzy \mathbf{P}_d .

Zauważmy, że macierze \mathbf{C}_d oraz $\mathbf{C}_d + \beta \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t$ mają te same wektory własne i odpowiadające im wartości własne za wyjątkiem wektora $\mathbf{1}_t$, który jest wektorem własnym obu macierzy, przy czym odpowiadają mu wartości własne równe 0 oraz

βt , odpowiednio. Zatem poszukiwanie układów D- optymalnych można sprowadzić do porównywania wartości wyznaczników macierzy $(t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t = \alpha\mathbf{I}_t - (\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d)$ dla różnych macierzy \mathbf{P}_d , gdzie $\alpha = t^2 - 4t + 2$. Ponadto z uwagi na to, że wartości własne macierzy permutacyjnie podobnych są takie same, wybór \mathbf{P}_d można ograniczyć do macierzy postaci \mathbf{H}_t lub $\text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}, \dots, \mathbf{H}_{t_m})$, gdzie $\sum_{i=1}^m t_i = t$, $m \neq 1$ oraz $t_i \geq 2$. Zatem $\alpha\mathbf{I}_t - (\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d)$ jest macierzą trójdiagonalną z narożnikami lub macierzą blokowo diagonalną, której bloki są macierzami trójdiagonalnymi z narożnikami.

Niech $\mathbf{P}_d = \mathbf{H}_t$. Ze wzoru (1.13) mamy

$$\det(\alpha\mathbf{I}_t - (\mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t)) = -2 + \text{tr} \left[\begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^t \right].$$

Skorzystamy z własności mówiącej, że ślad t -tej potęgi macierzy diagonalizowalnej jest równy sumie t -tych potęg jej wartości własnych. Ponieważ

$$\lambda_1 \left[\begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \quad \text{oraz} \quad \lambda_2 \left[\begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2},$$

stąd dla

$$x = \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2}, \quad y = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \quad (4.3)$$

mamy

$$\det(\alpha\mathbf{I}_t - (\mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t)) = -2 + x^t + y^t. \quad (4.4)$$

Ponieważ dla $t \geq 5$ współczynnik $\alpha \geq 7$, ze wzoru (4.3) wynikają następujące nierówności

$$\begin{aligned} x &= \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} > 0, & x &= \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} < \frac{\alpha - (\alpha - 2)}{2} = 1, \\ y &= \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} > \frac{\alpha + (\alpha - 2)}{2} = \alpha - 1, & y &= \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} < \frac{\alpha + \alpha}{2} = \alpha. \end{aligned}$$

Stąd

$$x \in (0, 1), \quad y \in (\alpha - 1, \alpha). \quad (4.5)$$

Następujące twierdzenie charakteryzuje układy D- optymalne w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$.

Twierdzenie 4.1. *Jeśli macierz lewego sąsiedztwa układu $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$, $t \geq 5$, jest permutacyjnie podobna do $\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t - \mathbf{H}_t$, to d^* jest układem D- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$.*

Dowód.

Z Twierdzenia 2.6 wynika, że rozważania można ograniczyć do $t \geq 5$. Ze wzoru (1.11) oraz z kryterium D- optymalności (4.1) wystarczy pokazać, że zachodzi następująca nierówność

$$\det(\alpha \mathbf{I}_t - \text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}) - \text{diag}(\mathbf{H}'_{t_1}, \mathbf{H}'_{t_2})) < \det(\alpha \mathbf{I}_t - \mathbf{H}_t - \mathbf{H}'_t),$$

gdzie $t_1 + t_2 = t$ oraz $t_1, t_2 \geq 2$. Z faktu, że wyznacznik macierzy blokowo diagonalnej jest iloczynem wyznaczników bloków diagonalnych oraz ze wzoru (4.4), powyższa nierówność jest równoważna następującej

$$(-2 + x^{t_1} + y^{t_1})(-2 + x^{t_2} + y^{t_2}) + 2 - x^t - y^t < 0.$$

Z ograniczenia (4.5) oraz z faktu, że $y > 6$ dla $t \geq 5$, mamy

$$\begin{aligned} & (-2 + x^{t_1} + y^{t_1})(-2 + x^{t_2} + y^{t_2}) + 2 - x^t - y^t = \\ & = 6 - 2(x^{t_1} + x^{t_2} + y^{t_1} + y^{t_2}) + x^{t_1}y^{t_2} + x^{t_2}y^{t_1} < \\ & < 6 - 2(y^{t_1} + y^{t_2}) + y^{t_2} + y^{t_1} = 6 - y^{t_1} - y^{t_2} < 0. \end{aligned}$$

■

Udowodnimy teraz twierdzenie charakteryzujące układy D- optymalne w klasie wszystkich układów binarnych.

Twierdzenie 4.2. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ jest układem D- optymalnym w tej klasie, to jest on również D- optymalny w klasie $\mathcal{B}_{t,t-2,t}$, $t \geq 5$.*

Dowód.

Niech d^* będzie układem D- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$. Wówczas z Twierdzenia 4.1 oraz wzoru (4.4), dla $t \geq 5$ mamy

$$\begin{aligned} \det\left((t-2)\mathbf{C}_{d^*} + (t-4)\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t\right) &= \det\left(\alpha \mathbf{I}_t - (\mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t)\right) = \\ &= -2 + x^t + y^t > y^t - 2. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Ponieważ dla $t \geq 5$ mamy $\alpha \geq 7$, prawdziwa jest nierówność $\sqrt{\alpha^2 - 4} > \alpha - \frac{3}{\alpha}$, zatem ze wzoru (4.3) zachodzi nierówność

$$y > \alpha - \frac{3}{2\alpha}.$$

Stąd oraz z (4.6) otrzymujemy

$$\det \left((t-2)\mathbf{C}_{d^*} + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right) > \left(\alpha - \frac{3}{2\alpha} \right)^t - 2 > \alpha^t - t\alpha^{t-1}\frac{3}{2\alpha} - 2. \quad (4.7)$$

Niech $d \in \mathcal{B}_{t,t-2,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$. Ze wzoru (1.11)

$$(t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t = (t-2)^2\mathbf{I}_t - \mathbf{S}'_d\mathbf{S}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t. \quad (4.8)$$

Elementy w każdym wierszu i każdej kolumnie macierzy \mathbf{S}_d sumują się do $t-2$. Ponieważ dla każdego $d \in \mathcal{B}_{t,t-2,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ co najmniej jeden element macierzy \mathbf{S}_d jest większy lub równy 2, stąd co najmniej jeden element diagonalny macierzy (4.8) jest mniejszy lub równy $(t-2)^2 - (4+t-4) + t-4 = t^2 - 4t = \alpha - 2$, natomiast pozostałe elementy diagonalne są mniejsze lub równe α . Zatem

$$\prod_{i=1}^t \left((t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right)_{ii} \leq \alpha^{t-1}(\alpha - 2). \quad (4.9)$$

W dalszej części dowodu skorzystamy z faktu, że dla każdej macierzy hermitowskiej $\mathbf{A} \in \mathbf{R}_n$, zachodzi nierówność

$$\prod_{i=1}^n \lambda_i(\mathbf{A}) \leq \prod_{i=1}^n (\mathbf{A})_{ii}; \quad (4.10)$$

porównaj Marshall i Olkin (1979). Stąd oraz z (4.9) otrzymujemy

$$\det \left((t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right) \leq \alpha^t - 2\alpha^{t-1}. \quad (4.11)$$

Ponieważ $\alpha = t^2 - 4t + 2$, dla $t \geq 5$ mamy

$$2\alpha^{t-1} - \frac{3}{2}t\alpha^{t-2} = \alpha^{t-2} \left(2\alpha - \frac{3}{2}t \right) > 2.$$

Zatem na mocy (4.7) oraz (4.11) otrzymujemy tezę. ■

Korzystając z ostatniego twierdzenia udowodnimy teraz, że układy o których mowa w Twierdzeniu 4.1 są również D- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$.

Twierdzenie 4.3. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ jest układem D- optymalnym w tej klasie, to jest on również D- optymalny w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$, $t \geq 5$.*

Dowód.

Niech $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ będzie układem D- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ oraz niech d będzie układem równoreplikowalnym. Korzystając z Twierdzenia 4.2 możemy założyć, że $d \in \mathcal{R}_{t,t-2,t} \setminus \mathcal{B}_{t,t-2,t}$. Ze wzoru (1.9)

$$\mathbf{C}_d \leq_L \mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d = (t-2)\mathbf{I}_t - \frac{1}{t-2} \mathbf{S}'_d \mathbf{S}_d, \quad (4.12)$$

gdzie $\mathbf{A} \leq_L \mathbf{B}$ oznacza, że macierz \mathbf{A} poprzedza macierz \mathbf{B} w sensie Loewnera. Jeśli w układzie d żaden obiekt nie jest swoim sąsiadem, to zgodnie ze wzorem (1.11) macierz po prawej stronie nierówności (4.12) jest macierzą informacji pewnego układu z klasy $\mathcal{B}_{t,t-2,t}$. Stąd oraz na mocy Twierdzenia 4.2 otrzymujemy tezę.

Załóżmy teraz, że w układzie d występują autosąsiedztwa. Przypomnijmy, że elementami macierzy \mathbf{S}_d są liczby naturalne lub zero oraz suma elementów w każdym jej wierszu wynosi $t-2$. Ponieważ dla układów z tej klasy w każdym wierszu i każdej kolumnie macierzy \mathbf{S}_d występuje co najmniej jedno zero, zatem wiersze tej macierzy można tak spermutować, aby otrzymać macierz lewego sąsiedztwa z zerami na głównej przekątnej. Zauważmy, że operacja taka nie zmienia postaci macierzy po obu stronach nierówności (4.12). W ten sposób otrzymaliśmy poprzedni przypadek dla układu bez autosąsiedztwa.

Niech teraz d będzie układem nierównoreplikowalnym, $d \in \mathcal{D}_{t,t-2,t} \setminus \mathcal{R}_{t,t-2,t}$. Ze wzoru (1.9) mamy

$$\mathbf{C}_d \leq_L \mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d. \quad (4.13)$$

Rozważmy i -ty element diagonalny macierzy $\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d$, to znaczy

$$\left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} = r_i - \sum_{j=1}^t \frac{s_{ij}^2}{r_j} = r_i - \sum_{j=1}^t \frac{s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}}.$$

Zatem średnia z elementów diagonalnych macierzy $\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d$ jest równa

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t (\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d)_{ii} &= \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t r_i - \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^t \frac{s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} = \\ &= t - 2 - \frac{1}{t} \sum_{j=1}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Założmy, że układ d_s stowarzyszony z d jest niebinarny. Wówczas w macierzy \mathbf{S}_d pewien element jest równy co najmniej 2. Bez straty ogólności możemy założyć, że element ten znajduje się w pierwszym wierszu. Poszukiwać będziemy takiego układu d , a więc takiej macierzy \mathbf{S}_d , która maksymalizuje wartość wyrażenia (4.14), czyli minimalizuje wartość wyrażenia $\sum_{j=1}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}}$.

Jeśli maksymalna replikacja w układzie d jest możliwie najmniejsza, a zatem $r_{max} = t - 1$, to

$$\sum_{j=1}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} \geq \frac{4 + t - 3}{t - 1} + \sum_{j=2}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} = t + \frac{2}{t - 1}.$$

W przypadku gdy $r_{max} = t$

$$\sum_{j=1}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} \geq \frac{4 + t - 2}{t} + \sum_{j=2}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} = t + \frac{2}{t}.$$

Niech teraz $r_{max} = t + 1$, wówczas

$$\sum_{j=1}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} \geq \frac{4 + t - 1}{t + 1} + \sum_{j=2}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} = t + \frac{2}{t + 1}.$$

Łatwo zauważyć, że dalsze zwiększanie maksymalnej replikacji powoduje zwiększenie się liczby elementów równych 2 w macierzy \mathbf{S}_d lub wzrost największego jej elementu. Stąd dla $r_{max} = t + i$, $i \in \{-1, 0, 1, \dots, t^2 - 3t + 1\}$ mamy

$$\sum_{j=1}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}^2}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} \geq \frac{4i + t - i}{t + i} + \sum_{j=2}^t \frac{\sum_{i=1}^t s_{ij}}{\sum_{l=1}^t s_{lj}} = t + \frac{2i}{t + i}.$$

Zatem wyrażenie (4.14) jest maksymalne, gdy $r_{max} = t + 1$ i wynosi ono

$$\max_d \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t (\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d)_{ii} = t - 2 - \frac{1}{t} \left(t + \frac{2}{t + 1} \right) = t - 3 - \frac{2}{t(t + 1)}.$$

Stąd oraz z (4.10) i (4.13) mamy

$$\begin{aligned}
\det \left((t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right) &\leq \\
&\leq \prod_{i=1}^t \left((t-2)\mathbf{R}_d - (t-2)\mathbf{S}'_d\mathbf{R}_d^{-1}\mathbf{S}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right)_{ii} \\
&\leq \left((t-2) \left(t-3 - \frac{2}{t(t+1)} \right) + t-4 \right)^t = \left(t^2 - 4t + 2 - \frac{2(t-2)}{t(t+1)} \right)^t.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Z drugiej strony z (4.7) mamy

$$\begin{aligned}
\det \left((t-2)\mathbf{C}_{d^*} + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right) &> \alpha^{t-2} \left(\alpha^2 - \frac{3}{2}t \right) = \\
&= (t^2 - 4t + 2)^{t-2} \left(t^4 - 8t^3 + 20t^2 - \frac{35}{2}t + 4 \right).
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Stąd oraz z (4.15) wynika, że teza twierdzenia jest równoważna następującej nierówności

$$\left(t^2 - 4t + 2 - \frac{2(t-2)}{t(t+1)} \right)^t \leq (t^2 - 4t + 2)^{t-2} \left(t^4 - 8t^3 + 20t^2 - \frac{35}{2}t + 4 \right). \tag{4.17}$$

Zatem wystarczy pokazać, że

$$\left(t^2 - 4t + 2 - \frac{2(t-2)}{t(t+1)} \right)^2 \leq t^4 - 8t^3 + 20t^2 - \frac{35}{2}t + 4,$$

co jest równoważne nierówności $5t^5 - 46t^4 + 29t^3 + 40t^2 - 32 \geq 0$, która jest prawdziwa dla $t > 8,397$. Stąd dla $t > 8$ nierówność (4.17) jest spełniona. Gdy $t = 6$, $t = 7$ lub $t = 8$, prawdziwość (4.17) otrzymujemy bezpośrednio podstawiając odpowiednie wartości t . Dla $t = 5$ zależność ta nie zachodzi. W tym przypadku prawdziwość tezy wynika z (4.15) oraz z następującej nierówności

$$\begin{aligned}
\det (3\mathbf{C}_d + \mathbf{1}_5\mathbf{1}'_5) &\leq \left(5^2 - 4 \cdot 5 + 2 - \frac{2(5-2)}{5(5+1)} \right)^5 = (6,8)^5 < \\
&< 15125 = \det (3\mathbf{C}_{d^*} + \mathbf{1}_5\mathbf{1}'_5).
\end{aligned}$$

Zatem dla układów nierównoreplikowalnych, których układ stowarzyszony jest niebinarny, teza twierdzenia jest prawdziwa.

Niech teraz układ d_s stowarzyszony z d będzie binarny. Ponieważ w macierzy \mathbf{S}_d wszystkie elementy są równe 0 lub 1, z (4.14) otrzymujemy

$$\frac{1}{t} \sum_{i=1}^t \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d\mathbf{R}_d^{-1}\mathbf{S}_d \right)_{ii} = t - 3.$$

Zatem

$$\text{tr}(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d) = t(t-3). \quad (4.18)$$

Oszacujemy teraz maksymalny element diagonalny macierzy $\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d$. Z postaci tej macierzy wynika, że w układzie dla którego największa wartość diagonalna osiąga swoje minimum, maksymalna replikacja jest najmniejsza z możliwych, to znaczy równa $t-1$ oraz co najmniej jedna replikacja jest równa 1. Ze względu na to, że suma wszystkich elementów macierzy \mathbf{S}_d wynosi $t(t-2)$, co najwyżej jeden obiekt może występować w eksperymencie jeden raz. Zatem przy maksymalnym wyrównaniu pozostałych replikacji otrzymujemy

$$\min_d \left(\max_i \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} \right) \geq t-1 - \left(\sum_{i=1}^t \frac{1}{r_i} - \min_k \frac{1}{r_k} \right).$$

Stąd mamy następujące minimum, które jest osiągnięte dla $r_k = t-1$

$$\begin{aligned} \min_d \left(\max_i \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} \right) &\geq t-1 - \left(1 + \frac{t-3}{t-1} + \frac{2}{t-2} \right) = \\ &= t-3 + \frac{t-4}{(t-1)(t-2)}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Analogicznie minimalny element diagonalny macierzy $\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d$ będzie największy, gdy minimalna replikacja będzie równa $t-3$. Wówczas

$$\max_d \left(\min_i \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} \right) \leq t-3 - \left(\sum_{i=1}^t \frac{1}{r_i} - \max_{k_1, k_2, k_3} \left(\frac{1}{r_{k_1}} + \frac{1}{r_{k_2}} + \frac{1}{r_{k_3}} \right) \right).$$

Zatem maksimum zostanie osiągnięte dla $r_{k_1} = r_{k_2} = r_{k_3} = t-3$ oraz przy maksymalnym wyrównaniu pozostałych replikacji. Stąd

$$\begin{aligned} \max_d \left(\min_i \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} \right) &\leq t-3 - \left(\frac{3}{t-1} + \frac{t-6}{t-2} \right) = \\ &= t-4 + \frac{t+2}{(t-1)(t-2)}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Pozostałe elementy diagonalne oszacujemy przez uśrednienie śladu macierzy $\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d$, pomniejszonego o oszacowanie maksymalnego i minimalnego elementu diagonalnego. Z (4.18), (4.19) oraz (4.20) mamy

$$\begin{aligned} &\frac{1}{t-2} \left(\text{tr}(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d) - \min_d \left(\max_i \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} \right) \right) + \\ &- \max_d \left(\min_i \left(\mathbf{R}_d - \mathbf{S}'_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}_d \right)_{ii} \right) = \frac{t^2-5t+7}{t-2} - \frac{2}{(t-2)^2}. \end{aligned}$$

Stąd oraz z (4.19), (4.20), (4.10) i (4.13) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \det \left((t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right) &\leq \\ &\leq \prod_{i=1}^t \left((t-2)\mathbf{R}_d - (t-2)\mathbf{S}'_d\mathbf{R}_d^{-1}\mathbf{S}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right)_{ii} \leq \\ &\leq \left(t^2 - 4t + 3 - \frac{2}{t-2} \right)^{t-2} \left(t^2 - 4t + 3 - \frac{3}{t-1} \right) \left(t^2 - 5t + 5 + \frac{3}{t-1} \right). \end{aligned}$$

Stąd oraz z (4.16) dla wykazania tezy twierdzenia wystarczy pokazać, że

$$\begin{aligned} \left(t^2 - 4t + 3 - \frac{2}{t-2} \right)^{t-2} \left(t^2 - 4t + 3 - \frac{3}{t-1} \right) \left(t^2 - 5t + 5 + \frac{3}{t-1} \right) &\leq \\ &\leq (t^2 - 4t + 2)^{t-2} \left(t^4 - 8t^3 + 20t^2 - \frac{35}{2}t + 4 \right), \end{aligned} \quad (4.21)$$

co jest równoważne

$$\left(\frac{t^2 - 4t + 2}{t^2 - 4t + 3 - \frac{2}{t-2}} \right)^{t-2} \geq \frac{t^6 - 11t^5 + 47t^4 - 100t^3 + 116t^2 - 74t + 12}{t^6 - 10t^5 + 37t^4 - 65,5t^3 + 59,5t^2 - 25,5t + 4}. \quad (4.22)$$

Ponieważ ze wzoru Newtona mamy

$$\begin{aligned} \left(\frac{t^2 - 4t + 2}{t^2 - 4t + 3 - \frac{2}{t-2}} \right)^{t-2} &= \left(1 - \frac{t-4}{t^3 - 6t^2 + 11t - 8} \right)^{t-2} > \\ &> 1 - \frac{(t-2)(t-4)}{t^3 - 6t^2 + 11t - 8} + \frac{(t-2)(t-3)(t-4)^2}{2(t^3 - 6t^2 + 11t - 8)^2} - \frac{(t-2)(t-3)(t-4)^4}{6(t^3 - 6t^2 + 11t - 8)^3}, \end{aligned}$$

aby udowodnić nierówność (4.22) wystarczy pokazać, że

$$\begin{aligned} 1 - \frac{(t-2)(t-4)}{t^3 - 6t^2 + 11t - 8} + \frac{(t-2)(t-3)(t-4)^2}{2(t^3 - 6t^2 + 11t - 8)^2} - \frac{(t-2)(t-3)(t-4)^4}{6(t^3 - 6t^2 + 11t - 8)^3} &> \\ \frac{t^6 - 11t^5 + 47t^4 - 100t^3 + 116t^2 - 74t + 12}{t^6 - 10t^5 + 37t^4 - 65,5t^3 + 59,5t^2 - 25,5t + 4}. \end{aligned}$$

Nierówność ta jest prawdziwa dla $t > 7,775$. Zatem zależność (4.21) zachodzi dla $t \geq 8$. Dla $t = 7$ teza wynika z następującej nierówności

$$\det(5\mathbf{C}_d + 3\mathbf{1}_7\mathbf{1}'_7) < 3,3548 \times 10^9 < \det(5\mathbf{C}_{d^*} + 3\mathbf{1}_7\mathbf{1}'_7).$$

Dla $t = 5$ oraz $t = 6$ teza twierdzenia wynika z numerycznego porównania wartości wyznaczników $\det \left((t-2)\mathbf{C}_d + (t-4)\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right)$ dla wszystkich układów $d \in \mathcal{D}_{t,t-2,t} \setminus \mathcal{R}_{t,t-2,t}$, których układ stowarzyszony d_s jest binarny. ■

4.2. Układy D- optymalne w klasie $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$

W rozdziale tym rozważać będziemy układy z klasy $\mathcal{D}_{t,t,t}$. Na początku podane zostaną postaci macierzy lewego sąsiedztwa układu D- optymalnego w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$ w zależności od liczby obiektów t . Następnie wykazemy, że układy te są również D- optymalne w klasie układów równoreplikowalnych, w których żaden obiekt nie jest swoim sąsiadem.

Niech $d \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$. Wówczas $\mathbf{K}_d \in \tilde{\mathcal{K}}_{(t)}$ oraz ze wzoru (2.2) macierz tę można zapisać w postaci

$$\mathbf{K}_d = \mathbf{P}_d - \mathbf{I}_t,$$

gdzie $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_t$ zależy od układu doświadczalnego d . Zatem postać macierzy $\mathbf{K}_d \mathbf{K}'_d$ jest taka jak we wzorze (3.14) dla $p = 1$. Stąd oraz ze wzoru (1.10) otrzymujemy następującą postać macierzy informacji układu d

$$\mathbf{C}_d = \frac{t^2 - 2}{t} \mathbf{I}_t - \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t + \frac{1}{t} (\mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d). \quad (4.23)$$

Zgodnie z definicją układu D- optymalnego będziemy poszukiwać układu d^* spełniającego warunek (4.1). Stąd oraz z (4.23) będziemy porównywać wartości wyrażenia $\prod_{i=1}^{t-1} \lambda_i(\mathbf{C}_d)$ dla różnych układów, a więc dla różnych macierzy \mathbf{P}_d .

Podobnie jak w poprzednim rozdziale skorzystamy z faktu, że poszukiwanie układu D- optymalnego jest równoważne z porównaniem wartości wyznaczników macierzy $t\mathbf{C}_d + t\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t = \alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d$, gdzie $\alpha = t^2 - 2$, dla różnych macierzy \mathbf{P}_d . Z uwagi na to, że wartości własne macierzy permutacyjnie podobnych są takie same, wystarczy ograniczyć się do porównania wartości wyznacznika macierzy $\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d$, gdy \mathbf{P}_d jest macierzą \mathbf{H}_t lub $\text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}, \dots, \mathbf{H}_{t_m})$, gdzie $\sum_{i=1}^m t_i = t$, $m \neq 1$ oraz $t_i \geq 2$. Zauważmy, że w pierwszym przypadku $\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d$ jest macierzą trójdziagonalną z narożnikami, natomiast w drugim jest to macierz blokowo diagonalna, której bloki są macierzami trójdziagonalnymi z narożnikami.

Niech $\mathbf{P}_d = \mathbf{H}_t$. Ze wzoru (1.13) mamy

$$\det(\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t) = 2(-1)^{t+1} + \operatorname{tr} \left[\begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^t \right].$$

Skorzystamy z faktu, że ślad t -tej potęgi macierzy diagonalizowalnej jest równy sumie t -tych potęg jej wartości własnych. Ponieważ

$$\lambda_1 \left[\begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \quad \text{oraz} \quad \lambda_2 \left[\begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2},$$

zatem dla

$$x = \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2}, \quad y = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \quad (4.24)$$

mamy

$$\det(\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t) = \begin{cases} -2 + x^t + y^t, & \text{gdy } t \text{ jest parzyste,} \\ 2 + x^t + y^t, & \text{gdy } t \text{ jest nieparzyste.} \end{cases} \quad (4.25)$$

Ponieważ dla $t \geq 3$ zachodzi związek $\alpha - 1 < \sqrt{\alpha^2 - 4}$, prawdziwe są następujące nierówności

$$\begin{aligned} x &= \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} > 0, & x &= \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} < \frac{\alpha - (\alpha - 1)}{2} = \frac{1}{2}, \\ y &= \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} > \frac{\alpha + (\alpha - 1)}{2} = \alpha - \frac{1}{2}, & y &= \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} < \frac{\alpha + \alpha}{2} = \alpha. \end{aligned}$$

Stąd

$$x \in \left(0, \frac{1}{2}\right), \quad y \in \left(\alpha - \frac{1}{2}, \alpha\right). \quad (4.26)$$

Pokażemy teraz prawdziwość następującego twierdzenia

Twierdzenie 4.4. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$ jest układem, którego macierz lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_{d^*} jest permutacyjnie podobna do*

- (i) $\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{H}_3 + \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t$, dla $t = 3m$, $m \in \mathbf{N}$;
- (ii) $\operatorname{diag}(\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{H}_3, \mathbf{H}_4) + \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t$, dla $t = 3m + 4$, $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$;
- (iii) $\operatorname{diag}(\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{H}_3, \mathbf{H}_5) + \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t$, dla $t = 3m + 5$, $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$,

to d^* jest układem D -optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$, $t \geq 3$.

Dowód.

Niech $t = 3$. Jedyną macierzą $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_3$ jest \mathbf{H}_3 . Stąd oraz z (1.11) wynika teza.

Rozważmy $t = 4$. Z dokładnością do permutacyjnego podobieństwa jedynymi macierzami $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_4$ są \mathbf{H}_4 oraz $\text{diag}(\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_2)$. Zatem dla $t = 4$ teza twierdzenia wynika z (1.11) oraz z następującej nierówności

$$\begin{aligned} \det \left(\alpha \mathbf{I}_4 + \text{diag}(\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_2) + \text{diag}(\mathbf{H}'_2, \mathbf{H}'_2) \right) &= 36864 < \\ &< 37632 = \det(\alpha \mathbf{I}_4 + \mathbf{H}_4 + \mathbf{H}'_4). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Niech $t = 5$. Z dokładnością do permutacyjnego podobieństwa jedynymi macierzami $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_5$ są \mathbf{H}_5 oraz $\text{diag}(\mathbf{H}_3, \mathbf{H}_2)$. Ponieważ

$$\begin{aligned} \det \left(\alpha \mathbf{I}_5 + \text{diag}(\mathbf{H}_3, \mathbf{H}_2) + \text{diag}(\mathbf{H}'_3, \mathbf{H}'_2) \right) &= 6352500 < \\ &< 6375625 = \det(\alpha \mathbf{I}_5 + \mathbf{H}_5 + \mathbf{H}'_5), \end{aligned} \quad (4.28)$$

stąd oraz ze wzoru (1.11) otrzymujemy tezę twierdzenia dla $t = 5$.

Pokażemy teraz, że dla dowolnego $t \geq 6$ wartość wyznacznika macierzy $\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t$ jest mniejsza niż wartość wyznacznika macierzy $\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t-3}, \mathbf{H}_3) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t-3}, \mathbf{H}'_3)$ oraz, że dla dowolnej innej redukowalnej macierzy permutacyjnej $\mathbf{P}_d \in \overline{\mathcal{P}}_t$, wyznacznik macierzy $\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{P}_d + \mathbf{P}'_d$, jest mniejszy niż wyznacznik macierzy $\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t-3}, \mathbf{H}_3) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t-3}, \mathbf{H}'_3)$. Wystarczy zatem pokazać, że

$$\det(\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t) < \det(\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t-3}, \mathbf{H}_3) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t-3}, \mathbf{H}'_3)) \quad (4.29)$$

oraz

$$\begin{aligned} \det(\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t_1}, \mathbf{H}_{t_2}) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t_1}, \mathbf{H}'_{t_2})) &< \\ &< \det(\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t-3}, \mathbf{H}_3) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t-3}, \mathbf{H}'_3)), \end{aligned} \quad (4.30)$$

gdzie $t_1 + t_2 = t$, $t_1, t_2 \geq 2$, $t_1 \geq t_2$ oraz $t_2 \neq 3$, a następnie skorzystać ze wzorów (4.27) oraz (4.28).

W pierwszej kolejności pokażemy prawdziwość nierówności (4.29). Korzystając ze wzoru (4.25) i (4.26) oraz z faktu, że wyznacznik macierzy blokowo

diagonalnej jest równy iloczynowi wyznaczników jej bloków, dla t parzystego otrzymujemy

$$\begin{aligned} \det(\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t) - \det(\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t-3}, \mathbf{H}_3) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t-3}, \mathbf{H}'_3)) &= \\ &= -2 + x^t + y^t - (2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) = \\ &= -6 - 2x^3 - 2y^3 - 2x^{t-3} - 2y^{t-3} - x^3y^{t-3} - x^{t-3}y^3 < 0, \end{aligned}$$

natomiast dla t nieparzystego

$$\begin{aligned} \det(\alpha \mathbf{I}_t + \mathbf{H}_t + \mathbf{H}'_t) - \det(\alpha \mathbf{I}_t + \text{diag}(\mathbf{H}_{t-3}, \mathbf{H}_3) + \text{diag}(\mathbf{H}'_{t-3}, \mathbf{H}'_3)) &= \\ &= 2 + x^t + y^t - (-2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) = \\ &= 6 + 2x^3 + 2y^3 - 2x^{t-3} - 2y^{t-3} - x^3y^{t-3} - x^{t-3}y^3 < \\ &< 6\frac{1}{4} + 2y^3(1 - 2y^{t-3}) < 6\frac{1}{4} - 2y^3 < 0. \end{aligned}$$

Zatem nierówność (4.29) jest prawdziwa.

Pokażemy teraz prawdziwość nierówności (4.30). Niech $t_1 + t_2 = t$, $t_1, t_2 \geq 2$, $t_1 \geq t_2$ oraz $t_2 \neq 3$. Ponieważ wyznacznik macierzy blokowo diagonalnej jest równy iloczynowi wyznaczników jej bloków, ze wzoru (4.25) nierówność (4.30) jest równoważna wyrażeniu

- a) $(-2 + x^{t_1} + y^{t_1})(-2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) < 0$,
gdy t_1 oraz t_2 są parzyste,
- b) $(2 + x^{t_1} + y^{t_1})(2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) < 0$,
gdy t_1 i t_2 są nieparzyste,
- c) $(-2 + x^{t_1} + y^{t_1})(2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (-2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) < 0$,
gdy t_1 jest parzyste oraz t_2 jest nieparzyste,
- d) $(2 + x^{t_1} + y^{t_1})(-2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (-2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) < 0$,
gdy t_1 jest nieparzyste, natomiast t_2 jest parzyste.

Rozważmy przypadek a). Z (4.26) mamy

$$\begin{aligned} &(-2 + x^{t_1} + y^{t_1})(-2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (2 + x^{t-3} + y^{t-3})(2 + x^3 + y^3) = \\ &= -2x^3 - 2x^{t-3} - 2x^{t_1} - 2x^{t_2} - 2y^3 - 2y^{t-3} - 2y^{t_1} - 2y^{t_2} - x^3y^{t-3} - x^{t-3}y^3 + x^{t_1}y^{t_2} + x^{t_2}y^{t_1} \\ &< -2y^3 - 2y^{t-3} - y^{t_1} - y^{t_2} - x^3y^{t-3} - x^{t-3}y^3 < 0. \end{aligned}$$

W przypadku b) z (4.26) mamy

$$\begin{aligned}
& (2 + x^{t_1} + y^{t_1}) (2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (2 + x^{t-3} + y^{t-3}) (2 + x^3 + y^3) = \\
& = -2x^3 - 2x^{t-3} + 2x^{t_1} + 2x^{t_2} - 2y^3 - 2y^{t-3} + 2y^{t_1} + 2y^{t_2} - x^3 y^{t-3} - x^{t-3} y^3 + x^{t_1} y^{t_2} + x^{t_2} y^{t_1} \\
& < 1 - 2y^3 - 2y^{t-3} + 3y^{t_1} + 3y^{t_2} < -y^{t-3} + 3y^{t_1} - y^{t-3} + 3y^{t_2} < \\
& < -3y^{t-4} + 3y^{t_1} - 3y^{t-4} + 3y^{t_2} \leq 0,
\end{aligned}$$

przy czym ostatnia nierówność wynika z faktu, że z przyjętych założeń $t_2 \geq 2$ oraz $t_2 \neq 3$ dla nieparzystego t_2 , mamy $t_2 \geq 5$, a więc $t_1 \leq t - 5$ oraz z tego, że $t_1 \geq t_2 \geq 5$, więc $t \geq 10$.

Rozważmy przypadek c). Z (4.26) mamy

$$\begin{aligned}
& (-2 + x^{t_1} + y^{t_1}) (2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (-2 + x^{t-3} + y^{t-3}) (2 + x^3 + y^3) = \\
& = 2x^3 - 2x^{t-3} + 2x^{t_1} - 2x^{t_2} + 2y^3 - 2y^{t-3} + 2y^{t_1} - 2y^{t_2} - x^3 y^{t-3} - x^{t-3} y^3 + x^{t_1} y^{t_2} + x^{t_2} y^{t_1} \\
& < 1 + 2y^3 - 2y^{t-3} + 3y^{t_1} - y^{t_2} < 1 + 2y^3 - 2y^{t-3} + 3y^{t_1} - y^5 < \\
& < -2y^{t-3} + 3y^{t_1} < -2y^{t-3} + 3y^{t-5} \leq 0,
\end{aligned}$$

przy czym przedostatnia nierówność wynika z tego, że $t_2 \geq 5$, a więc $t_1 \leq t - 5$.

W przypadku d) z (4.26) mamy

$$\begin{aligned}
& (2 + x^{t_1} + y^{t_1}) (-2 + x^{t_2} + y^{t_2}) - (-2 + x^{t-3} + y^{t-3}) (2 + x^3 + y^3) = \\
& = 2x^3 - 2x^{t-3} - 2x^{t_1} + 2x^{t_2} + 2y^3 - 2y^{t-3} - 2y^{t_1} + 2y^{t_2} - x^3 y^{t-3} - x^{t-3} y^3 + x^{t_1} y^{t_2} + x^{t_2} y^{t_1} \\
& < -2y^{t-3} + 2y^3 - y^{t_1} + 3y^{t_2} + 1 < -yy^{t_1-1} + 3y^{t_2} + 1 < 0.
\end{aligned}$$

Zatem nierówność (4.30) jest prawdziwa. Ostatecznie z (4.27), (4.28), (4.29) i (4.30) oraz ze wzoru (1.11) otrzymujemy tezę. \blacksquare

Udowodnimy teraz, że układy, o których mowa w Twierdzeniu 4.4, są D- optymalne w klasie wszystkich układów binarnych.

Twierdzenie 4.5. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$ jest układem D-optymalnym w tej klasie, to jest on również D-optymalny w klasie $\mathcal{B}_{t,t,t}$, $t \geq 3$.*

Dowód.

Niech d^* będzie układem D- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$. Z Twierdzenia 4.4 oraz wzoru (4.25) mamy

$$\det(t\mathbf{C}_{d^*} + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t) = \begin{cases} (2 + x^3 + y^3)^m, & \text{gdy } t = 3m, m \in \mathbf{N}, \\ (2 + x^3 + y^3)^m (-2 + x^4 + y^4), & \text{gdy } t = 3m + 4, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}, \\ (2 + x^3 + y^3)^m (2 + x^5 + y^5), & \text{gdy } t = 3m + 5, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}. \end{cases}$$

Stąd oraz z (4.26) otrzymujemy nierówność

$$\det(t\mathbf{C}_{d^*} + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t) > \begin{cases} y^t, & \text{gdy } t = 3m, m \in \mathbf{N}, \\ y^t - 2y^{t-4}, & \text{gdy } t = 3m + 4, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}, \\ y^t, & \text{gdy } t = 3m + 5, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}. \end{cases} \quad (4.31)$$

Dla $t \geq 3$ mamy $\alpha \geq 7$, stąd prawdziwa jest nierówność $\sqrt{\alpha^2 - 4} > \alpha - \frac{3}{\alpha}$.
Zatem z (4.24) wynika, że

$$y > \alpha - \frac{3}{2\alpha}.$$

Stąd oraz ze wzoru (4.31) otrzymujemy

$$\det(t\mathbf{C}_{d^*} + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t) > \begin{cases} \left(\alpha - \frac{3}{2\alpha}\right)^t, & \text{gdy } t = 3m, m \in \mathbf{N}, \\ \left(\alpha - \frac{3}{2\alpha}\right)^{t-4} (\alpha^4 - 6\alpha^2), & \text{gdy } t = 3m + 4, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}, \\ \left(\alpha - \frac{3}{2\alpha}\right)^t, & \text{gdy } t = 3m + 5, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}. \end{cases}$$

Zatem

$$\det(t\mathbf{C}_{d^*} + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t) > \begin{cases} \alpha^t - \frac{3}{2}t\alpha^{t-2}, & \text{gdy } t = 3m, m \in \mathbf{N}, \\ \left(\alpha^{t-4} - \frac{3}{2}(t-4)\alpha^{t-6}\right) (\alpha^4 - 6\alpha^2), & \text{gdy } t = 3m + 4, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}, \\ \alpha^t - \frac{3}{2}t\alpha^{t-2}, & \text{gdy } t = 3m + 5, m \in \mathbf{N} \cup \{0\}. \end{cases} \quad (4.32)$$

Niech $d \in \mathcal{B}_{t,t,t} \setminus \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$. Wówczas w macierzy lewego sąsiedztwa układu d co najmniej jeden element jest większy lub równy 2. Ze wzoru (1.11) otrzymujemy

$$t\mathbf{C}_d + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t = t^2\mathbf{I}_t - \mathbf{S}'_d\mathbf{S}_d + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t. \quad (4.33)$$

Elementy w każdym wierszu i w każdej kolumnie macierzy \mathbf{S}_d sumują się do t . Stąd co najmniej jeden element diagonalny macierzy postaci (4.33) jest mniejszy lub równy $t^2 - (4 + 4 + t - 4) + t = t^2 - 4 = \alpha - 2$, natomiast pozostałe elementy diagonalne są mniejsze lub równe α . Zatem otrzymujemy

$$\prod_{i=1}^t \left(t\mathbf{C}_d + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t \right)_{ii} \leq \alpha^{t-1}(\alpha - 2).$$

Stąd oraz z (4.10) mamy

$$\det(t\mathbf{C}_d + t\mathbf{1}_t\mathbf{1}'_t) \leq \alpha^t - 2\alpha^{t-1}. \quad (4.34)$$

Ze wzorów (4.1), (4.32) oraz (4.34) wynika, że dla wykazania tezy twierdzenia wystarczy pokazać, że

$$\alpha^t - 2\alpha^{t-1} < \alpha^t - \frac{3}{2}t\alpha^{t-2}, \quad (4.35)$$

gdy $t = 3m$, $m \in \mathbf{N}$ lub $t = 3m + 5$, $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$ oraz, że

$$\alpha^t - 2\alpha^{t-1} < \left(\alpha^{t-4} - \frac{3}{2}(t-4)\alpha^{t-6} \right) (\alpha^4 - 6\alpha^2), \quad (4.36)$$

gdy $t = 3m + 4$, $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$.

Prawdziwość nierówności (4.35) dla każdego $t \geq 3$ wynika z równości $\alpha = t^2 - 2$ następująco

$$\alpha^t - 2\alpha^{t-1} - \alpha^t + \frac{3}{2}t\alpha^{t-2} = \alpha^{t-2} \left(\frac{3}{2}t - 2\alpha \right) < 0.$$

Nierówność (4.36) dla $t = 3m + 4$, $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$ wynika z równości $\alpha = t^2 - 2$ oraz z

$$\begin{aligned} & \alpha^t - 2\alpha^{t-1} - \left(\alpha^{t-4} - \frac{3}{2}(t-4)\alpha^{t-6} \right) (\alpha^4 - 6\alpha^2) = \\ & = -2\alpha^{t-1} + \frac{3}{2}t\alpha^{t-2} - 9(t-4)\alpha^{t-4} < -\frac{1}{2}t\alpha^{t-2} - 9(t-4)\alpha^{t-4} < 0. \end{aligned}$$

Ze wzorów (4.32), (4.35), (4.36) oraz (4.34) wynika teza twierdzenia. ■

Korzystając z powyższego twierdzenia podamy warunek dostateczny na to, aby układ doświadczalny był D- optymalny w klasie układów równoreplikowanych, w których żaden obiekt nie jest swoim sąsiadem. Klasę tę oznaczać będziemy przez $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$.

Twierdzenie 4.6. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$ jest układem D- optymalnym w tej klasie, to jest on również D- optymalny w klasie $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$.*

Dowód.

Niech $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$ będzie układem D- optymalnym w tej klasie. Z Twierdzenia 4.5 wystarczy założyć, że $d \in \overline{\mathcal{R}}_{t,t,t} \setminus \mathcal{B}_{t,t,t}$. Ze wzoru (1.9)

$$\mathbf{C}_d \leq_L \mathbf{R}_d - \mathbf{S}_d \mathbf{R}_d^{-1} \mathbf{S}'_d = t\mathbf{I}_t - \frac{1}{t} \mathbf{S}_d \mathbf{S}'_d. \quad (4.37)$$

Ponieważ w klasie układów $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$, żaden obiekt w doświadczeniu nie sąsiaduje ze sobą, z określenia macierzy \mathbf{S}_d oraz ze wzoru (1.11) wynika, że macierz po prawej stronie nierówności (4.37), jest macierzą informacji pewnego układu z klasy $\mathcal{B}_{t,t,t}$. Stąd oraz z Twierdzenia 4.5 otrzymujemy tezę. ■

4.3. Konstrukcja układów D- optymalnych

Korzystając z Twierdzenia 1.1 oraz bazując na podanych w literaturze wynikach dotyczących układów D- optymalnych w modelu (1.2), możliwe jest konstruowanie układów D- optymalnych w klasie $\mathcal{D}_{t,b,t}$ w modelu współoddziaływania; zobacz między innymi John i Mitchell (1977) oraz Balasubramanian i Dey (1996). Podobnie korzystając z wyników uzyskanych w Rozdziałach 4.1 oraz 4.2, możemy wskazać układy D- optymalne w pewnych klasach układów w modelu (1.2). Stąd konstrukcja układu D- optymalnego w modelu współoddziaływania, sprowadza się do wyznaczenia tego układu bazując na jego macierzy lewego sąsiedztwa. Zatem konstruowanie układu polega na przedstawieniu jego macierzy lewego sąsiedztwa w postaci sumy t macierzy permutacyjnych jednocyklowych. Szczegółowo zostało to opisane na początku Rozdziału 3.3.

W Twierdzeniu 4.1 podana została postać macierzy lewego sąsiedztwa układu D- optymalnego w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$. Stąd oraz z Twierdzenia 3.1 dla $p = 1$ wynika, że eksperymenty, które są D- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t-2,t}$, są również E- optymalne

w tej klasie. Zatem tak jak w przypadku układów E- optymalnych, konstrukcja układów D- optymalnych polega na usunięciu dowolnego bloku z układu CNBD. Przykłady takich konstrukcji zostały podane w Rozdziale 3.3.

W Twierdzeniu 4.4 podane zostały postaci macierzy lewego sąsiedztwa układów D- optymalnych w klasie $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$, w zależności od liczby obiektów t . Stąd oraz z Twierdzenia 3.3, dla $p = 1$ wynika, że dla $t = 3m$, gdzie $m \in \mathbf{N}$ oraz $t = 5$ eksperymenty, które są D- optymalne w klasie $\overline{\mathcal{R}}_{t,t,t}$, są jednocześnie E- optymalne w klasie $\mathcal{D}_{t,t,t}$. Zatem w tych przypadkach konstrukcja układów D- optymalnych jest taka, jak opisana w Rozdziale 3.3 konstrukcja układów E- optymalnych, gdy $p = 1$. W pozostałych przypadkach, to znaczy gdy $t = 4$ lub $t \geq 7$ oraz $t \neq 3m$, $m \in \mathbf{N}$, konstrukcja układu D- optymalnego polega na znalezieniu opisanej na początku Rozdziału 3.3 dekompozycji jego macierzy lewego sąsiedztwa na sumę t macierzy permutacyjnych jednocyklowych.

5. Wnioski końcowe

Głównym celem pracy było wyprowadzenie charakterystyki układów optymalnych ze względu na kryteria E- oraz D-optymalności w modelach współoddziaływania z efektami sąsiedztwa. Wyniki zawarte w pracy dotyczą układów o blokach kompletnych. W zagadnieniu dotyczącym optymalności układów ważną rolę pełni ich spójność, dlatego w Rozdziale 2 zostały scharakteryzowane eksperymenty spójne w modelu współoddziaływania. Podane zostały warunki konieczne spójności w klasie $\mathcal{D}_{t,b,t}$ oraz warunki konieczne i dostateczne na to, aby układ był spójny w klasie $\mathcal{B}_{t,b,t}$. Uzyskane wyniki bazują między innymi na związku między układem rozpatrywanym w modelu współoddziaływania, a układem z nim stowarzyszonym analizowanym w modelu (1.2).

W Rozdziale 3 scharakteryzowane zostały układy E-optymalne oraz podane zostały metody ich konstrukcji. Szczególną uwagę poświęcono klasom układów, w których liczba bloków jest o 1 mniejsza lub większa od tej, dla której istnieje układ uniwersalnie optymalny. W Rozdziale 4 zostały zawarte podobne wyniki dotyczące układów D-optymalnych, gdy liczba bloków wynosi $t-2$ lub t . W klasie $\mathcal{D}_{t,t,t}$ rezultaty dotyczące D-optymalności nie są pełne. Wynika to z faktu, iż w przypadku gdy w układzie występują autosąsiedztwa, elementy macierzy lewego sąsiedztwa mogą być bardziej wyrównane niż w sytuacji, gdy autosąsiedztwa nie występują. Ponadto, ze względu na występowanie w macierzy informacji układu niebinarnego zarówno komponentu związanego z macierzą lewego sąsiedztwa jak i macierzą incydencji, które nie są od siebie niezależne, bardzo trudno jest wyznaczyć oszacowanie odpowiedniego iloczynu wartości własnych. Na podstawie porównań numerycznych można wnioskować, że układy określone w Twierdzeniu 4.4 są D-optymalne w klasie wszystkich układów. Jednak techniki dowodowe zastosowane w tej pracy nie pozwalają na wykazanie tego w ogólności. Wyniki uzyskane w pewnych wąskich podklasach potwierdzają to przypuszczenie.

Nie uzyskano dotąd analogicznych wyników dotyczących A-optymalności. Jest to związane z większą złożonością tego kryterium. Zostały wykonane wstępne analizy oraz numeryczne porównania wartości kryterium A-optymalności dla

układów, w których liczba obiektów jest mniejsza bądź równa 14. Ograniczenie to wynika z faktu, że wraz ze wzrostem liczby obiektów t gwałtownie rośnie liczba koniecznych do wykonania porównań. Uzyskane wyniki pozwalają na sformułowanie następujących hipotez, podających postać macierzy lewego sąsiedztwa układów A- optymalnych w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ oraz $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$.

Hipoteza 5.1. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$ jest układem, którego macierz lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_{d^*} jest permutacyjnie podobna do $\mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t - \mathbf{H}_t$, to d^* jest układem A- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t-2,t}$.*

Hipoteza 5.2. *Jeśli $d^* \in \tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$ jest układem, którego macierz lewego sąsiedztwa \mathbf{S}_{d^*} jest permutacyjnie podobna do*

- (i) $\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{H}_3 + \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t$, dla $t = 3m$, $m \in \mathbf{N}$;
- (ii) $\text{diag}(\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{H}_3, \mathbf{H}_4) + \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t$, dla $t = 3m + 4$, gdzie $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$;
- (iii) $\text{diag}(\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{H}_3, \mathbf{H}_5) + \mathbf{1}_t \mathbf{1}'_t - \mathbf{I}_t$, dla $t = 3m + 5$, gdzie $m \in \mathbf{N} \cup \{0\}$,

to d^* jest układem A- optymalnym w klasie $\tilde{\mathcal{B}}_{t,t,t}$.

Planowane są również dalsze badania polegające na poszukiwaniu układów optymalnych ze względu na kryteria A-, D- oraz E- optymalności w klasach układów, w których liczba bloków jest inna niż dotychczas rozważana. Idea ta jest zgodna z podejściem stosowanym w literaturze dotyczącej układów optymalnych ze względu na powyższe kryteria w modelu (1.2); zobacz na przykład Constantine (1981).

W literaturze dotyczącej układów w modelu blokowym bez dodatkowych efektów zakłócających, często analizuje się własności pewnych układów, które wyróżnia się na podstawie metody ich konstrukcji. Do grupy tej należą między innymi układy cykliczne. Mogą one być uniwersalnie optymalne lub optymalne ze względu na wybrane kryteria. W ramach badań nad optymalnością układów w modelu współoddziaływania z efektami lewego sąsiedztwa przeanalizowane zostały również własności układów cyklicznych. W szczególności zbadana została optymalność i efektywność tych układów. Zostało pokazane, że układy cykliczne

mogą być w modelu współoddziaływania uniwersalnie optymalne. Natomiast w sytuacji, gdy nie istnieje układ uniwersalnie optymalny, istnieje zarówno układ cykliczny wysoce efektywny, jak i układ cykliczny o zerowej macierzy informacji; porównaj Filipiak i Różański (2004).

Bibliografia

- Azaïs, J.-M., Bailey, R.A., Monod, H., 1993. A catalogue of efficient neighbour-designs with border plots. *Biometrics* **49**, 1252–1261.
- Bagchi, S., 1994. Optimality and construction of some rectangular designs. *Metrika* **41**, 29–41.
- Balasubramanian, K., Dey, A., 1996. D-optimal designs with minimal and nearly minimal number of units. *J. Statist. Plann. Infer.* **52**, 255–262.
- Bailey, R.A., Druilhet, P., 2004. Optimality of neighbor-balanced designs for total effects. *Ann. Statist.* **32**(4), 1650–1661.
- Birkhoff, G., Mac Lane, S., 1954. *A Survey of Modern Algebra*. New York.
- Constantine, G.M., 1981. Some E-optimal block designs. *Ann. Statist.* **9**(4), 886–892.
- Constantine, G.M., 1982. On the E-optimality of PBIB designs with a small number of blocks. *Ann. Statist.* **10**(3), 1027–1031.
- Constantine, G.M., 1986. On the optimality of block designs. *Ann. Inst. Statist. Math.* **38**, 161–174.
- Druilhet, P., 1999. Optimality of circular neighbour balanced designs. *J. Statist. Plann. Infer.* **81**, 141–152.
- Jenkyn, J.F., Dyke, G.V., 1985. Interference between plots in experiments with plant pathogens. *Aspects of Applied Biology* **10**, 75–85.
- Filipiak, K., Markiewicz, A., 2003. Optimality of circular neighbor balanced designs under mixed effects model. *Statist. Probab. Lett.* **61**, 225–234.
- Filipiak, K., Markiewicz, A., 2004. Optimality of type I orthogonal arrays for general interference model with correlated observations. *Statist. Probab. Lett.* **68**, 259–265.
- Filipiak, K., Markiewicz, A., 2005. Optimality and efficiency of circular neighbor balanced designs for correlated observations. *Metrika* **61**, 17–27.
- Filipiak, K., Markiewicz, A., 2007. Optimal designs for a mixed interference model. *Metrika* **65**, 369–386.
- Filipiak, K., Rózański, R., 2003. Optimal and efficient designs for an interference model with correlated observations. *Coll. Biom.* **33**, 97–110.

- Filipiak, K., Róžański, R., 2004. Some properties of cyclic designs under an interference model. *Coll. Biom.* **34A**, 29–42.
- Filipiak, K., Róžański, R., 2005. E-optimal designs under an interference model. *Biom. Lett.* **42**(2), 133–142.
- Filipiak, K., Róžański, R., 2009. Connectedness of complete block designs under an interference model. *Statist. Papers* **50**, 779–787.
- Filipiak, K., Róžański, R., Sawikowska, A., Wojtera-Tyrakowska, D., 2008. On the E-optimality of complete designs under an interference model. *Statist. Probab. Lett.* **78**, 2470–2477.
- Gaffke, N., 1982. D-optimal block designs with at most six varieties. *J. Statist. Plann. Infer.* **6**, 183–200.
- Horn, R., Johnson, C.R., 1985. *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Jacroux, M., 1982. Some E-optimal designs for the one-way and two-way elimination of heterogeneity. *J. R. Statist. Soc. B* **44**, 253–261.
- Jacroux, M., 1983. On the E-optimality of block designs. *Sankhya, Series B* **45**, 351–361.
- Jacroux, M., 1991. A note on the E-optimality of block designs. *Metrika* **38**, 203–214.
- John, J.A., 1987. *Cyclic Designs*, Chapman and Hall Ltd, London.
- John, J.A., Mitchell, T.J., 1977. Optimal incomplete block designs. *J. R. Statist. Soc.*, **B**, **39** No. 1, 39–43.
- John, J.A., Williams, E.R., 1982. Conjectures for optimal block designs. *J. R. Statist. Soc.*, **B**, **44** No. 2, 221–225.
- Kiefer, J., 1975. Construction and optimality of generalized Youden designs. *J.N. Srivastava (Ed.), A Survey of Statistical Design and Linear Models*, North-Holland, Amsterdam, 333–353.
- Krafft, O., Schaefer, M., 1997. A-optimal connected block designs with nearly minimal number of observation. *J. Statist. Plann. Infer.* **65**, 375–386.
- Kunert, J., 1984. Design balanced for residual effects. *Commun. Statist.-Theory and Methods* **13**(21), 2665–2671.

- Kunert, J., 1994. Optimality of block designs with variable block sizes and random block effects. *Metrika* **41**, 71–81.
- Kunert, J., Martin, R. J., 2000. On the determination of optimal designs for an interference model. *Ann. Statist.* **28**, 1728–1742.
- Kushner, H. B., 1997. Optimal repeated measurements designs: the linear optimality equations. *Ann. Statist.* **25**, 2328–2344.
- Marcus, M., Minc, H., 1964. *A Survey of Matrix Theory and Matrix Inequalities*, Dover Publications, Inc., New York.
- Markiewicz, A., 1997. Properties of information matrices for linear models and universal optimality of experimental designs. *J. Statist. Plann. Infer.* **59**, 127–137.
- Marshall, A.W., Olkin, I., 1979. *Inequalities: Theory of Majorization and Its Application*, Academic Press.
- Mishra, N.S., 2007. Families of proper generalized neighbor designs. *J. Statist. Plann. Infer.* **137**, 1681–1686.
- Molinari, L.G., 2008. Determinants of block tridiagonal matrices. *Linear Algebra Appl.* **429**, 2221–2226.
- Monod, H., 1992. Two- factor neighbour designs in incomplete blocks for intercropping experiments. *The Statistician* **41** No. 5, 487–497.
- Morgan, J.P., 2007. Optimal incomplete block designs. *J. Amer. Statist. Assoc.* **102**, 655–663.
- Pukelsheim, F., 1993. *Optimal Designs of Experiments*, Wiley, New York.
- Raghavarao D. and Padgett L.V., 2005. *Block Designs*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
- Rees, D.H., 1967. Some designs of use in serology. *Biometrics* **23**, 779–791.
- Shah, K. R., Sinha, B. K., 1989. *Theory of Optimal Designs*, Springer-Verlag, New York.
- Srivastav, S.K., Shankar, A., 2003. On the E-optimality of certain class of block designs. *Stast. Probab. Lett.* **65**, 187–193.