Andrej Pázman
Optimálny experiment

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 23 (1978), No. 6, 310--317

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/138537

mohou být převedeny na věty spadající do této analýzy. Po druhé světové válce se věnoval problému vybudování teorie pravděpodobnosti na některých abstraktních prostorech.

Dále se M. Fréchet podílel na rozvoji teorie Markovových řetězců. K této problematice ho přivedl, jak tvrdil sám M. Fréchet, český matematik B. HOSTINSKÝ. Studoval Markovovy řetězce jak s diskrétním, tak spojitým prostorem stavů. Jeho publikace *Recherches théorétiques modernes sur le calcul des probabilités*" je dodnes často citována.

M. Fréchet zasáhl též do statistiky, teorie obnovy a pojistné matematiky, i když v relaci k ostatní činnosti jen okrajově. Odvodil dolní hranici pro rozptyl odhadu parametrů rozdělení. Propagoval a sám dělal moderní aplikace statistiky, např. vedl kampaň proti neuváženému používání koeficientu korelace.

Jak je vidět, M. Fréchet byl „ideálním" matematikem, protože nejen obsáhl řadu oborů, ale vytvořil základní principy a nástroje (které se dodnes používají a budou používat) a dovedl své i jiné výsledky aplikovat v mezioborových disciplínách. Je proto zajímavé, že si nevytvořil svou školu, že v samotné Francii trvalo přes třicet let než zásluhou N. BOURBAKIHO bylo navázáno na Fréchetovy práce. Na jeho díle však stavěla řada slavných matematiků jako P. S. ALEXANDROV, S. BANACH, F. HAUSDORFF, S. LEFSCHETZ, F. RIESZ, P. S. URYSON, N. WIENER a mnoho dalších.

Můžeme zakončit tvrzením, že M. Fréchet položil základní kámen dnešní moderní analýzy a teorie struktur a zúčastnil se podstatně další výstavby těchto i dalších oborů.

Optimálny experiment*)

Andrej Pázman, Bratislava

1. Úvod

S pojmom „experiment" sa každý stretol prinajmenšom v jednoduchej forme v stredoškolskej fyzike alebo chémii. Pre súčasného experimentálneho fyzika je experiment zložitý komplex úkonov, ktorý súbežne s našimi teoretickými vedomosťami umožňuje dešifrovať kúsok tajomstva prírody. V širšom zmysle sa však pod experimentom rozumie aj komplex meraní v technickej praxi, resp. v prevádzke výroby. Bez pokusu o presnú definíciu možno povedať, že „experiment je organizovaná ľudská činnosť, ktorá sa vykonáva za účelom poznávania niečoho, zvyčajne dosť dobre špecifikovaného, čomu sa hovorí meraný objekt" [1]. Pritom dôraz je na slove „organizovaná", pretože práve

*) Prednáška prednesená na IX. konferencii slovenských matematikov, 2.—4. decembra 1977 v Jasnej pod Chopkom.

matematické prostriedky používané na optimalizáciu organizácie experimentu sú predmetom tohto článku.

Experiment je v prvom rade záležitosťou fyzikov, chemikov, biológov, technikov atď. Predmetom štúdia matematikov sú princípy získavania informácie v experimente a metódy optimalizácie organizácie experimentu. Pochopiteľne matematik – odborník v teorii experimentu súbežne s rozvíjaním „čistej" teórie rozvíja aj svoje schopnosti rozmýšlať o situácii v experimente, ktorú môžu nastoliť fyzik, chemik atď., t. j. zaoberá sa matematikou „aplikovanou" v zmysle článku [2].

Teória experimentu a matematické metódy navrhovania experimentov súvisia s viacerými partiami matematiky: s teóriou pravdepodobnosti a matematickou štatistikou, teóriou hier, numerickou matematikou, kombinatorikou, projektívnou geometriou [3] teóriou Hilbertových priestorov [4] a s ďalšími partiami funkcionálnej analýzy. Jedným z cieľov článku je naznačiť niektoré z týchto súvislostí.

2. Elementárne príklady optimalizácie experimentu

Každý z nás má osobné skúsenosti s činnosťou, ktorej sa hovorí váženie na vahách. Preto prvý príklad sa týka organizácie takéhoto váženia.*)

Majme 3 predmety A_1, A_2, A_3. Úlohou je určiť hmotnosti Θ_1, Θ_2, Θ_3 týchto predmetov pomocou 4 vážení. Organizácia váženia, ktorú možno nazvať „bežnou" je takáto

1. váženie ...... prázdna váha ...... y_1
2. váženie ...... predmet A_1 .... y_2
3. váženie ...... predmet A_2 .... y_3
4. váženie ...... predmet A_3 .... y_4

Čísla $y_1, \ldots, y_4$ sú údaje váh v prvom až štvrtom vážení. Účelom prvého váženia je určenie nulovej polohy váh označenej v ďalšom Θ_0. Každý z údajov $y_1, \ldots y_4$ obsahuje náhodnú „chybu váženia", ktorej disperziu označíme σ^2. Hmotnosti predmetov určené vážením sú zrejme:

$$\hat{\Theta}_i = y_{i+1} - y_1\,; \quad (i = 1, 2, 3)\,,$$

pričom tieto sú náhodné s disperziami

$$D(\hat{\Theta}_i) = D(y_{i+1}) + D(y_1) = 2\sigma^2\,; \quad (i = 1, 2, 3)\,.$$

Uvažujme teraz inú organizáciu experimentu, ktorú nazveme „premyslenou":

1. ...... všetky tri predmety ... y_1
2. ...... predmet A_1 .... y_2
3. ...... predmet A_2 .... y_3
4. ...... predmet A_3 .... y_4

*) Príklad je prevzatý z [1]. Treba však podotknúť, že úloha optimalizácie organizácie váženia bola jednou z prvých riešených úloh navrhovania experimentov.

Hmotnosť predmetu A_1 určená vážením je

$$\hat{\Theta}_1 = \frac{y_1 + y_2 - y_3 - y_4}{2}$$

s disperziou

$$D(\hat{\Theta}_1) = \tfrac{1}{4}(D(y_1) + D(y_2) + D(y_3) + D(y_4)) = \sigma^2$$

(podobne pre $\hat{\Theta}_2$, $\hat{\Theta}_3$).

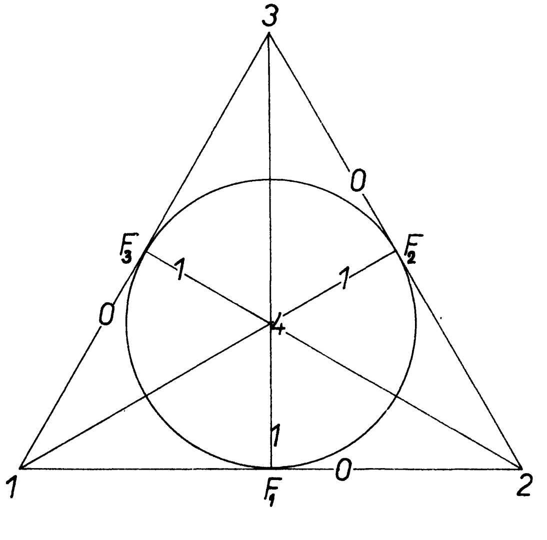
Obe organizácie experimentu umožňujú kompenzovať „systematickú chybu váženia", t. j. nulovú polohu váh Θ_0; pri „premyslenej" organizácii váženia sa však dajú určiť hmotnosti predmetov presnejšie.

Ďalší príklad organizácie experimentu je opäť elementárny, ale iného charakteru. V mnohých experimentoch, hlavne biologických, vystupujú faktory čiste kvalitatívne. Sledujme napríklad závislosť veku zvieraťa od troch faktorov: od farby, od pohlavia zvieraťa a od rušnosti okolitého prostredia.

Možné „úrovne" jednotlivých faktorov sú:

F_1 (farba)		F_2 (pohlavie)		F_3 (prostredie)	
biela	(0)	samec	(0)	rušné	(0)
šedá	(1)	samica	(1)	kľudné	(1)

Treba riešiť úlohu: koľko pokusných zvierat treba zvoliť a aké úrovne faktorov voliť pri jednotlivých zvieratách, aby sa dal sledovať vplyv faktorov na vek zvierať.



Je zaujímavé, že na zostavenie návrhu organizácie takéhoto experimentu sa využívajú konštrukcie konečných projektívnych geometrií [3]. Tak v našom príklade možno postupovať nasledovne: Zostavíme graf projektívnej roviny nad konečným dvojprvkovým telesom. Táto projektívna rovina je minimálna sústava „priamok" a „bodov" taká, že každá „priamka" obsahuje práve 3 „body" a každý „bod" je priesečníkom práve 3

„priamok". Jej graf je na obrázku; „priamka" spájajúca body F_1, F_2, F_3 má na grafe tvar kružnice.

„Bodom" na jednej „priamke" priradíme faktory, ostatným „bodom" priradíme čísla pokusov. Cez každý „faktor – bod" prechádzajú ešte 2 „priamky"; týmto priradíme ešte dve úrovne príslušného faktoru. Z každého „bodu" reprezentujúceho pokus vychádzajú 3 „priamky", obsahujúce postupne „body" F_1, F_2, F_3, ktoré sú očíslované úrovňami týchto faktorov v danom pokuse. To umožňuje zostavit tuto tabuľku návrhu experimentu:

1. pokus:	$F_1 = 0$,	$F_2 = 0$,	$F_3 = 0$
2. pokus:	$F_1 = 0$,	$F_2 = 1$,	$F_3 = 1$
3. pokus:	$F_1 = 1$,	$F_2 = 0$,	$F_3 = 0$
4. pokus:	$F_1 = 1$,	$F_2 = 1$,	$F_3 = 1$

Takýto návrh experimentu má niekoľko dobrých vlastností. Podobné vlastnosti majú aj iné návrhy zostavené pomocou projektívnych geometrií.

1. Každá úroveň každého faktora sa vyskytuje ten istý počet krát, teda úrovne faktorov sú rovnomerne zastúpené v návrhu.

2. Každá dvojica úrovní rôznych faktorov sa vyskytuje aspoň v jednom pokuse a každá práve jedenkrát.

3. Každá dvojica faktorov vystupuje ako dvojica štatisticky nezávislých náhodných veličín v tom zmysle, že ak $P_{F_i}(x)$ je relatívne četnosť výskytu úrovne x faktora F_i v tabuľke, tak platí

$$P_{F_i,F_j}(x, y) = P_{F_i}(x)\, P_{F_j}(y)$$

pre každú dvojicu faktorov F_i, F_j.

3. Optimalizácia regresného experimentu

Vráťme sa teraz k úvodnému príkladu s vážením. Je možné vykonať 27 rôznych typov vážení troch predmetov na váhach s dvomi miskami (prázdna miska-1 váženie, jeden predmet na jednej miske-6 vážení, dva predmety na jednej miske-6 vážení, jeden predmet na každej miske-6 vážení, dva predmety na jednej a jeden na druhej miske-6 vážení, tri predmety na jednej miske-2 váženia). Počet rôznych spôsobov organizácie (návrhov) experimentu so štyrmi váženiami je rovný počtu kombinácií 27 prvkov štvrtej triedy s opakovaním, $\binom{30}{4} = 27.\ 405$ (pripúšťame aj opakovanie toho istého váženia). Je jasné, že i v tomto elementárnom prípade by bolo neúnosné zisťovať optimálny návrh experimentu priamym porovnávaním všetkých návrhov.
Efektívne hľadanie optimálneho návrhu experimentu v podobných úlohách vyžaduje reformuláciu problému. Označme $X = \{x_1, \ldots, x_{27}\}$ množinu všetkých 27 typov váženi na váhach. Každému $x_j \in X$ zodpovedá váženie s náhodným údajom váhy $y(x_j)$, pričom pre stredné hodnoty a disperzie platí:

$$E[y(x_j)] = \sum_{i=1}^{3} \Theta_i f_i(x_j)\,; \quad (x_j \in X) \tag{1}$$

$$D[y(x_j)] = \sigma^2\,,$$

kde Θ_0, Θ_1, Θ_2, Θ_3 sú neznáme parametre (nulová poloha váh, hmotnosti predmetov) a $f_i(x_j)$; ($i = 0, 1, 2, 3$, $x_j \in X$) sú známe koeficienty (rovné 0, $+1$, -1 v príklade s vážením).

Experimenty popisované rovnicami typu (1) sú tzv. regresné experimenty. Tieto sa hodia na popis mnohých reálnych experimentov.

Namiesto toho, aby sme návrh regresného experimentu stotožňovali so štvoricou alebo všeobecne s N-ticou bodov množiny X, za návrh experimentu považujeme ľubovoľnú pravdepodobnosť ξ definovanú na X, s takouto interpretáciou: v experimente realizujeme len tie pokusy $x \in X$, pre ktoré $\xi(x) > 0$; číslo $\xi(x)$ je úmerné počtu nezávislých opakovaní pokusu x. Ak N je celkový počet meraní v experimente ($N = 4$ v príklade s vážením), môže sa stať, že $N\xi(x)$ nie je celé číslo. Definícia návrhu experimentu pomocou miery ξ je približná (asymptotická pre $N \to \infty$), značne však zjednodušuje teóriu.

Reálnu funkciu Ψ definovanú na množine Ξ všetkých návrhov experimentu, ktorú môžeme štatisticky interpretovať ako mieru kvality experimentu, nazývame kritériom optimality experimentu. Kritérium optimality sa volí v závislosti na cieľoch experimentu.

Výberom kritéria optimality sa zvyčajne problém optimalizácie regresného experimentu redukuje na riešenie extremalizačnej úlohy

$$\Psi(\xi^*) = \max_{\xi} \Psi(\xi)\,.$$

Tejto úlohe je venovaná pomerne rozsiahla odborná literatúra (prehľad metód výpočtu tzv. D-optimálneho návrhu experimentu možno nájsť v článku [5], niektoré metódy sú uvedené v knihe [6]). Pozornosť odborníkov je tiež zameraná na formulácie a porovnávania rôznych kritérií optimality (známa je napr. veta o ekvivalencii kritérií G-optimality a D-optimality [7]).

Ako príklad kritéria optimality uvedieme tu tzv. kritérium D-optimality (D od slova determinant):

$$\Psi(\xi) = \begin{cases} -\log\det \mathbf{D}_\Theta(\xi)\,; & \text{ak existuje } \mathbf{D}_\Theta(\xi) \\ -\infty \quad ; & \text{ak } \mathbf{D}_\Theta(\xi) \text{ neexistuje.} \end{cases}$$

Pritom $\mathbf{D}_\Theta(\xi)$ je kovariančná matica najlepších odhadov parametrov $\Theta_1, \Theta_2, \dots \Theta_m$, v experimente vykonanom podľa návrhu ξ; táto matica existuje práve vtedy, keď všetky parametre $\Theta_1, \dots, \Theta_m$ sú odhadnuteľné. Platí

a) Funkcia Ψ je konkávna na Ξ

b) Ak $y(x)$; $x \in X$ sú gaussovské náhodné veličiny, potom aj odhady parametrov $\hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2, \dots, \hat{\Theta}_m$ sú gaussovské s hustotou g a platí: entropia

$$\int_{R^m} g(\hat{\Theta}_1, \dots, \hat{\Theta}_m) \log g(\hat{\Theta}_1, \dots, \hat{\Theta}_m)\, d\hat{\Theta}_1 \dots d\hat{\Theta}_m = C_1 + C_2 \log\det \mathbf{D}_\Theta(\xi),$$

kde $C_1, C_2 < 0$ sú konštanty nezávislé na ξ.

c) Elipsoid spoľahlivosti $\mathscr{E}$ pre parametre $\Theta_1, \ldots, \Theta_m$ má tvar

$$\mathscr{E} = \{\mathbf{z} : \mathbf{z} \in R^m, \sum_{i,j=1}^{m} (z_i - \hat{\Theta}_i) \{\mathbf{D}_{\Theta}^{-1}(\xi)\}_{ij} (z_j - \hat{\Theta}_j) \leqq c\}.$$

(Elipsoid spoľahlivosti je podmnožina R^m minimálneho m-rozmerného objemu taká, že $P\{(\Theta_1, \ldots, \Theta_m) \in \mathscr{E}\} \geqq 1 - \varepsilon$. Konštantu c volíme v závislosti na volbe čísla $\varepsilon \in (0, 1)$). Objem elipsoidu spoľahlivosti je úmerný $[\det \mathbf{D}_{\Theta}(\xi)]^{1/2}$; D-optimálny návrh minimalizuje tento objem.

Niektoré ďalšie, často používané kritériá optimality sú:

a) $$\Psi(\xi) = -\sum_{i=1}^{m} \{\mathbf{D}_{\Theta}(\xi)\}_{ii},$$

t. j. stopa kovariančnej matice $\mathbf{D}_{\Theta}(\xi)$.

b) $$\Psi(\xi) = -\max_{1 \leqq i \leqq m} \{\mathbf{D}_{\Theta}(\xi)\}_{ii},$$

t. j. disperzia najnepresnejšieho odhadu parametrov.

c) $$\Psi(\xi) = -\mathbf{g}'\mathbf{D}_{\Theta}(\xi)\,\mathbf{g},$$

t. j. disperzia odhadu funkcie parametrov $\mathbf{g}'\boldsymbol{\Theta}$, atď.

d) Kritérium G-optimality

$$\Psi(\xi) = -\max_{x \in X} f'(x)\,\mathbf{D}_{\Theta}(\xi) f(x),$$

t. j. maximálna disperzia odhadu „funkcie odozvy"

$$h: x \in X \to f'(x)\,\Theta.$$

4. Štruktúra experimentu

Vnútorná štruktúra regresného experimentu úzko súvisí s niektorými známymi konštrukciami z funkcionálnej analýzy, ktoré takto dostávajú štatistickú interpretáciu. Poslednú časť tohto informatívneho článku o optimálnom experimente zameriame práve na takéto súvislosti.

V regresnom experimente, parameter Θ_i alebo lineárna funkcia parametrov je vlastne lineárnym funkcionálom na lineárnom priestore $H = \{\sum_{i=1}^{m} \Theta_i f_i; (\Theta_1, \ldots, \Theta_m) \in R^m\}$ (porovnajte s (1)!). Toho využijeme na preformuláciu regresného experimentu takto:

Nech X je kompaktný metrický priestor a nech H je lineárny priestor funkcií definovaných a spojitých na X. Každá funkcia $h \in H$ zodpovedá možnému stavu meraného objektu. Nech g je lineárny funkcionál definovaný na H a nech ξ je ľubovoľná borelovská pravdepodobnosť na X. V súhlase s mierou ξ sú rozložené realizované pokusy $x \in X$, ktorých výstup sú nekorelované náhodné veličiny $y(x)$; $(x \in X)$ s jednotkovými disperziami a so strednými hodnotami „v stave h“:

$$E_h[y(x)] = h(x)\,; \quad (x \in X)\,.$$

Vznikajú tieto otázky:

a) Aká je nutná a postačujúca podmienka na to, aby funkcionál g bol odhadnuteľný pri návrhu experimentu ξ?

b) Čomu sa rovná minimálna disperzia odhadu funkcionálu g pri návrhu ξ?

c) Čo možno povedať o návrhu experimentu, ktorý je optimálny pre odhad funkcionálu g?

Metódami funkcionálnej analýzy dostávame tieto výsledky [4]:

Veta

1. Funkcionál g je odhadnuteľný pri návrhu ξ práve vtedy, keď je spojitý na H vzhľadom na normu $\| \ \|_{L^2(\xi)}$ v Hilbertovom priestore $L^2(X, \xi)$.

2. Kvadrát normy funkcionálu g na priestore H s normou $\| \ \|_{L^2(\xi)}$ sa rovná minimálnej disperzii, ktorú môže nadobúdať odhad $\hat{g}$ funkcionálu g pri návrhu ξ:

$$\min_{\hat{g}} E[(\hat{g} - E\hat{g})^2] = \sup_{0 \neq h \in H} [g^2(h)/\|h\|^2_{L^2(\xi)}]$$

3. Funkcionál g je odhadnuteľný aspoň pri jednom návrhu experimentu práve vtedy, keď g je spojitý na H vzhľadom na normu $\|h\|_\infty = \sup_{x \in X} |h(x)|$, t. j. keď

$$\sup_{0 \neq h \in H} |g(h)|/\sup_{x \in X} |h(x)| < \infty$$

4. Podľa Hahn-Banachovej vety z funkcionálnej analýzy [8] funkcionál g možno spojite predĺžiť z H na $C(X)$ = priestor všetkých spojitých funkcií na X tak, že sa zachová jeho norma vzhľadom na normu $\| \ \|_\infty$. Podľa Rieszovej reprezentačnej vety [8] takto predĺžený funkcionál rovná sa integrálu $\int .\,\mathrm{d}\nu$ podľa ohraničenej zovšeobecnenej miery ν.

Označme $\nu = \nu^+ - \nu^-$ Jordanov rozklad miery ν [8].

Platí:

Návrh $\bar{\nu} = (\nu^+ + \nu^-)/(\nu^+(X) + \nu^-(X))$ je optimálny pre odhad funkcionálu g, t. j. platí

$$\min_{\xi} \min_{\hat{g}} E[(\hat{g} - E\hat{g})^2] = \sup_{0 \neq h \in H} [g^2(h)/\|h\|^2_{L^2(\bar{\nu})}] = \sup_{0 \neq h \in H} [g^2(h)/\|h\|^2_\infty]\,.$$

V prípade, že lineárna dimenzia priestoru H je konečná, možno normy funkcionálu g uvedené vo vete nahradiť zodpovedajúcimi normami v R^m (m = dimenzia H). Za tým účelom označme $f_1, \ldots, f_m$ lineárnu bázu v H. Označme ďalej S konvexný obal množiny

$$\{(f_1(x), \ldots, f_m(x)) : x \in X\} \cup \{(-f_1(x), \ldots, -f_m(x)) : x \in X\}$$

v R^m. Nech $\mathbf{g}$ je vektor, ktorý definuje funkcionál g v tom zmysle, že

$$g(\sum_{i=1}^{m} \Theta_i f_i) = \mathbf{g}'\boldsymbol{\Theta} ; \quad \boldsymbol{\Theta} \equiv (\Theta_1, \ldots, \Theta_m)' \in R^m .$$

Potom Minkowského funkcionál vektora $\mathbf{g}$ vzhľadom na množinu S

$$p(\mathbf{g}) \equiv \inf \{\lambda \in R : \mathbf{g} \in \lambda S\}$$

rovná sa minimálnej disperzii odhadu funkcionálu g pri optimálnom návrhu experimentu, t. j. podľa vety:

$$p(\mathbf{g}) = \sup_{0 \neq h \in H} |g(h)| / \|h\|_\infty .$$

Norma v konečnorozmernom Hilbertovom priestore je Minkowského funkcionál vzhľadom na elipsoid. Preto, v súhlase s prvou časťou vety, rôznym návrhom experimentu zodpovedajú rôzne elipsoidy v R^m, alebo v prípade, že nie všetky parametre sú odhadnuteľné, rôzne valce v R^m s elipsoidovou základňou, ktoré obsahujú množinu S. Porovnávanie takýchto elipsoidov a valcov s množinou S umožňuje konštruovať metódy výpočtu optimálnych návrhov experimentu.

5. Záver

Teória navrhovania experimentov vznikla z potrieb reálnych experimentov, ponajprv poľnohospodárskych a biologických, pozdejšie fyzikálnych [9] a technických. Intenzívne sa pestuje v časopisoch typu Biometrika a Technometrics. Ako každá oblasť matematickej štatistiky prešla najprv heuretickým štádiom, aby pozdejšie čerpala z rôznych matematických disciplín a sama bola podnetom pre matematický výskum.

Literatúra

[1] NALIMOV, V. V., GOLIKOVA, T. I.: *Logičeskije osnovanija planirovanija eksperimenta,* Moskva, Metalurgija, (1976), kap. I.

[2] SCHWARZ, Š.: *Matematická príprava poslucháčov pre štúdium automatizácie a počítačov.* Pokroky mat. fyz. a astron. *22* (1977), 61—72.

[3] BRODSKIJ, V. Z.: *Vvedenije v faktornoe planirovanije eksperimenta.* Moskva, Nauka, (1976), kap. VI.

[4] PÁZMAN, A.: *Hilbert space methods in experimental design,* Kybernetika *14*, (1978) 73—84

[5] JOHN, R. C. St., DRAPER, N. R.: *D-optimality of regression design*; a review. Technometrics *17*, (1975), 15—23.

[6] FEDOROV, V. V.: *Teorija optimaľnogo eksperimenta.* Nauka, Moskva 1971, kap. 2.

[7] KIEFER, J., WOLFOWITZ, J.: *Optimum designs in regression problems.* Ann. Math. Stat. *30* (1959), 271—294.

[8] HALMOS, P. R.: *Measure theory.* Van Nostrand, New York, 1950.

[9] FEDOROV, V. V., PÁZMAN, A.: *Design of physical experiments.* Fortschritte der Physik *16*, (1968), 325—355.