UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

HADAMARDOVE MATICE A ICH APLIKÁCIE V OPTIMÁLNOM DIZAJNE

BAKALÁRSKA PRÁCA

2012

Samuel ROSA

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

HADAMARDOVE MATICE A ICH APLIKÁCIE V OPTIMÁLNOM DIZAJNE

BAKALÁRSKA PRÁCA

Študijný program:	Ekonomická a finančná matematika
Študijný odbor:	1114 Aplikovaná matematika
Školiace pracovisko:	Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci práce:	RNDr. Mária Trnovská, PhD.

Bratislava 2012 **Samuel ROSA**

Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

90749835

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta:	Samuel Rosa
Študijný program:	ekonomická a finančná matematika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor:	9.1.9. aplikovaná matematika
Typ záverečnej práce:	bakalárska
Jazyk záverečnej práce:	slovenský

Názov: Hadamardove matice a ich aplikácie v optimálnom dizajne

Cieľ: Podrobné teoretické naštudovanie problematiky a skúmanie využitia v optimálnom dizajne experimentov.

Vedúci: RNDr. Mária Trnovská, PhD.

Dátum zadania: 16.10.2011

Dátum schválenia: 27.10.2011

doc. RNDr. Margaréta Halická, CSc.
garant študijného programu

....

študent vedúci

Poďakovanie Ďakujem svojej vedúcej bakalárskej práce RNDr. Márii Trnovskej, PhD. za rady i pripomienky počas písania tejto práce.

Abstrakt

ROSA, Samuel: Hadamardove matice a ich aplikácie v optimálnom dizajne [Bakalárska práca], Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; vedúci práce: RNDr. Mária Trnovská, PhD., Bratislava, 2012, 81 s.

V tejto bakalárskej práci sa zaoberáme Hadamardovými maticami a ich aplikáciami v optimálnom dizajne experimentov. Venujeme sa teoretickým vlastnostiam Hadamardových matíc a rozoberáme ich základné konštrukcie: Sylvestrovu konštrukciu a Paleyove konštrukcie. Cieľom práce je analyzovať aplikácie Hadamardových matíc v optimálnom dizajne váženia a optimálnom faktorovom dizajne. V práci ponúkame úvod do problematiky dizajnu váženia aj faktorového dizajnu pre čitateľa, ktorý nie je v týchto oblastiach zbehlý. Stručne sa zaoberáme aj témou ortogonálnych polí. Analyzujeme aplikácie Hadamardových matíc pri tvorbe optimálnych dizajnov váženia na chemických a pružinových váhach, keď sú tieto váhy nevychýlené aj keď sú vychýlené. Tiež rozoberáme aplikácie Hadamardových matíc pri konštrukcii optimálnych čiastočných faktorových dizajnov, keď sú všetky faktory na dvoch úrovniach.

Kľúčové slová: Hadamardova matica, Optimálny dizajn, Dizajn váženia, Faktorový dizajn

Abstract

ROSA, Samuel: Hadamard matrices and their applications in optimal design [Bachelor Thesis], Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; Supervisor: RNDr. Mária Trnovská, PhD., Bratislava, 2012, 81 p.

In this bachelor thesis we study Hadamard matrices and their applications in optimal design of experiments. We survey theoretical attributes of Hadamard matrices and analyze some of their basic constructions: Sylvester construction and Paley constructions. The objective of this work is to analyze applications of Hadamard matrices in optimal weighing design and in optimal factorial design. In our work we provide an introduction to weighing design and to factorial design to a reader not familiar with these areas. We also briefly study the topic of orthogonal arrays. We analyze the applications of Hadamard matrices in the construction of optimal chemical balance and spring balance weighing designs, both unbiased and biased. We also study the applications of Hadamard matrices in the construction of optimal fractional factorial designs with all the factors on two levels.

Keywords: Hadamard matrix, Optimal design, Weighing design, Factorial design

Obsah

Zoznam použitých symbolov 8

Úvod 9

1 Hadamardove matice 12

1.1 Základné definície . . . 12

1.2 Nutné podmienky existencie Hadamardovej matice . . . 13

1.3 Determinant Hadamardovej matice . . . 18

2 Konštrukcie Hadamardových matíc 19

2.1 Sylvestrova konštrukcia . . . 19

2.2 Paleyove konštrukcie . . . 21

3 Hadamardove matice a optimálny dizajn váženia 33

3.1 Chemické váhy . . . 33

3.2 Pružinové váhy . . . 35

3.3 Vychýlené váhy . . . 43

4 Hadamardove matice a optimálny faktorový dizajn 47

4.1 Faktorový dizajn . . . 47

4.2 Ortogonálne polia . . . 58

4.3 Čiastočý faktorový dizajn . . . 63

Záver 76

Zoznam použitej literatúry 79

Zoznam použitých symbolov

matica *veľkosti n*	štvorcová $n \times n$ matica
I_n	matica identity veľkosti n
$J_{m\times n}$	$m \times n$ matica so všetkými prvkami rovnými 1
J_n	matica veľkosti n s prvkami rovnými 1
$0_{m\times n}$	$m \times n$ matica so všetkými prvkami rovnými 0
1_n	stĺpcový $n \times 1$ vektor samých 1
0_n	stĺpcový $n \times 1$ vektor samých 0

Úvod

Keď v 19. storočí francúzsky matematik J. Hadamard vo svojej práci [9] riešil problém maximálneho determinantu pre vybranú triedú matíc, zistil, že riešením tejto úlohy sú isté špeciálne matice. Takéto matice sa časom začali označovať Hadamardove. Napriek tomu Hadamard nebol prvý, ktorý sa takýmito maticami zaoberal, vyskytujú sa už v práci J. Sylvestra [24].

Hadamardove matice sú také štvorcové matice, ktorých prvky sú iba 1 alebo -1 a ich stĺpce sú navzájom ortogonálne. Hoci sa vyskytujú už v spomínaných prácach z 19. storočia, až najmä v 20. storočí sa ukázalo aké veľké množstvo aplikácií majú - v teórii dizajnu, ale aj v iných oblastiach matematiky, napríklad v teórii kódovania. Mnohé z aplikácií sú zhrnuté v článku [10]. Spomedzi rôznorodých aplikácií Hadamardových matíc sa v tejto práci budeme zaoberať ich využitím v optimálnom dizajne experimentov.

Pri získavaní údajov z experimentov nie je dôležité len správne spracovanie údajov, ale aj správne prevedenie experimentu. Je prirodzené, že pri spracovaní údajov sú konzultovaní štatistici. Aj skúmanie prevedenia experimentov je však úlohou štatistiky. Touto problematikou sa zaoberá jej disciplína, navrhovanie (dizajn) experimentov.

Už skúmanie jednoduchého problému váženia objektov, nie je také jednoduché, ako sa zdá. Ak chceme zisťovať váhy veľmi ľahkých objektov, je nepresné vážiť ich jednotlivo. Vyvstáva tak otázka, ako tieto objekty vážiť tak, aby bol výsledok čo najpresnejší. To je otázka optimálneho dizajnu váženia (angl. Optimal weighing design). Hadamardove matice sú užitočné pri riešení tohto problému, ako uvádza okrem iných článok [17].

Inou časťou teórie dizajnu, ktorej sa budeme venovať, je faktorový dizajn (angl. Factorial design). Faktorové experimenty sú také, pri ktorých vstupné veličiny, faktory, môžu nadobúdať iba konečnú množinu hodnôt. Pri hľadaní optimálneho faktorového dizajnu, teda pri hľadaní čo najvhodnejších sád meraní pre faktorové experimenty, je možné použiť Hadamardove matice (viď [8]).

Zároveň so spoznávaním aplikácií, sa rozvíja teoretický výskum Hadamardových matíc. Dôležitou otázkou tohto výskumu, je otázka existencie Hadamardových matíc rôznych veľkostí. Známa domnienka o existencii Hadamardovej matice každej vyhovujúcej veľkosti (tzv. Hadamardova domnienka), doteraz stále nebola potvrdená ani vyvrátená. Preto má veľký význam konštrukcia Hadamardových matíc konkrétnych veľkostí.

Prirodzene teda v súčasnosti prebieha výskum týchto matíc dvoma smermi. Jednak sú to ich teoretické vlastnosti a konštrukcie Hadamardových matíc pre čoraz viac veľkostí, napríklad v prácach [12], [20]. Na druhej strane sa ďalej skúmajú ich rozmanité aplikácie (napríklad publikácie [1], [22], [11]), či už v štatistike, alebo aj v iných oblastiach matematiky.

Cieľom tejto bakalárskej práce bolo prezentovať základné teoretické vlastnosti Hadamardových matíc a niektoré známe konštrukcie Hadamardových matíc. Následne rozobrať ich aplikácie v optimálnom dizajne experimentov, konkrétne v dizajne váženia a vo faktorovom dizajne. Pričom sme chceli témy spracovať v jasnej a podrobnej forme, aj s dôkazmi vyslovených tvrdení. Problematiku sme sa snažili spracovať matematicky exaktne, ale zároveň tak, aby bola prístupná aj čitateľovi, ktorý nie je odborníkom v danej oblasti.

V súlade s cieľmi práce sme rozdelili našu prácu na dve časti. Prvú, teoretickú, časť sme rozdelili na dve kapitoly. V prvej kapitole uvedieme základné poznatky o Hadamardových maticiach, pričom čerpať budeme najmä z [10] a [27]. V druhej kapitole sa budeme zaoberať niektorými základnými konštrukciami Hadamardových matíc uvedenými v článku [10]. Na rozdiel od spomínaného článku, konštrukcie podrobne rozoberieme a čerpajúc z iných publikácií (napr. [1], [11]) aj odprezentujeme ich dôkazy.

V druhej časti sa budeme venovať aplikáciam Hadamardových matíc v optimálnom dizajne. Aj táto časť sa skladá z dvoch kapitol. V tretej kapitole našej práce sa budeme zaoberať dizajnom váženia a uvedieme aplikácie Hadamardových matíc v optimálnom dizajne váženia, čerpajúc hlavne z článku [17]. V poslednej kapitole oboznámime čitateľa s problematikou faktorového dizajnu a problematikou ortogonálnych polí. Následne uvedieme aplikácie Hadamardových matíc pri konštrukcii optimálnych čiastočných faktorových dizajnov, najmä podľa prác [11], [8].

V práci sme postupovali hlavne podľa článku [10], no v spomínanom článku sú len základné tvrdenia, bez dôkladnejšieho uvedenia do problematiky a takmer bez dôkazov týchto tvrdení. Na druhej strane, v iných vyššie spomenutých publikáciach je daná téma podrobne rozobraná, ale častokrát len s čiastkovou informáciou z pohľadu problematiky Hadamardových matíc. Na jej pochopenie ja navyše zvyčajne potrebné naštudovanie iných pasáží z danej publikácie. Preto za hlavný prínos práce pokladáme to, že na jednom mieste zhŕňa niektoré teoretické poznatky a aplikácie Hadamardových matíc, ktoré sú zároveň dôkladne rozobrané a v pre čitateľa zrozumiteľnej forme.

1 Hadamardove matice

1.1 Základné definície

V prvej kapitole budeme čerpať najmä z článku [10] zhŕňajúcom poznatky o Hadamardových maticiach. Preto všetky definície v tejto podkapitole sú na základe spomínaného článku.

Definícia 1.1. *Štvorcová $n \times n$ matica H sa nazýva* Hadamardova matica*, ak každý jej prvok je 1 alebo -1 a ak platí $HH^T = nI$.*

Poznamenajme, že podmienka $HH^T = nI$ je ekvivalentná s podmienkou $H^T H = nI$. Teda H je Hadamardova matica práve vtedy keď H^T je Hadamardova matica.

Zároveň podmienka $HH^T = nI$ znamená, že riadky matice H sú navzájom ortogonálne, podobne $H^T H = nI$ značí, že stĺpce matice H sú navzájom ortogonálne. Hadamardova matica je teda taká matica s prvkami z množiny $\{1, -1\}$, ktorej riadky, resp. stĺpce sú navzájom ortogonálne.

Príklad 1.2.

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

sú Hadamardove matice, keďže platí

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}.$$

Definícia 1.3. *Štvorcovú maticu P nazývame* znamienková permutačná matica *ak jej prvky sú 1, -1 alebo 0 a každý stĺpec a každý riadok matice P obsahuje práve jeden nenulový prvok.*

Teda znamienková permutačná matica vznikne z permutačnej matice prenásobením niektorých jej riadkov $\cdot(-1)$. Je zjavné, že stĺpce znamienkovej permutačnej matice sú ortonormálne a teda taká matica P je ortogonálna. Čiže platí $PP^T = I$, resp. $P^T P = I$.

Definícia 1.4. *Hadamardove matice H_1, H_2 nazývame* ekvivalentné*, ak existujú znamienkové permutačné matice P_1, P_2 také, že $P_1 H_1 = H_2 P_2$.*

Definícia 1.5. *Hadamardova matica sa nazýva* normalizovaná*, ak v jej prvom riadku aj prvom stĺpci sú všetky prvky 1,* seminormalizovaná *ak v jej prvom stĺpci sú všetky prvky 1.*

1.2 Nutné podmienky existencie Hadamardovej matice

Veta 1.6. *Nech H je Hadamardova $n \times n$ matica a P je znamienková permutačná $n \times n$ matica. Potom matice HP a PH sú Hadamardove.*

Dôkaz. Označme h_{ij} prvky matice H. Ďalej označme $X := HP$ a jej prvky x_{ij}. Potom $x_{ij} = 1 \cdot h_{kl}$ alebo $x_{ij} = -1 \cdot h_{kl}$ pre nejaké k,l z množiny $\{1, \ldots, n\}$. Teda x_{ij} je z množiny $\{-1, 1\}$. Podobne ak označíme y_{ij} prvok matice PH, tak $y_{ij} = \pm h_{kl}$ pre nejaké k,l z množiny $\{1, \ldots, n\}$. Navyše

$$(HP)(HP)^T = HPP^T H^T = HH^T = nI,$$

$$(PH)(PH)^T = PHH^T P^T = PnP^T = nPP^T = nI.$$

Takže matice HP a PH sú Hadamardove. □

Veta 1.7. *Nech $n > 2$. Ak $n \times n$ matica H je Hadamardova, tak n je deliteľné* 4.

[27] uvádza dokonca dva rôzne dôkazy tejto vety.

Dôkaz 1. Nech $n > 2$ a $H = (h_{ij})$ je Hadamardova matica veľkosti n. Keďže $HH^T = nI$, dostávame pre prvok i, j

$$\sum_{k=1}^{n} h_{ik} h_{jk} = \begin{cases} 0, & \text{ak } i \neq j, \\ n, & \text{ak } i = j. \end{cases}$$

Vďaka tomu môžeme vypočítať sumu

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n}(h_{1k}+h_{2k})(h_{1k}+h_{3k}) &= \sum_{k=1}^{n} h_{1k}^2 + \sum_{k=1}^{n} h_{1k}h_{2k} + \sum_{k=1}^{n} h_{1k}h_{3k} + \sum_{k=1}^{n} h_{2k}h_{3k} \\ &= \sum_{k=1}^{n} h_{1k}^2 + 0 + 0 + 0 = n.\end{aligned}$$

Pre každé $1 \leq k \leq n$ platí, že $h_{1k} + h_{2k}$ a $h_{1k} + h_{3k}$ nadobúdajú hodnoty 2, 0, alebo -2, keďže sú to súčty 1 a -1. To znamená, že každý sčítanec sumy

$$\sum_{k=1}^{n}(h_{1k}+h_{2k})(h_{1k}+h_{3k})$$

musí byť 4, 0, alebo -4, čiže je deliteľný 4. Teda celá suma je deliteľná 4 a keďže sa zároveň rovná n, tak n musí byť deliteľné 4. □

Dôkaz 2. Nech $H = (\tilde{h}_{ij})$, nech P je diagonálna matica veľkosti n s prvkami na diagonále 1 alebo -1, taká, že HP má prvý riadok zložený zo samých 1, čiže

$$P = \begin{bmatrix} \tilde{h}_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \tilde{h}_{1,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{h}_{1,n} \end{bmatrix}.$$

Keďže P je špeciálny prípad znamienkovej permutačnej matice, tak HP je podľa Vety 1.6 Hadamardova matica veľkosti n. Môžeme teda pracovať s maticou HP, označme jej prvky h_{ij} a jej riadky h_i. Musí platiť, že 2. a 3. riadok matice HP sú kolmé na jej prvý riadok a teda $h_2^T h_1 = h_3^T h_1 = 0$. Keď označíme k počet 1 v 2. riadku, tak to znamená

$$\begin{aligned} 0 = h_2^T h_1 &= \sum_{i=1}^{n} h_{2i} \cdot 1 \\ &= \sum_{i;h_{2i}=1} 1 + \sum_{i;h_{2i}=-1} (-1) \\ &= k + (n-k)(-1) \\ &= 2k - n \end{aligned}$$

a teda $k = \frac{n}{2}$, čiže 2. riadok musí mať presne $\frac{n}{2}$ 1 a $\frac{n}{2}$ -1. Analogicky platí, že aj 3. riadok musí obsahovať presne $\frac{n}{2}$ 1 a $\frac{n}{2}$ -1. Teda n musí byť párne. Označme $r := \frac{n}{2}$ a nech n_-^+ je počet stĺpcov HP, ktoré obsahujú v 2. riadku 1 a v 3. riadku -1. Podobne označme n_+^- (počet stĺpcov HP, ktoré obsahujú v 2. riadku -1 a v 3. riadku 1), n_+^+ a n_-^-.

Počet 1 v 2. riadku je to isté ako počet stĺpcov, ktoré obsahujú 1 v 2. riadku. Tie môžu v treťom riadku obsahovať 1 alebo -1 a teda

$$r = n_-^+ + n_+^+. \tag{1.1}$$

Podobne platí

$$r = n_+^- + n_-^-, \tag{1.2}$$

$$r = n_+^+ + n_+^-, \tag{1.3}$$

$$r = n_-^+ + n_-^-. \tag{1.4}$$

Odčítaním (1.1) – (1.4), (1.2) – (1.4) dostaneme

$$n_+^+ = n_-^-, \tag{1.5}$$

$$n_+^- = n_-^+. \tag{1.6}$$

Keďže 2. a 3. riadok musia byť tiež navzájom ortogonálne, platí

$$0 = h_2^T h_3 = \sum_{k=1}^{n} h_{2k} h_{3k}.$$

Táto suma sa dá rozdeliť na štyri sumy, podľa toho aká kombinácia čísel je na k-tom mieste v 2. a 3. riadku:

$$\sum_{k=1}^{n} h_{2k} h_{3k} = \sum_{\substack{h_{2k}=1 \\ h_{3k}=1}} 1 \cdot 1 + \sum_{\substack{h_{2k}=1 \\ h_{3k}=-1}} 1 \cdot (-1) + \sum_{\substack{h_{2k}=-1 \\ h_{3k}=1}} (-1) \cdot 1 + \sum_{\substack{h_{2k}=-1 \\ h_{3k}=-1}} (-1) \cdot (-1).$$

Množina $\{k; h_{2k} = 1, h_{3k} = 1\}$ predstavuje počet stĺpcov HP, ktoré obsahujú v 2. riadku 1 aj v 3. riadku 1, čiže n_+^+. Analogicky pre n_-^+, n_+^-, n_-^-. Musí teda platiť

$$0 = n_+^+ - n_-^+ - n_+^- + n_-^-,$$

a teda

$$n_+^+ + n_-^- = n_-^+ + n_+^-.$$

Využijúc (1.5) a (1.6) dostávame

$$2n_+^+ = 2n_-^+, \text{ čiže } n_+^+ = n_-^+.$$

Dosadením do (1.1) dostávame $r = 2n_+^+$ a teda $n = 2r = 4n_+^+$. Keďže n_+^+ je prirodzené číslo, tak n je deliteľné 4. □

Je obsahom *Hadamardovej domnienky*, že pre každé n, ktoré je deliteľné 4, existuje Hadamardova matica veľkosti n. Táto domnienka dodnes nebola potvrdená ani vyvrátená. (viď napríklad [10], [20])

Tvrdenie 1.8. *Nech H je Hadamardova matica veľkosti n, ktorá má prvý riadok zložený zo samých 1, označme jej dva rôzne riadky $u = (u_1, u_2, \ldots, u_n)$, $v = (v_1, v_2, \ldots, v_n)$, kde u ani v nie sú prvý riadok. Potom*

(i) u obsahuje presne $n/2$ 1 a $n/2$ -1,

(ii) je $n/4$ indexov i spĺňajúcich $u_i = 1, v_i = 1$, $n/4$ spĺňajúcich $u_i = 1, v_i = -1$, $n/4$ spĺňajúcich $u_i = -1, v_i = 1$ a $n/4$ spĺňajúcich $u_i = -1, v_i = -1$,

(iii) analogické tvrdenia platia pre stĺpce H ak má jednotkový prvý stĺpec

Dôkaz. Keďže H má jednotkový prvý riadok, platia pre ňu argumenty druhého dôkazu Vety 1.7.

V druhom dôkaze Vety 1.7 sme pre Hadamardovu maticu s jednotkovým prvým riadkom dokázali, že (i) platí pre 2. riadok. Analogický dôkaz je pre ľubovoľný riadok u, okrem prvého.

Časť (ii) sme v spomínanom dôkaze dokázali pre 2. a 3. riadok. Rovnaká úvaha ako v dôkaze Vety 1.7 platí pre ľubovoľné dva riadky u, v okrem prvého riadku.

Časť (iii) vyplýva z toho, že H je Hadamardova matica práve vtedy keď H^T je Hadamardova matica. Ak Hadamardova matica H má jednotkový prvý stĺpec, tak H^T má jednotkový prvý riadok a pre jej riadky platí (i), (ii), čo sú zároveň stĺpce H. Čiže aj pre stĺpce H platia tvrdenia analogické k (i), (ii). □

[27] uvádza zaujímavú podmienku pre existenciu špeciálnej Hadamardovej matice.

Veta 1.9. *Ak H je Hadamardova matica veľkosti m, ktorá obsahuje J_n ako podmaticu, tak $m \geq n^2$.*

Dôkaz (podľa [27]). Môžeme predpokladať, že matica H je v tvare

$$H = \begin{pmatrix} J_n & X \\ Y & Z \end{pmatrix}, \tag{1.7}$$

kde Z je štvorcová $s \times s$ matica s prvkami ± 1 a $m = n + s$. Keby H nebola v takom tvare, môžeme ju permutovať, podobne ako v dôkaze Vety 1.7, na $P_1 H P_2$, ktorá v tvare (1.7) bude. Táto matica by bola tiež Hadamardova, veľkosti m a stačilo by vetu dokázať pre ňu.
Keďže H je Hadamardova, platí

$$HH^T = (n+s)I_m.$$

Zároveň, po blokovom roznásobení

$$HH^T = \begin{pmatrix} J_n & X \\ Y & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n^T & Y^T \\ X^T & Z^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_n^2 + XX^T & . \\ . & . \end{pmatrix},$$

keďže $J_n^T = J_n$.
Porovnaním týchto dvoch zápisov dostávame $J_n^2 + XX^T = (n+s)I_n$. Keďže $J_n^2 = nJ_n$, tak platí

$$XX^T = (n+s)I_n - nJ_n \tag{1.8}$$

Matica nJ_n má zjavne $(n-1)$-násobnú vlastnú hodnotu 0. Okrem nej je jej vlastná hodnota ešte n^2, keďže matica $nJ_n - n^2 I_n$ je singulárna. Dá sa to overiť napríklad pripočítaním 1. až $(n-1)$. riadku matice $nJ_n - n^2 I_n$ k jej poslednému riadku. Vznikne tak na každom mieste v n-tom riadku $n + (n-1)n - n^2 = n^2 - n^2 = 0$.
Pre vlastné hodnoty matice na pravej strane rovnice (1.8) platí: ak λ je vlastná hodnota nJ_n, čiže $\det(nJ_n - \lambda I_n) = 0$, tak $\mu = n + s - \lambda$ je vlastná hodnota $(n+s)I_n - nJ_n$, keďže

$$\det((n+s)I_n - J_n - \mu I_n) = \det(\lambda I_n - J_n) = 0.$$

Teda vlastné hodnoty $(n+s)I_n - nJ_n$ sú

$$n + s - n^2, \quad n + s, \quad \ldots, \quad n + s.$$

Keďže matica na ľavej strane rovnosti (1.8), XX^T, je kladne semidefinitná a teda má nezáporné vlastné hodnoty, tak to platí aj pre maticu na pravej strane (1.8). Teda $n + s - n^2 \geq 0$ a keďže $n + s = m$, tak $m \geq n^2$. $\square$

1.3 Determinant Hadamardovej matice

Francúzsky matematik Jacques Hadamard dokázal v [9], že Hadamardove matice majú najväčší determinant spomedzi štvorcových matíc danej veľkosti s prvkami $-1, 1$. V tejto podkapitole uvedieme dôkaz tohto tvrdenia.

Na počesť tohto zisteniu a ďalšieho výskumu Hadamardových matíc, ktorému sa Hadamard venoval (napr. v minulej podkapitole spomínaná Hadamardova domnienka), sa takéto matice nazývajú *Hadamardove matice.*

Veta 1.10. *Nech $X = (x_{ij})$ je $n \times n$ matica, pre ktorej prvky platí $|x_{ij}| \leq 1$ pre každé i, j. Potom $|\det(X)| \leq n^{n/2}$. Rovnosť nastáva práve vtedy, keď X je Hadamardva matica.*

Dôkaz (podľa [4]). Označme $x_1, \ldots x_n$ riadky matice X. Potom geometrický význam determinantu je: $|\det(X)|$ je objem rovnobežnostena so stranami $x_1, \ldots, x_n$ v euklidovskej norme. Takže

$$|\det(X)| \leq |x_1| \cdot |x_2| \cdot \ldots \cdot |x_n|, \tag{1.9}$$

kde $|x_i|$ je euklidovská dĺžka x_i. Pritom rovnosť nastáva práve vtedy, keď $x_1, \ldots x_n$ sú navzájom kolmé alebo niektoré x_i je nulový riadok.
Keďže $|x_{ij}| \leq 1$ pre každé i, j, tak

$$|x_i| = (x_{i1}^2 + \cdots + x_{in}^2)^{1/2} \leq n^{1/2} \quad \forall i, \tag{1.10}$$

pričom rovnosť nastáva práve vtedy, keď $|x_{ij}| = 1$ pre každé j. Rovnosť nastáva pre každý riadok, ak $x_{ij} = \pm 1$ pre každé i, j.
Potom zjavne žiaden riadok matice X nie je nulový. Takže rovnosť nastáva v (1.9) aj v (1.10) pre každé x_i práve vtedy, keď sú riadky navzájom kolmé a každý prvok matice X je 1 alebo -1.
Teda

$$|\det(X)| \leq n^{1/2} \cdot \ldots \cdot n^{1/2} = n^{n/2},$$

pričom rovnosť nastáva práve vtedy keď sú riadky navzájom kolmé a každý prvok matice X je 1 alebo -1, čiže práve vtedy keď X je Hadamardova matica. □

Dôsledok 1.11. *Determinant Hadamardovej matice veľkosti n je $n^{n/2}$.*

2 Konštrukcie Hadamardových matíc

Keďže Hadamardove matice nie sú definované konštrukčne a vieme len nutnú podmienku na ich existenciu, je významným výskumným problémov konštrukcia Hadamardových matíc pre čo najviac veľkostí. V tejto kapitole uvedieme a dokážeme niektoré z najznámejších konštrukcií uvedených v [10]. Pre oboznámenie sa s ďalšími spôsobami konštrukcií odporúčame čitateľovi článok [20].

Mnohé Hadamardove matice sú dostupné na internete v knižnici Hadamardových matíc [21].

2.1 Sylvestrova konštrukcia

Zrejme najjednoduchšou konštrukciou je *Sylvestrova konštrukcia*, na základe *Kroneckerovho súčinu*, ktorou získame Hadamardove matice pre veľkosti, ktoré sú mocninou 2. Pojem Kroneckerovho súčinu bude užitočný aj neskôr pri skúmaní optimálneho faktorového dizajnu v kapitole 4.

Definícia 2.1. *Nech $A = (a_{ij})$ je $m \times n$ matica a $B = (b_{ij})$ je $p \times q$ matica. Potom* Kroneckerovým súčinom *matíc A a B nazývame $mp \times nq$ maticu vytvorenú nahradením každého prvku a_{ij} matice A maticou $a_{ij}B$. Kroneckerov súčin značíme $A \otimes B$.*

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

Veta 2.2. *Ak H_1 je Hadamardova matica veľkosti m a H_2 je Hadamardova matica veľkosti n, potom $H_1 \otimes H_2$ je Hadamardova matica veľkosti mn.*

Dôkaz. Označme $X := H_1 \otimes H_2$. Ďalej označme prvky H_1 h_{ij} a bloky matice X $Y_{ij} = h_{ij}H_2$, $1 \leq i, j \leq m$. Potom blok i, j matice XX^T je

$$\sum_{k=1}^{m} Y_{ik}Y_{kj}^T = \sum_{k=1}^{m} h_{ik}H_2h_{jk}H_2^T = \sum_{k=1}^{m} h_{ik}h_{jk}H_2H_2^T = \sum_{k=1}^{m} h_{ik}h_{jk}nI_n,$$

pričom

$$\sum_{k=1}^{n} h_{ik}h_{jk}nI_n = \begin{cases} 0 \cdot nI_n, & \text{ak } i \neq j, \\ m \cdot nI_n, & \text{ak } i = j; \end{cases}$$

a teda

$$XX^T = \begin{bmatrix} mnI_n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & mnI_n & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & mnI_n \end{bmatrix} = mnI_{mn}.$$

Každý prvok X je 1 alebo -1, keďže je to súčin jedného prvku matice H_1 s jedným prvkom matice H_2 a tie sú ± 1. Teda X je Hadamardova matica veľkosti mn. □

Dôsledok 2.3. *Ak H je Hadamardova matica veľkosti n, potom matica*

$$\begin{bmatrix} H & H \\ H & -H \end{bmatrix}$$

je Hadamardova matica veľkosti $2n$.

Dôkaz. Nech H je Hadamardova matica.

Matica

$$H_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

je podľa Príkladu 1.2 z kapitoly 1 Hadamardova a teda matica

$$H_1 \otimes H = \begin{bmatrix} H & H \\ H & -H \end{bmatrix}$$

je Hadamardova. □

Dôsledok 2.4. *Pre každé prirodzené číslo k existuje Hadamardova matica veľkosti 2^k.*

Dôkaz. Opakovaným $k-$násobným použitím Dôsledku 2.3 dostávame

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix},$$

potom H je Hadamardova $2^k \times 2^k$ matica. □

Takáto $2^k \times 2^k$ Hadamardova matica sa nazýva *Sylvestrova matica* a koštrukcia Sylvestrových matíc sa nazýva *Sylvestrova konštrukcia* ([1], [12]).

Konštrukcia nových Hadamarodvých matíc z už známych, použitím Kroneckerovho súčinu, sa nazýva *súčinová konštrukcia* [22], alebo *konštrukcia Kroneckerovým súčinom* [1].

Príklad 2.5. *Hadamardova matica veľkosti* 4 *sa dá zostrojiť nasledovne*

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

2.2 Paleyove konštrukcie

Nasledovné konštrukcie Hadamardových matice využívajú algebraické znalosti o konečných poliach. Nazývajú sa *Paleyove konštrukcie* ([1], [20]), podľa anglického matematika R. Paleya, ktorý ich vo svojom článku [19] ako prvý uviedol. Konečné polia nazývame aj Galoisove polia, na počesť francúzskeho matematika E. Galoisa. V apendixe knihy [11] je stručne zhrnutá problematika Galoisových polí. Uvedieme ich základné vlastnosti, čerpajúc z [11]. Táto problematika je dôkladnejšie spracovaná v [16].

Pod *Galoisovým poľom (Galois Field)* alebo tiež *konečným poľom* rozumieme trojicu $(GF(q), +, *)$, kde $GF(q)$ je konečná q-prvková množina a $(+, *)$ sú binárne operácie, pričom platia nasledujúce vlastnosti:

1. $a + b = b + a$ pre každé $a, b \in GF(q)$;
2. $(a + b) + c = a + (b + c)$ pre každé $a, b, c \in GF(q)$;
3. existuje práve jeden prvok $0 \in GF(q)$ taký, že $a + 0 = a$ pre každé $a \in GF(q)$;
4. pre každé $a \in GF(q)$ existuje práve jeden prvok $-a \in GF(q)$ taký, že $a + (-a) = 0$;
5. $a * b = b * a$ pre každé $a, b \in GF(q)$;
6. $(a * b) * c = a * (b * c)$ pre každé $a, b, c \in GF(q)$;
7. existuje práve jeden prvok $1 \in GF(q)$ taký, že $a * 1 = a$ pre každé $a \in GF(q)$;
8. pre každé $a \in GF(q)$, $a \neq 0$ existuje práve jeden prvok $a^{-1} \in GF(q)$ taký, že $a * a^{-1} = 0$;
9. $a * (b + c) = a * b + a * c$ pre každé $a, b, c \in GF(q)$.

Galoisove pole sa bežne označuje skrátene $GF(q)$. Takéto pole je teda konečná množina, na ktorej je dobre definované sčítanie, násobenie, odčítanie aj delenie. Je známe, že Galoisove pole veľkosti q existuje iba ak q je mocninou prvočísla. Vlastnosti 1 až 4 značia, že $(GF(q), +)$ je grupa a podobne vlastnosti 5 až 8 znamenajú, že $(GF(q)\backslash\{0\}, *)$ je grupa. Nás bude obzvlášť zaujímať multiplikatívna grupa $(GF(q)\backslash\{0\}, *)$ a budeme ju značiť $GF(q)^*$.

Jednoduchým príkladom Galoisovho poľa je množina zvyškových tried po delení prvočíslom:
ak q je prvočíslo, teda $q = p$, tak množina zvyškových tried modulo p s operáciami sčítania a násobenia modulo p tvoria Galoisove pole $GF(p)$.

[5] uvádza pomerne jednoduchý spôsob konštrukcie Galoisových polí pre $q = p^\alpha$. Označme F_0 množinu zvyškových tried po delení p (ktorá je poľom $GF(p)$). Nech $f(x)$ je neredukovateľný polynóm stupňa α nad F_0 v tvare

$$f(x) = x^\alpha + c_{\alpha-1}x^{\alpha-1} + \ldots + c_1 x + c_0.$$

Neredukovateľnosť značí, že polynóm nemôže byť nad poľom F_0 vyjadrený ako súčin netriviálnych polynómov nižšieho stupňa. Navyše nech koeficienty c_i sú z F_0. Označme a koreň $f(x)$, čiže $f(a) = 0$ nad poľom F_0. Potom prvky poľa $GF(p^\alpha)$ sú výrazy v tvare

$$y_0 + y_1 a + y_2 a^2 + \ldots + y_{\alpha-1} a^{\alpha-1},$$

kde y_i sú prvky z F_0. Pričom sčítanie a násobenie je modulo p

Príklad 2.6. *Skonštruujeme Galoisove pole veľkosti* 9*. Keďže* $9 = 3^2$*, tak* $F_0 = \{0, 1, 2\}$*. Potrebujeme neredukovateľný polynóm stupňa* 2*, taký je napríklad* $f(x) = x^2 + 1$*. Nech* a *je koreň* $f(x)$*, čiže*

$$a^2 + 1 \equiv 0 (\operatorname{mod} 3),$$

teda

$$a^2 \equiv 2 (\operatorname{mod} 3).$$

Potom prvky poľa $GF(9)$ *sú* 0, 1, 2, a, $1 + a$, $2 + a$, $2a$, $1 + 2a$, $2 + 2a$.
Príklad sčítania: $1 + (2 + a) = 3 + a = a$,
príklad násobenia: $(1 + a)2a = 2a + 2a^2 = 2a + 4 = 2a + 1$.

Pred uvedením Paleyových konštrukcií potrebujeme najprv zaviesť niektoré nové pojmy a dokázať niekoľko pomocných tvrdení.

Definícia 2.7. *Prvok $x \in GF(q)$ nazývame* štvorec *ak existuje $y \in GF(q)$ také, že $x = y^2$.*

Prvok $x \in GF(q)$ nazývame kvadratické rezíduum *ak je nenulovým štvorcom.*

Lema 2.8. *Ak $q = p^\alpha$, kde p je nepárne prvočíslo, potom*

(i) pre ľubovoľný prvok $a \in GF(q)^*$ platí

$$a^{\frac{q-1}{2}} = 1 \text{ práve vtedy keď } a \text{ je kvadratické rezíduum,}$$

$$a^{\frac{q-1}{2}} = -1 \text{ práve vtedy keď } a \text{ nie je kvadratické rezíduum.}$$

(ii) presne polovica nenulových prvkov $GF(q)$ sú kvadratické rezíduá.

Dôkaz. Dôkaz v [25]. □

Dôsledok 2.9. *-1 je kvadratické rezíduum práve vtedy keď $q \equiv 1(mod\ 4)$ a nie je kvadratické rezíduum práve vtedy keď $q \equiv 3(mod\ 4)$.*

Dôkaz. V (i) Lemy 2.8 položíme $a = -1$ a dostávame

$$\text{-1 je kvadratické rezíduum práve vtedy keď } (-1)^{\frac{q-1}{2}} = 1,$$

$$\text{-1 nie je kvadratické rezíduum práve vtedy keď } (-1)^{\frac{q-1}{2}} = -1.$$

Teda -1 je kvadratické rezíduum práve vtedy, keď $\frac{q-1}{2}$ je párne. Takže musí platiť

$$\frac{q-1}{2} \equiv 0 (\text{mod } 2);$$

$$q - 1 \equiv 0 (\text{mod } 4);$$

$$q \equiv 1 (\text{mod } 4).$$

Podobne -1 nie je kvadratické rezíduum práve vtedy keď $\frac{q-1}{2}$ je nepárne, čiže keď $q \equiv 3(\text{mod } 4)$. □

Definícia 2.10. *Nech q je mocnina nepárneho prvočísla. Potom zobrazenie χ nazývame* Legendreov symbol *(*kvadratický charakter*) (angl.* Legendre symbol [1]; quadratic character [12], [10]*) ak platí:*

$$\chi : GF(q) \to \{0, 1, -1\},$$

kde $\chi(0) = 0$ a pre nenulové x

$$\chi(x) \begin{cases} 1 & \textit{ak } x \textit{ je kvadratické rezíduum,} \\ -1 & \textit{ak } x \textit{ nie je kvadratické rezíduum.} \end{cases}$$

Lema 2.11. *Pre každé $x, y \in GF(q)$ platí*

$$\chi(xy) = \chi(x)\chi(y).$$

Dôkaz. Keď aspoň jedno z x, y je nulové, tak aj $xy = 0$, čiže platí

$$0 = \chi(x)\chi(y) = \chi(xy).$$

Nech $x, y \neq 0$, potom aj $xy \neq 0$. Platí rovnosť

$$x^{\frac{q-1}{2}} y^{\frac{q-1}{2}} = (xy)^{\frac{q-1}{2}}.$$

Potom využijeme (i) z Lemy 2.8 a dostávame:

(i) Nech x, y sú kvadratické rezíduá, teda

$$x^{\frac{q-1}{2}} = 1,\ y^{\frac{q-1}{2}} = 1,$$

tak aj

$$(xy)^{\frac{q-1}{2}} = 1$$

a teda aj xy je kvadratické rezíduum. V zápise pomocou Legendreovho symbolu: keď $\chi(x) = \chi(y) = 1$, tak $\chi(xy) = 1$.

(ii) Nech jedno z x, y je kvadratické rezíduum a druhé nie. Nech je kvadratické rezíduum bez ujmy na všeobecnosti x. Potom

$$x^{\frac{q-1}{2}} = 1,\ y^{\frac{q-1}{2}} = -1$$

a teda

$$(xy)^{\frac{q-1}{2}} = -1,$$

čiže xy nie je kvadratické rezíduum. Takže platí: keď jedno z $\chi(x),\ \chi(y)$ je 1 a druhé -1, tak $\chi(xy) = -1$.

(iii) Nech nie je x ani y kvadratické rezíduum. Takže

$$x^{\frac{q-1}{2}} = -1,\ y^{\frac{q-1}{2}} = -1,$$

a potom

$$(xy)^{\frac{q-1}{2}} = 1,$$

čiže xy je kvadratické rezíduum. Teda platí: keď $\chi(x) = \chi(y) = -1$, tak $\chi(xy) = 1$.

Takto sme pre všetky kombinácie $\chi(x), \chi(y)$ dokázali požadovanú rovnosť. □

Definícia 2.12 (podľa [1]). *Štvorcovú $q \times q$ maticu $Q = (q_{xy})$ nazývame* Jacobsthalova matica *ak, použijúc prvky $GF(q)$ na označenie jej stĺpcov a riadkov, platí pre každé x, y*

$$q_{xy} = \chi(y - x).$$

Lema 2.13. *Pre Jacobsthalovu maticu Q platí*

(i) $q_{xx} = 0$ pre každé x a $q_{xy} = \pm 1$ pre $x \neq y$;

(ii) Jacobsthalova matica je symetrická práve vtedy keď $q \equiv 1 (mod\ 4)$ a antisymetrická práve vtedy keď $q \equiv 3 (mod\ 4)$;

(iii) ak sú prvky $GF(q)$ v prirodzenom poradí, t. j. $0, 1, 2, \ldots, q-1$, tak $q_{x+1,y+1} = q_{x,y}$

Dôkaz. (i) Pre každé x platí $q_{xx} = \chi(x - x) = \chi(0) = 0$ a pre x, y $q_{xy} = \chi(x - y) = \pm 1$ ak $x \neq y$.
(ii) Pre každé x, y platí

$$\begin{aligned} q_{xy} &= \chi(x - y) = \chi(-1)(y - x) \\ &= \chi(-1)\chi(y - x) = \chi(-1)q_{yx}, \end{aligned}$$

pričom $\chi(-1)(y - x) = \chi(-1)\chi(y - x)$ platí podľa Lemy 2.11.

Teda Q je symetrická ak -1 je kvadratické rezíduum a antisymetrická ak -1 nie je kvadratické rezíduum. Takže Q je podľa Dôsledku 2.9 symetrická práve vtedy keď $q \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$ a antisymetrická práve vtedy keď $q \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$.
(iii) Ak sú prvky $GF(q)$ v prirodzenom poradí, potom

$$\begin{aligned} q_{x+1,y+1} &= \chi((y+1)-(x+1)) = \chi(y-x) \\ &= q_{xy}. \end{aligned}$$

□

Lema 2.14. *Nech χ je Legendreov symbol na $GF(q)$ a c je nenulový prvok $GF(q)$, potom*

$$(i) \qquad \sum_{z \in GF(q)} \chi(z) = 0,$$

$$(ii) \qquad \sum_{b \in GF(q)} \chi(b)\chi(b+c) = -1.$$

Dôkaz (podľa [1]). Podľa (ii) Lemy 2.8 platí, že presne polovica nenulových prvkov $GF(q)$ sú kvadratické rezíduá. Každé kvadratické rezíduum prispieva do sumy $\sum_{z \in GF(q)} \chi(z)$ hodnotou $\chi(z) = 1$. Polovica nenulových prvkov nie sú kvadratické rezíduá a každé z nich prispieva do tejto sumy hodnotou $\chi(z) = -1$. Teda

$$\sum_{z \in GF(q)} \chi(z) = \chi(0) + \frac{q-1}{2} - \frac{q-1}{2} = 0$$

a tým je dokázaná časť (i).

Nech $c \in GF(q),\ c \neq 0$. Keďže $\chi(0) = 0$, tak môžeme $b = 0$ zo sumy vypustiť. Pre $b \neq 0$ môžeme substituovať $b + c = bz_b$ pre $z_b \neq 1$. Dostávame

$$\sum_{b \in GF(q)} \chi(b)\chi(b+c) = \sum_{b \neq 0} \chi(b)\chi(b+c) = \sum_{b \in GF(q)} \chi(b)\chi(bz_b).$$

To je, použitím Lemy 2.11,

$$\sum_{b \in GF(q)} (\chi(b))^2 \chi(z_b) = \sum_{z_b \neq 1} \chi(z_b),$$

keďže pre nenulové b nadobúda $\chi(b)$ hodnoty 1, -1 a teda $(\chi(b))^2 = 1$ pre každé $b \neq 0$.

Využitím (i) dostávame

$$\begin{aligned}\sum_{z_b \neq 1} \chi(z_b) &= \sum_{z_b \in GF(q)} \chi(z_b) - \chi(1) \\ &= 0 - 1 \\ &= -1,\end{aligned}$$

keďže $1^2 = 1$ a teda 1 je štvorec, čiže $\chi(1) = 1$. Teda

$$\sum_{b \in GF(q)} \chi(b)\chi(b+c) = -1.$$

□

Veta 2.15. *Nech Q je Jacobsthalova matica definovaná na $GF(q)$, kde q je mocnina nepárneho prvočísla. Potom $QJ_q = J_qQ = 0_{q\times q}$ a $QQ^T = qI_q - J_q$.*

Dôkaz (podľa [1]). Pre väčšiu prehľadnosť budeme namiesto $J_q, I_q, 0_{q\times q}$ písať $J, I, 0$. Označme $A = (a_{xy}) = QJ$. Potom

$$a_{xy} = \sum_{y \in GF(q)} q_{xy} = \sum_{y \in GF(q)} \chi(y-x)$$

a vďaka substitúcii $y - x = z$ môžeme použiť (i) z Lemy 2.14 a teda

$$a_{xy} = \sum_{z \in GF(q)} \chi(z) = 0.$$

Analogický postup platí pre $JQ = 0$.

Nech $D = (d_{xy}) = QQ^T$. Potom

$$\begin{aligned}d_{xx} &= \sum_{z \in GF(q)} q_{xz}q_{xz} = \sum_{z \in GF(q)} (\chi(z-x))^2 \\ &= \sum_{k \in GF(q)} (\chi(k))^2, \text{ kde } k = z - x, \\ &= \sum_{k \neq 0} (\chi(k))^2 + (\chi(0))^2 \\ &= q - 1 + 0 = q - 1\end{aligned}$$

a pre $x \neq y$

$$\begin{aligned}d_{xy} &= \sum_{z \in GF(q)} q_{xz}q_{yz} = \sum_{z \in GF(q)} (\chi(z-x))(\chi(z-y)) \\ &= \sum_{b \in GF(q)} \chi(b)(\chi(b+c)), \text{ kde } b = z - x \text{ a } c = x - y, \\ &= -1\end{aligned}$$

podľa (ii) z Lemy (2.14).
Teda $D = qI - J$. □

Teraz máme konečne pripravenú pôdu na dokázanie Paleyových konštrukcií.

Veta 2.16 (podľa [12]). *Ak q je mocnina nepárneho prvočísla a $q \equiv 3(mod\,4)$, tak existuje Hadamardova matica veľkosti $q+1$.*

Dôkaz. Opäť budeme namiesto $I_q, J_q, 0_{q\times q}$ zapisovať $I, J, 0$.
Nech

$$H = \begin{bmatrix} 1 & -1_q^T \\ 1_q & Q+I \end{bmatrix}.$$

Keďže matica Q má podľa Lemy 2.13 mimo diagonály prvky 1 alebo -1 a na diagonále 0, tak $Q+I$ má všetky prvky ± 1 a teda každý prvok matice H je 1 alebo -1.

$$\begin{aligned} HH^T &= \begin{bmatrix} 1 & -1_q^T \\ 1_q & Q+I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1_q^T \\ -1_q & Q^T+I \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1+1_q^T 1_q & 1_q^T - 1_q^T(Q+I) \\ 1_q - (Q+I)1_q & 1_q 1_q^T + (Q+I)(Q^T+I) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1+q & -1_q^T Q \\ -Q1_q & 1_q 1_q^T + QQ^T + Q + Q^T + I \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

$1_q^T Q$ je jeden riadok matice JQ a tá je podľa Vety 2.15 0, $1_q^T Q$ je teda nulový riadok 0_q^T. Podobne $Q1_q$ je jeden stĺpec matice QJ a teda je nulový vektor 0_q. Podľa tej istej vety $QQ^T = qI - J$. Podľa predpokladu $q \equiv 3 \pmod 4$ platí podľa Lemy 2.13, že Q je antisymetrická, čiže $Q + Q^T = 0$. Dostávame tak

$$\begin{aligned} HH^T &= \begin{bmatrix} 1+q & 0_q^T \\ 0_q & J+qI-J+I \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1+q & 0_q^T \\ 0_q & (q+1)I_q \end{bmatrix} = (q+1)I_{q+1}, \end{aligned}$$

teda H je Hadamardova matica. □

Veta 2.17. *Ak q je mocnina nepárneho prvočísla a $q \equiv 1(mod\,4)$, potom existuje Hadamardova matica veľkosti $2(q+1)$.*

Dôkaz. Označme $I = I_{q+1}$, $J = J_{q+1}$, $0 = 0_{(q+1)\times(q+1)}$.
Nech S je $(q+1)\times(q+1)$ matica

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 1_q^T \\ 1_q & Q \end{bmatrix}.$$

Keďže $q \equiv 1(\mathrm{mod}\ 4)$, tak podľa Lemy 2.13 (ii) je Q symetrická, a teda

$$S^T = \begin{bmatrix} 0 & 1_q^T \\ 1_q & Q^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1_q^T \\ 1_q & Q \end{bmatrix},$$

čiže S je tiež symetrická.
Nech

$$\begin{aligned} H &= S \otimes \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} + I \otimes \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} S+I & S-I \\ S-I & -S-I \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Keďže S má na diagonále samé 0 a mimo diagonály iba $+1$ alebo -1, tak matica $\pm S \pm I$ má prvky 1 alebo -1 . Teda každý blok matice H má prvky z množiny $\{1, -1\}$ a preto aj všetky prvky matice H sú 1 alebo -1.

Navyše, keďže S je symetrická,

$$\begin{aligned} HH^T &= \begin{bmatrix} S+I & S-I \\ S-I & -S-I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S+I & S-I \\ S-I & -S-I \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (S+I)(S+I)+(S-I)(S-I) & (S+I)(S-I)+(S-I)(-S-I) \\ (S-I)(S+I)+(-S-I)(S-I) & (S-I)(S-I)+(-S-I)(-S-I) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} S^2+2S+I+S^2-2S+I & S^2-I-S^2+I \\ S^2-I-S^2+I & S^2-2S+I+S^2+2S+I \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2(S^2+I_{q+1}) & 0_{(q+1)\times(q+1)} \\ 0_{(q+1)\times(q+1)} & 2(S^2+I_{q+1}) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Zároveň

$$S^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1_q^T \\ 1_q & Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1_q^T \\ 1_q & Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1_q^T 1_q & 1_q^T Q \\ Q1_q & 1_q 1_q^T + Q^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q & 0_q \\ 0_q^T & J + qI - J \end{bmatrix},$$

keďže $Q^2 = QQ^T = qI - J$ podľa Vety 2.15.

Teda $S^2 = qI_{q+1}$. Potom

$$HH^T = \begin{bmatrix} 2(qI_{q+1} + I_{q+1}) & 0 \\ 0 & 2(qI_{q+1} + I_{q+1}) \end{bmatrix} = 2(q+1)I_{2(q+1)}.$$

Takže H je Hadamardova matica veľkosti $2(q+1)$. □

Konštrukcia Hadamardovej matice veľkosti $q+1$ pomocou Vety 2.16 sa nazýva *Paleyova konštrukcia typu 1*. Konštrukcia Hadamardovej matice veľkosti $2(q+1)$ pomocou Vety 2.17, sa nazýva *Paleyova konštrukcia typu 2*. (podľa [12], [11]).

Príklad 2.18. *Hadamardova matica veľkosti* 12 *sa dá skonštruovať nasledovne: Všimnime si, že* $12 = 11+1$*, pričom* 11 *je prvočíslo a* $11 \equiv 3(mod\ 4)$*. Zvoľme prirodzené usporiadanie prvkov* $GF(11)$*, čiže* $0, 1, 2, \ldots, 10$*. Keďže*

$$\begin{array}{lllll} 1^2 \equiv 1 & 2^2 \equiv 4 & 3^2 \equiv 9 & 4^2 \equiv 5 & 5^2 \equiv 3 \\ 6^2 \equiv 3 & 7^2 \equiv 5 & 8^2 \equiv 9 & 9^2 \equiv 4 & 10^2 \equiv 1, \end{array}$$

kde všetky kongruencie sú modulo 11*, tak kvadratické rezíduá* $GF(11)$ *sú* $1, 3, 4, 5$ *a* 9*. Teda prvý riadok Jacobsthalovej matice* Q *je* $(0, 1, -1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, 1, -1)^T$*. Na získanie prvého stĺpca* Q *využijeme antisymetrickosť* Q *podľa (ii) z Lemy* 2.13*. Ostatné prvky ľahko získame využitím (iii) z tej istej lemy. Teda Jacobsthalova matica je*

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Potom podľa Vety 2.16 *je*

$$H = \begin{bmatrix} 1 & -1_{11}^T \\ 1_{11} & Q + I \end{bmatrix}$$

Hadamardova matica.

$$H = \begin{bmatrix}
1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\
1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1
\end{bmatrix}.$$

Príklad 2.19. *Konštrukcia Hadamardovej matice veľkosti* 20.

Všimnime si, že $9 = 3^2$ *a* $9 \equiv 1(mod\ 4)$, *teda vieme pomocou Vety* 2.17 *skonštruovať Hadamardovu maticu veľkosti* $2(9+1) = 20$. *Podľa Príkladu* 2.6 *sú prvky* $GF(9)$

$$0,\ 1,\ 2,\ a,\ 1+a,\ 2+a,\ 2a,\ 1+2a,\ 2+2a, \tag{2.1}$$

kde $a^2 \equiv 2(\mathrm{mod}\, 3)$. *Potom ich druhé mocniny sú*

$$\begin{aligned}
0^2 &= 0, & (1+a)^2 &= 1 + 2a + a^2 = 3 + 2a = 2a, \\
1^2 &= 1, & (2+a)^2 &= 4 + 4a + a^2 = 6 + 4a = 4a = a, \\
2^2 &= 4 = 1, & (2a)^2 &= 4a^2 = 8 = 2, \\
a^2 &= 2, & (1+2a)^2 &= 1 + 4a + 4a^2 = 1 + a + 8 = a,
\end{aligned}$$

$$(2+2a)^2 = 4 + 8a + 4a^2 = 1 + 2a + a^2 = 1 + 2a + 2 = 2a,$$

pričom všetky rovnosti sú modulo 3. *Teda kvadratické rezíduá* $GF(9)$ *sú* $1,\ 2,\ a,\ 2a$. *Ak* *označíme riadky a stĺpce Jacobsthalovej matice* Q *postupne podľa* (2.1), *tak*

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

a potom

$$H = \begin{bmatrix} S+I & S-I \\ S-I & -S-I \end{bmatrix}$$

je Hadamardova matica veľkosti 20.

3 Hadamardove matice a optimálny dizajn váženia

Pri vážení viacerých objektov po jednom môžu byť odhady hmotností nepresné, obzvlášť ak sú objekty veľmi ľahké. To je napríklad problém váženia chemikálií. V takom prípade je výhodné vážiť objekty po skupinách, aby sme znížili nepresnosť našich odhadov. Tým, ktoré objekty do jednotlivých vážení vybrať, sa zaoberá dizajn váženia.

Majme p objektov, očíslujme ich $1, 2, \ldots, p$, s neznámymi váhami $w_1, w_2, \ldots w_p$. Odhadujeme ich váhy pomocou N meraní. Budeme uvažovať dva rôzne typy váh na ktorých vážime: chemické dvojramenné váhy a pružinové (perové) váhy.

V tejto kapitole budeme čerpať hlavne z článkov [10] a [17]. V oboch kapitolách týkajúcich sa optimálneho dizajnu experimentov budeme používať základné poznatky o lineárnej regresii a metóde najmenších štvorcov. Prístupnou formou sa lineárnej regresii venuje kniha [7], do hĺbky postačujúcej pre našu prácu. Samozrejme, tejto problematike sa venuje aj množstvo iných publikácií, za všetky spomeňme [26].

3.1 Chemické váhy

Pri chemických váhach sa počas každého váženia pre daný objekt rozhodujeme, či ho zahrnieme do váženia a ak áno, na ktorú stranu váh ho umiestnime.

Definujme $N \times p$ maticu $X = (x_{ij})$ tak, že

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ak objekt } j \text{ je umiestnený počas váženia } i \text{ na ľavej strane váh,} \\ -1 & \text{ak objekt } j \text{ je umiestnený počas váženia } i \text{ na pravej strane váh,} \\ 0 & \text{ak objekt } j \text{ nie je vážený počas váženia } i. \end{cases}$$

Potom matica X charakterizuje experiment váženia, nazývame ju *dizajn váženia na chemických váhach.*

V jednotlivom vážení i predstavuje výsledok váženia y_i, $1 \leq i \leq N$, nameraný rozdiel medzi váhou objektov na ľavej strane oproti objektom na pravej strane. Teda nameraná váha na ľavej strane je o y_i väčšia oproti pravej.
Keďže váženie nie je úplne presné, namerané hodnoty sa od skuočných líšia. To môžeme reprezentovať lineárnym modelom

$$y_i = \sum_{j \text{ na ľavej strane}} w_j - \sum_{j \text{ na pravej strane}} w_j + \varepsilon_i,$$

kde y_i je výsledok váženia, w_j sú skutočné váhy a ε_i predstavuje náhodnú chybu váženia. Pomocou prvkov X môžeme tento model zapísať ako

$$y_i = \sum_{j=1}^{N} x_{ij} w_j + \varepsilon_i. \tag{3.1}$$

Označme $(p\times 1)$ vektor skutočných váh $W = (w_1, w_2, \ldots, w_p)^T$, $(p\times 1)$ vektor výsledkov vážení $Y = (y_1, y_2, \ldots, y_N)^T$ a $(N\times 1)$ vektor náhodných chýb $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_N)^T$. Potom model (3.1) môžeme zapísať ako

$$Y = XW + \varepsilon. \tag{3.2}$$

Budeme predpokladať, že ε_i sú náhodné premenné so strednou hodnotou 0 a varianciou σ^2, tiež budeme predpokladať, že sú po dvojiciach nezávislé. Teda ε je náhodný vektor so strednou hodnotou 0_N a s kovariančnou maticou $\sigma^2 I_N$.

Potom váhy w sú odhadnuteľné, ak $X^T X$ je regulárna matica a odhad metódou najmenších štvorcov

$$\hat{W} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

je zároveň najlepší lineárny nevychýlený odhad (best linear unbiased estimator, $BLUE$) pre W, s varianciou

$$\mathrm{Var}(\hat{W}) = (X^T X)^{-1} \sigma^2.$$

Veta 3.1. *Pre ľubovoľný $N\times p$ dizajn váženia na chemických váhach X platí $Var(\hat{w}_i) \geq \frac{\sigma^2}{N}$ pre každé $i = 1, 2, \ldots, p$. Navyše, všetky odhady $\hat{w}_i$ nadobúdajú minimálnu varianciu $\frac{\sigma^2}{N}$ práve vtedy, keď $X^T X = N I_p$.*

Dôkaz. Túto vetu dokázal Hotelling v článku [13]. □

Vzhľadom na predchádzajúcu vetu je prirodzená nasledujúca definícia. Túto definíciu uvádzajú [10], [17].

Definícia 3.2. *Dizajn váženia na chemických váhach X nazývame* optimálny *ak pri jeho použití nadobúda každý odhad $\hat{w}_i$ svoju minimálnu varianciu $\frac{\sigma^2}{N}$.*

Podľa Vety 3.1 je potom $N \times p$ dizajn váženia na chemických váhach X optimálny práve vtedy, keď $X^T X = N I_p$.

Tvrdenie 3.3. *Nech pre $N \times p$ dizajn váženia na chemických váhach X platí $X^T X = NI_p$. Potom X má všetky prvky z množiny $\{-1, 1\}$.*

Dôkaz. Nech v je stĺpec X. Keďže prvky X sú 0,1, alebo -1, platí

$$v^T v = \sum_{i=1}^{N} v_i^2 = k \cdot 1 + (N - k) \cdot 0 = k,$$

kde k je počet nenulových prvkov v stĺpci v. Zároveň musí platiť $v^T v = N$, a teda $k = N$. □

Teda aby bol dizajn váženia optimálny, musí v každom vážení využiť každý objekt.

Veta 3.4 (podľa [10])**.** *Každých $p(\leq N)$ stĺpcov Hadamardovej matice veľkosti N tvorí $N \times p$ optimálny dizajn váženia na chemických váhach.*

Dôkaz. Nech H je Hadamardova matica veľkosti N. Vyberme z nej p stĺpcov, označme ich $h_1, h_2, \ldots h_p$ a označme nimi vytvorenú $n \times p$ maticu $X := (h_1, h_2, \ldots, h_p)$. Chceme ukázať, že táto matica X bude optimálnym dizajnom váženia na chemických váhach.

Prvky X sú z množiny $\{-1, 0, 1\}$, v súlade s Tvrdením 3.3 sú dokonca iba z $\{-1, 1\}$. Zároveň ľubovoľný prvok i, j matice $X^T X$, vďaka tomu, že jej stĺpce sú z Hadamardovej matice, nadobúda hodnotu

$$(X^T X)_{ij} = \begin{cases} h_i^T h_j = 0 & \text{pre } i \neq j, \\ h_i^T h_i = N & \text{pre } i = j. \end{cases}$$

Teda $X^T X = NI_p$. □

3.2 Pružinové váhy

Na rozdiel od chemických váh, nie sú pružinové (perové) váhy dvojramenné a teda v jednotlivom vážení sa pre každý objekt rozhodujeme len, či ho na váhy umiestnime alebo nie. Teda pre prvky $N \times p$ matice $X = (x_{ij})$ platí

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ak objekt } j \text{ je vážený počas váženia } i \text{ na ľavej strane váh,} \\ 0 & \text{ak objekt } j \text{ nie je vážený počas váženia } i. \end{cases}$$

Inak je model (3.2) rovnaký ako pri chemických váhach.

Keďže dizajny váženia na pružinových váhach sú podmnožinou dizajnov váženia na chemických váhach (majú viac obmedzené prvky z -1,0,1 na 0,1), tak pre ne tiež platí Tvrdenie 3.3. Teda aby sme mohli pomocou dizajnu váženia na pružinových váhach odhadnúť váhy s varianciou σ^2/N, museli by sme do každého váženia zahrnúť každý objekt. Pre pružinové váhy to znamená, že $X = J_{N\times p}$ a potom $X^T X = NJ_p$ je evidentne regulárna matica (a nespĺňa Vetu 3.1).

Takže dizajn váženia na pružinovej váhe X nemôže mať odhady váh s varianciou σ^2/N, nemôže byť optimálny v zmysle Definície 3.2. Môžeme však nájsť dizajn, ktorý bude spĺňať niektorú z optimalít podľa nasledujúcej definície.

Definícia 3.5 (podľa [10])**.** *Dizajn váženia X z množiny $\mathfrak{M}$ sa nazýva*

A-optimálny*, ak stopa $(X^T X)^{-1}$ je minimálna spomedzi všetkých dizajnov z množiny $\mathfrak{M}$,*

D-optimálny*, ak determinant $(X^T X)^{-1}$ je minimálny spomedzi všetkých dizajnov z množiny $\mathfrak{M}$,*

E-optimálny*, ak najväčšia vlastná hodnota $(X^T X)^{-1}$ je minimálna spomedzi všetkých dizajnov z množiny $\mathfrak{M}$.*

Ukážeme, že pomocou Hadamardovej matice veľkosti N sa dá skonštruovať D-optimálny dizajn, kde $\mathfrak{M}$ je množinou všetkých $(N-1)\times(N-1)$ dizajnov váženia na pružinových váhach.

Veta 3.6. *Ak existuje Hadamardova matica veľkosti N, tak existuje D-optimálny dizajn váženia na pružinových váhach pre $N-1$ objektov na $N-1$ váženiach.*

Dôkaz (na základe [10], [17])*.* Nech H_N je Hadamardova matica veľkosti N, ktorá má v prvom riadku aj v prvom stĺpci samé 1 (to je možné zabezpečiť prenásobením Hadamardovej matice $\tilde{H}$ znamienkovými permutačnými maticami $P_1\tilde{H}P_2$). Teda H_N je normalizovaná. Zapíšme ju

$$H_N = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & G_{N-1} \end{bmatrix}.$$

Ukážeme, že L_{N-1} definovaná ako

$$L_{N-1} = \frac{1}{2}(J_{N-1} - G_{N-1}) \tag{3.3}$$

je požadovaný D-optimálny dizajn.

Najprv ukážeme prepojenie medzi maticami veľkosti N s prvkami $-1, 1$ a maticami veľkosti $N-1$ s prvkami $0, 1$.

Majme $N \times N$ maticu A_N s prvkami $a_{ij} = \pm 1$ takú, že v jej prvom riadku a prvom stĺpci sú všetky prvky $+1$. Označme B_{N-1} maticu veľkosti $N-1$ vzniknutú odstránením prvého riadku a stĺpca z A_N. Potom A_N môžeme zapísať

$$A_N = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & B_{N-1} \end{bmatrix}.$$

Odpočítajme jej prvý riadok od ostatných riadkov, tak aby sme vynulovali prvý stĺpec okrem jeho prvého prvku. Od každého z riadkov $2, 3, \ldots, N$ teda odpočítavame jednotkový riadok, teda od B_{N-1} odpočítavame J_{N-1}. Označme vzniknutú maticu

$$\tilde{A}_N = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & B_{N-1} - J_{N-1} \end{bmatrix}.$$

Odpočítaním riadkov od seba navzájom sa nemení determinant matice, takže $\det(A_N) = \det(\tilde{A}_N)$. Determinant $\tilde{A}_N$ vyjadríme rozvojom podľa prvého stĺpca, čiže $\det(\tilde{A}_N) = 1 \det(B_{N-1} - J_{N-1})$.

Pre prvok u_{ij} matice $B_{N-1} - J_{N-1}$ platí

$$u_{ij} = \begin{cases} 1 - 1 = 0 & \text{ak } a_{ij} = 1, \\ -1 - 1 = -2 & \text{ak } a_{ij} = -1. \end{cases}$$

Teda v každom riadku sú všetky nenulové prvky -2.

Vynásobme každý riadok matice B_{N-1} $-\frac{1}{2}$, aby boli všetky nenulové prvky matice rovné 1. Označme vzniknutú maticu

$$K_{N-1} := -\frac{1}{2}(B_{N-1} - J_{N-1}) = \frac{1}{2}(J_{N-1} - B_{N-1}).$$

Jej prvky sú z množiny $\{0, 1\}$ a zároveň

$$\begin{aligned} \det(K_{N-1}) &= (-1)^{N-1} \frac{1}{2^{N-1}} \det(B_{N-1} - J_{N-1}) = (-1)^{N-1} \frac{1}{2^{N-1}} \det(\tilde{A}_N) \\ &= (-1)^{N-1} \frac{1}{2^{N-1}} \det(A_N). \end{aligned}$$

Tento postup môžeme vykonať aj spätne: ak máme danú maticu K_{N-1} s prvkami $0, 1$, vynásobíme jej riadky -2, pridáme (na prvé miesto) stĺpec núl a následne (na prvé miesto) riadok jednotiek. Nakoniec pripočítame prvý riadok k ostatným riadkom. Dostaneme tak $N \times N$ maticu A_N s prvkami ± 1 a s jednotkovým prvým stĺpcom a riadkom, pre ktorú platí $\det(A_N) = (-1)^{N-1} 2^{N-1} \det(K_{N-1})$. Schematicky sa to dá zapísať

$$\tilde{A}_N = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & -2K_{N-1} \end{bmatrix},$$

$$A_N = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & -2K_{N-1} + J_{N-1} \end{bmatrix},$$

$\det(A_N) = \det(\tilde{A}_N) = 1 \cdot (-1)^{N-1} 2^{N-1} \det(K_{N-1})$.

Teda ku každej matici veľkosti $N-1$ s prvkami $0, 1$ sme priradili maticu veľkosti N s prvkami $-1, 1$ s jednotkovým prvým riadkom aj stĺpcom takú, že $\det(K_{N-1}) = (-1)^{N-1} \frac{1}{2^{N-1}} \det(A_N)$.

Pre ľubovoľnú maticu K_{N-1} veľkosti $N-1$ s prvkami $0, 1$ teda platí

$$\det(K_{N-1}) = (-1)^{N-1} \frac{1}{2^{N-1}} \det(A_N),$$

kde A_N je maticami veľkosti N, ktorej je K_{N-1} priradená. Keďže pre ľubovoľnú štvorcovú maticu M platí $\det(M^T) = \det(M)$, tak

$$\det(K_{N-1}^T K_{N-1}) = (\det(K_{N-1}))^2 = ((-1)^{N-1} \frac{1}{2^{N-1}} \det(A_N))^2 = \frac{1}{2^{2(N-1)}} (\det(A_N))^2.$$

Je zjavné, že matica L_{N-1} z (3.3) vznikla z H_N vyššie uvedeným postupom a teda

$$\det(L_{N-1}^T L_{N-1}) = \frac{1}{2^{2(N-1)}} (\det(H_N))^2.$$

Keďže $|\det(H_N)| \geq |\det(A_N)|$ pre ľubovoľnú maticu veľkosti N s prvkami $-1, 1$, tak aj

$$\frac{1}{2^{2(N-1)}} (\det(H_N))^2 \geq \frac{1}{2^{2(N-1)}} (\det(A_N))^2,$$

čiže

$$\det(L_{N-1}^T L_{N-1}) \geq \det(K_{N-1}^T K_{N-1}),$$

pre ľubovoľnú maticu K_{N-1} veľkosti N s prvkami $0, 1$. Potom

$$\frac{1}{\det(L_{N-1}^T L_{N-1})} \leq \frac{1}{\det(K_{N-1}^T K_{N-1})},$$

a keďže $\det(X^{-1}) = \frac{1}{\det(X)}$, tak

$$\det((L_{N-1}L_{N-1}^T)^{-1}) \leq \det((K_{N-1}K_{N-1}^T)^{-1}).$$

Takže L_{N-1} je D-optimálny dizajn. □

Na to, aby sme ukázali akú varianciu majú odhady váh pri použití D-optimálneho dizajnu L_{N-1} z minulej vety, dokážeme najprv pomocnú lemu.

Lema 3.7. *Nech* $A_N = I_N + J_N$, *potom* $\det(A_N) = N + 1$.

Dôkaz. Dôkaz matematickou indukciou.
(i) pre $N = 2$ je

$$A_2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix},$$

$\det(A_2) = 4 - 1 = 3 = N + 1$.
(ii) Nech $\det(A_N) = N + 1$. Determinant A_{N+1} vypočítame rozvojom podľa prvého stĺpca. Nech $M_{i,j}$ označuje maticu vzniknutú odstránením i-teho riadku a j-teho stĺpca z matice A_{N+1}. Teda $M_{1,1} = I_N + J_N = A_N$, pre $3 \leq i \leq N$ je

$$M_{i,1} = \begin{bmatrix} 1_{i-2}^T & 1 & 1_{N-i+1}^T \\ I_{i-2} + J_{i-2} & 1_{i-2} & J_{(i-2)\times(N-i+1)} \\ J_{(N-i+1)\times(i-2)} & 1_{N-i+1} & I_{N-i+1} + J_{N-i+1} \end{bmatrix},$$

$$M_{2,1} = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & I_{N-1} + J_{N-1} \end{bmatrix},$$

$$M_{N+1,1} = \begin{bmatrix} 1_{N-1} & 1 \\ I_{N-1} + J_{N-1} & 1_{N-1} \end{bmatrix}.$$

Potom $\det(A_{N+1}) = 2\det(M_{1,1}) + \sum_{i=2}^{N+1} (-1)^{i+1} \det(M_{i,1})$. Na výpočet determinantu $M_{i,1}$ odpočítajme prvý riadok (ktorý sa skladá zo samých 1) od ostatných riadkov. Dostávame tak

$$\det(M_{i,1}) = \det \begin{bmatrix} 1_{i-2}^T & 1 & 1_{N-i+1}^T \\ I_{i-2} & 0_{i-2} & 0_{(i-2)\times(N-i+1)} \\ 0_{(N-i+1)\times(i-2)} & 0_{N-i+1} & I_{N-i+1} \end{bmatrix}.$$

Ďalej odpočítajme riadky $2, 3, \ldots, N+1$ od prvého riadku, teda

$$\det(M_{i,1}) = \det \begin{bmatrix} 0_{i-2}^T & 1 & 0_{N-i+1}^T \\ I_{i-2} & 0_{i-2} & 0_{(i-2)\times(N-i+1)} \\ 0_{(N-i+1)\times(i-2)} & 0_{N-i+1} & I_{N-i+1} \end{bmatrix},$$

permutujme postupne riadky $(1,2), (2,3), \ldots, (i-2, i-1)$, to je $i-2$ permutácií a teda

$$\det(M_{i,1}) = (-1)^{i-2} \det \begin{bmatrix} I_{i-2} & 0_{i-2} & 0_{(i-2)\times(N-i+1)} \\ 0_{i-2}^T & 1 & 0_{N-i+1}^T \\ 0_{(N-i+1)\times(i-2)} & 0_{N-i+1} & I_{N-i+1} \end{bmatrix},$$

čiže $\det(M_{i,1}) = (-1)^{i-2}$.

Bez dolných indexov sa dá tento postup prehľadnejšie zapísať

$$\begin{aligned} \det(M_{i,1}) &= \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ I+J & 1 & J \\ J & 1 & I+J \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \\ &= \det \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} = (-1)^{i-2} \det \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \\ &= (-1)^{i-2}. \end{aligned}$$

Podobne vypočítame

$$\begin{aligned} \det(M_{2,1}) &= \det \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & I_{N-1} + J_{N-1} \end{bmatrix} \\ &= \det \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & I_{N-1} \end{bmatrix} \\ &= 1 \end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned}
\det(M_{N+1,1}) &= \det \begin{bmatrix} 1_{N-1} & 1 \\ I_{N-1} + J_{N-1} & 1_{N-1} \end{bmatrix} \\
&= \det \begin{bmatrix} 1_{N-1} & 1 \\ I_{N-1} & 0_{N-1} \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} 0_{N-1} & 1 \\ I_{N-1} & 0_{N-1} \end{bmatrix} \\
&= (-1)^{N-1} \det \begin{bmatrix} I_{N-1} & 0_{N-1} \\ 0_{N-1} & 1 \end{bmatrix} \\
&= (-1)^{N-1},
\end{aligned}$$

teda $\det(M_{i,1}) = (-1)^{i-2}$ pre $2 \leq i \leq N+1$. Potom

$$\begin{aligned}
\det(A_{N+1}) &= 2\det(M_{1,1}) + \sum_{i=2}^{N+1} (-1)^{i+1} \det(M_{i,1}) \\
&= 2\det(A_N) + \sum_{i=2}^{N+1} (-1)^{i+1}(-1)^{i-2} \\
&= 2(N+1) + \sum_{i=2}^{N+1} (-1)^{2i-1} = 2N + 2 + N(-1)^{-1} \\
&= N + 2
\end{aligned}$$

□

Práce [10] a [17] udávajú rozdielne variancie odhadov váh pri použití D-optimálneho dizajnu L_{N-1}. [10] uvádza $4(N-1)\sigma^2/N$ a [17] uvádza $4(N-1)\sigma^2/N^2$. Ukážeme, že správnu varianciu uvádza článok [17].

Veta 3.8. *Variancia každého odhadu váh $\hat{w}_i$, $i = 1, 2, \ldots, N$ pri použití dizajnu L_{N-1} z Vety* 3.6 *je*

$$\mathrm{Var}(\hat{w}_i) = \frac{4(N-1)\sigma^2}{N^2}.$$

Dôkaz. Označme $N \times N$ maticu $C = (c_{ij})$, $C := L_{N-1}^T L_{N-1}$. Variančno-kovariančná matica vektoru odhadnutých váh je $\mathrm{Var}(\hat{W}) = \sigma^2 C^{-1}$. Označme d_{ij} prvky matice C^{-1}. Potom odhady jednotlivých váh majú varianciu $\mathrm{Var}(\hat{w}_i) = d_{ii}$. Na zistenie diagonálnych prvkov inverznej matice využijeme výpočet inverznej matice pomocou adjungovanej matice. Je známy poznatok z lineárnej algebry, že pre prvky inverznej matice platí

$d_{ij} = \frac{1}{\det(C)}(-1)^{i+j}\det(M_{j,i})$, kde $M_{j,i}$ je matica získaná odstránením j-teho riadku a i-teho stĺpca z matice C (viď [23]).

Pripomeňme, že $L_{N-1} = \frac{1}{2}(J_{N-1} - G)$ je $(N-1) \times (N-1)$ matica, pričom H je normalizovaná Hadamardova matica veľkosti N a

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & G \end{bmatrix}.$$

Potom

$$H^T H = \begin{bmatrix} N & 1_{N-1}^T + 1_{N-1}^T G \\ 1_{N-1} + G^T & J_{N-1} + G^T G \end{bmatrix}.$$

Keďže H je Hadamardova, tak

$$\begin{bmatrix} N & 1_{N-1}^T + 1_{N-1}^T G \\ 1_{N-1} + G^T & J_{N-1} + G^T G \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & 0_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & N I_{N-1} \end{bmatrix},$$

čiže

$$\begin{aligned} 1_{N-1}^T G = -1_{N-1}^T \text{ a teda aj } J_{N-1}G = -J_{N-1}, \\ G^T 1_{N-1} = -1_{N-1} \text{ a teda } G^T J_{N-1} = -J_{N-1}, \\ G^T G = N I_{N-1} - J_{N-1}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Potom

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{2}(J_{N-1} - G)^T \frac{1}{2}(J_{N-1} - G) = \frac{1}{4}(J_{N-1}^T J_{N-1} - J_{N-1}^T G - G^T J_{N-1} + G^T G) \\ &= \frac{1}{4}((N-1)J_{N-1} + J_{N-1} + J_{N-1} + N I_{N-1} - J_{N-1}) \\ &= \frac{N}{4}(I_{N-1} + J_{N-1}), \end{aligned}$$

teda $\det(C) = (\frac{N}{4})^{N-1}\det(I_{N-1} + J_{N-1})$ a potom podľa Lemy 3.7 platí

$$\det(C) = \left(\frac{N}{4}\right)^{N-1} N.$$

Keďže $C = \frac{N}{4}(I_{N-1} + J_{N-1})$, pre $(N-2) \times (N-2)$ maticu $M_{i,i}$ platí

$$M_{i,i} = \frac{N}{4}\begin{bmatrix} I_{i-1} + J_{i-1} & J_{(i-1)\times(N-i-1)} \\ J_{(N-i-1)\times(i-1)} & I_{N-i-1} + J_{N-i-1} \end{bmatrix} = \frac{N}{4}(I_{N-2} + J_{N-2})$$

a teda podľa Lemy 3.7 je jej determinant

$$\det(M_{i,i}) = \left(\frac{N}{4}\right)^{N-2}\det(I_{N-2} + J_{N-2}) = \left(\frac{N}{4}\right)^{N-2}(N-1).$$

Teda

$$
\begin{aligned}
d_{ii} &= \frac{1}{\left(\frac{N}{4}\right)^{N-1} N} (-1)^{2i} \left(\frac{N}{4}\right)^{N-2} (N-1) \\
&= \frac{4(N-1)}{N^2}
\end{aligned}
$$

a potom

$$
\mathrm{Var}(\hat{w}_i) = \frac{4(N-1)\sigma^2}{N^2}.
$$

□

3.3 Vychýlené váhy

Merania na chemických aj pružinových váhach môžu byť *vychýlené* (angl. biased). Nazývame tak stav, keď výsledky meraní majú tendenciu byť príliš vysoké alebo príliš nízke oproti skutočným hodnotám, teda merania obsahujú systematickú chybu.

Ak sa obávame, že váženia obsahujú výchylku b, ktorá nie je vopred známa, potrebujeme ju odhadnúť. To je možné uskutočniť tak, že ju budeme pokladať za jednu z neznámych váh, takú, že sa vyskytuje v každom meraní na pevne zvolenej strane váh (v prípade chemických váh) alebo je v každom meraní na váhach umiestnená (v prípade pružinových váh). Teda výchylku reprezentujeme tak, že prvý stĺpec dizajnu zvolíme za vektor jednotiek. To nie je v prípade chemických váh problém, ako ukazuje nasledujúca veta.

Veta 3.9 (podľa [10]). *Ak existuje Hadamardova matica veľkosti N a $p \leq N$, potom existuje optimálny dizajn váženia na vychýlených chemických váhach pre $p-1$ objektov, využívajúci N vážení, ktorý navyše odhaduje výchylku váh s varianciou* $\mathrm{var}(\hat{b}) = \frac{\sigma^2}{N}$.

Dôkaz. Hadamardovu maticu $\tilde{H}$ môžeme seminormalizovať na $H = P\tilde{H}$, teda vynásobiť znamienkovou permutačnou maticou aby mal prvý stĺpec H všetky prvky rovné 1. Označme X maticu tvorenú ľubovoľnými $p-1$ stĺpcami spomedzi stĺpcov $2, 3, \ldots, N$ matice H. Rovnakým argumentom ako v dôkaze Vety 3.4 platí, že $X^T X = N I_{p-1}$ a X je optimálny dizajn pre $p-1$ objektov na nevychýlených váhach. Ukážeme, že

$$
\tilde{X} := \begin{bmatrix} 1_N & X \end{bmatrix}
$$

je optimálny dizajn pre $p-1$ objektov na vychýlených chemických váhach.

$$\tilde{X}^T\tilde{X} = \begin{bmatrix} 1_N^T \\ X^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1_N & X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1_N^T 1_N & 1_N^T X \\ X^T 1_N & X^T X \end{bmatrix}.$$

Keďže 1_N je prvý stĺpec H, tak je kolmý na všetky ostatné stĺpce H, čiže $1_N^T X_{(N\times p-1)} = 0_{p-1}$ a teda

$$\tilde{X}^T\tilde{X} = \begin{bmatrix} N & 0_{p-1}^T \\ 0_{p-1} & NI_{p-1} \end{bmatrix} = NI_p.$$

Potom $(\tilde{X}^T\tilde{X})^{-1} = \frac{1}{N}I_p$.
Teda pri použití dizajnu $\tilde{X}$ je každej z váh w_i, $2 \le i \le p$ priradený stĺpec i a variancia odhadu $\hat{w}_i$ je $\mathrm{Var}(\hat{w}_i) = \frac{\sigma^2}{N}$, teda $\tilde{X}$ je optimálny. Pomocou $\tilde{X}$ odhadujeme aj výchylku, je jej priradený prvý stĺpec a teda $\tilde{X}$ je optimálny dizajn pre vychýlené chemické váhy. Navyše, výchylka je tiež odhadnutá s varianciou $\frac{\sigma^2}{N}$. □

Pre pružinové váhy je podmienka jednotkového stĺpca obmedzujúca, keďže pri tvorbe D-optimálneho dizajnu z Vety 3.6 sme odstránili prvý stĺpec z Hadamardovej matice s jednotkovým prvým stĺpcom a v ďalších krokoch sme nový jednotkový stĺpec neutvorili. Je preto rozumné očakávať, že variancia odhadov jednotlivých váh bude väčšia.

Veta 3.10. *V $N \times p$ dizajne pre pružinové váhy s jednotkovým prvým stĺpcom platí*

$$\mathrm{Var}(\hat{w}_1) = \frac{p\sigma^2}{N}, \quad \mathrm{Var}(\hat{w}_i) \ge \frac{4\sigma^2}{N}, i = 2, 3, \ldots, N$$

Dôkaz. Túto vetu dokázal Moriguti v [18]. □

Takže podobne ako sme definovali optimalitu pre chemické váhy, môžeme definovať optimalitu pre vychýlené pružinové váhy.

Definícia 3.11 (podľa [6]). *Dizajn váženia pre vychýlené pružinové váhy sa nazýva* optimálny, *ak odhaduje každú váhu s minimálnou varianciou, teda*

$$\mathrm{Var}(\hat{w}_i) = \frac{4\sigma^2}{N}, i = 2, 3, \ldots, N$$

Veta 3.12 (podľa [10]). *Ak existuje Hadamardova matica veľkosti N, potom existuje optimálny dizajn váženia pre vychýlené pružinové váhy pre $N-1$ objektov, využívajúci N meraní, ktorý je navyše A-optimálny a odhaduje výchylku s varianciou* $\mathrm{Var}(\hat{b}) = \sigma^2$.

Dôkaz. Nech L_{N-1} je $(N-1) \times (N-1)$ matica z Vety 3.6. Ukážeme, že

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & J_{N-1} - L_{N-1} \end{bmatrix}$$

je požadovaný dizajn. L_{N-1} má prvky z množiny $\{0, 1\}$, potom $J_{N-1} - L_{N-1}$ má tiež prvky z množiny $\{0, 1\}$, keďže $1 - 1 = 0$, $1 - 0 = 1$. Teda X má prvky z množiny vyhovujúcej pre dizajn váženia na pružinových váhach.

Tiež $L_{N-1} = \frac{1}{2}(J_{N-1} - G)$, teda $J_{N-1} - L_{N-1} = \frac{1}{2}(J_{N-1} + G)$, kde G je matica ktorá vznikla odstránením prvého riadku a prvého stĺpca z normalizovanej Hadamardovej matice veľkosti N. Potom

$$\begin{aligned} X^T X &= \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & \frac{1}{2}(J_{N-1} + G^T) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1_{N-1}^T \\ 1_{N-1} & \frac{1}{2}(J_{N-1} + G) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 + 1^T 1 & 1^T + 1^T \frac{1}{2}(J + G) \\ 1 + \frac{1}{2}(J + G^T)1 & 11^T + \frac{1}{2}(J + G^T)\frac{1}{2}(J + G) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} N & 1^T + \frac{1}{2}1^T J + \frac{1}{2}1^T G \\ \frac{1}{2}J1 + \frac{1}{2}G^T 1 & J + \frac{1}{4}(JJ + G^T J + JG + G^T G) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

kde dolné indexy sa nezmenili a preto sme ich kvôli prehľadnosti vynechali. Vďaka vlastnostiam G (3.4) potom platí

$$X^T X = \begin{bmatrix} N & 1^T + \frac{N-1}{2}1^T - \frac{1}{2}1^T \\ 1 + \frac{N-1}{2}1 - \frac{1}{2}1 & \frac{1}{4}(4J + (N-1)J - J - J + NI - J) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \frac{N}{2}1^T \\ \frac{N}{2}1 & \frac{N}{4}(I + J) \end{bmatrix}$$

Označme maticu $C = (c_{ij})$, $C := X^T X$. Variančno-kovariančná matica vektoru odhadnutých váh je $\text{Var}(\hat{W}) = \sigma^2 C^{-1}$. Označme d_{ij} prvky matice C^{-1}. Potom odhady jednotlivých váh majú varianciu $\text{Var}(\hat{w}_i) = d_{ii}$. Diagonálne prvky inverznej matice vypočítame ako vo Vete 3.8, $d_{ii} = \frac{1}{\det(C)}(-1)^{i+i}\det(M_{i,i})$, kde $M_{i,i}$ je matica získaná odstránením i-teho riadku a i-teho stĺpca z matice C.

Na výpočet determinantu C odpočítajme $\frac{1}{2}$-násobok prvého riadku od ostatných, teda

$$\det(C) = \det \begin{bmatrix} N & \frac{N}{2}1_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & \frac{N}{4}I_{N-1} \end{bmatrix} = N\left(\frac{N}{4}\right)^{N-1}.$$

Pre $i > 1$ platí

$$M_{i,i} = \begin{bmatrix} N & \frac{N}{2}1_{i-2}^T & \frac{N}{2}1_{N-i}^T \\ \frac{N}{2}1_{i-2} & \frac{N}{4}(I_{i-2}+J_{i-2}) & \frac{N}{4}J_{(i-2)\times(N-i)} \\ \frac{N}{2}1_{N-i} & \frac{N}{4}J_{(N-i)\times(i-2)} & \frac{N}{4}(I_{N-i}+J_{N-i}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \frac{N}{2}1_{N-2}^T \\ \frac{N}{2}1_{N-2} & \frac{N}{4}(I_{N-2}+J_{N-2}) \end{bmatrix},$$

potom po odpočítaní $\frac{1}{2}$-násobkú prvého riadku od ostatných dostávame

$$\det(M_{i,i}) = \det \begin{bmatrix} N & \frac{N}{2}1_{N-2}^T \\ 0_{N-2} & \frac{N}{4}I_{N-2} \end{bmatrix} = N\left(\frac{N}{4}\right)^{N-2}.$$

Teda

$$d_{ii} = (-1)^{2i}\frac{N(\frac{N}{4})^{N-2}}{N(\frac{N}{4})^{N-1}} = \frac{4}{N},$$

čiže pre $i > 1$ je

$$\mathrm{Var}(\hat{w}_i) = \frac{4\sigma^2}{N}.$$

Navyše $(M_{1,1}) = \frac{N}{4}(I_{N-1} + J_{N-1})$ a potom podľa Lemy 3.7

$$\det(M_{1,1}) = \left(\frac{N}{4}\right)^{N-1}\det(I_{N-1}+J_{N-1}) = N\left(\frac{N}{4}\right)^{N-1}.$$

Potom

$$d_{11} = (-1)^2\frac{N(\frac{N}{4})^{N-1}}{N(\frac{N}{4})^{N-1}} = 1$$

a teda variancia odhadu výchylky je $\mathrm{Var}(\hat{b}) = \sigma^2$, čo je v zhode s Vetou 3.10 pre $p = N$.

Stopa matice je súčet diagonálnych prvkov, teda stopa $\mathrm{tr}(C^{-1})$ je $\sum_{i=1}^{N} d_{ii}$. Nech $\tilde{X}$ je ľubovoľný iný $N \times N$ dizajn váženia pre $N-1$ prvkov na vychýlených pružinových váhach. Označme $\tilde{d}_{ij}$ prvky matice $(\tilde{X}^T\tilde{X})^{-1}$ a $\tilde{w}_i$ odhady váh pri použití dizajnu $\tilde{X}$. Podľa Vety 3.10 platí

$$\mathrm{Var}(\tilde{w}_1) = \sigma^2 = \mathrm{Var}(\hat{w}_1),\ \ \mathrm{Var}(\tilde{w}_i) \geq \frac{4\sigma^2}{N} = \mathrm{Var}(\hat{w}_i) \text{ pre } i > 1$$

a keďže $\mathrm{Var}(\tilde{W}) = (\tilde{X}^T\tilde{X})^{-1}\sigma^2$, tak

$$\tilde{d}_{11} = d_{11},\ \ \tilde{d}_{ii} \geq d_{ii} \text{ pre } i > 1.$$

Potom

$$\sum_{i=1}^{N}\tilde{d}_{ii} \geq \sum_{i=1}^{N} d_{ii},$$

čiže $\mathrm{tr}((\tilde{X}^T\tilde{X})^{-1}) \geq \mathrm{tr}((X^TX)^{-1})$, teda X je A-optimálny. □

4 Hadamardove matice a optimálny faktorový dizajn

4.1 Faktorový dizajn

Vo faktorovom experimente skúmame, aké hodnoty nadobúda meraná veličina v závislosti od vstupných veličín, ktoré nadobúdajú iba obmedzený počet hodnôt. Takéto veličiny nazývame *faktory* a hodnoty, ktoré nadobúdajú nazývame *úrovne*. Faktormi sú častokrát kvalitatívne veličiny, ako napríklad typy hnojív pri meraní úrody plodiny v poľnohospodárstve, alebo typy chemikálií v chemických experimentoch. Za faktory ale môžeme pokladať aj kvantitatívne veličiny ak ich nejakým spôsobom diskretizujeme. Vtedy vykonávateľ experimentu musí určiť úrovne, ktoré bude pre také veličiny uvažovať.

Po určení faktorov a ich úrovní zisťujeme, aký vplyv majú faktory na meranú veličinu. Rozhodujeme sa, pri akých kombináciach úrovní faktorov budeme skúmanú veličinu merať. To určuje faktorový dizajn. Ak pre každú možnú kombináciu úrovní faktorov vykonáme aspoň jedno meranie, experiment sa nazýva *úplný faktorový experiment*. Problémom je, že experiment určený úplným faktorovým dizajnom si vyžaduje zvyčajne veľmi veľký počet meraní. To je často z časových alebo rozpočtových dôvodov v praxi neuskutočniteľné. Vtedy uskutočníme iba časť, meraní a *čiastočným (neúplným) faktorovým dizajnom* určíme, ktoré merania do experimentu zahrnúť.

Na formálny popis faktorového dizajnu je potrebné v prvom rade zaviesť základné značenie. V tejto kapitole sme vo veľkej miere čerpali z knihy [11] preto sme z nej aj prebrali nasledovné značenie.

Označme

k počet faktorov zahrnutých v experimente

$1, 2, \ldots, k$ jednotlivé faktory

S_l množinu úrovní faktora $l, l = 0, 1, \ldots, k$,

$s_l = |S_l|$ počet úrovní faktora $l, l = 0, 1, \ldots, k$,

L množinu všetkých kombinácií úrovní faktorov,

$M = |L| = s_1 s_2 \cdot \ldots \cdot s_k$ počet prvkov L,

N počet všetkých meraní,

τ jednu kombinácia úrovní faktorov a

$r_\tau \geq 0$ počet meraní priradených ku kombinácii τ.

V tejto práci sa budeme zaoberať faktorovými experimentami, v ktorých sú všetky faktory na dvoch úrovniach. Potom $s_l = 2$ pre každé $l = 1, 2, \ldots, k$ a $M = 2^k$. Tieto úrovne budeme označovať $-1, +1$ alebo skrátene $-, +$, takéto značenie používa napríklad [3]. Toto značenie je motivované označením vysokej úrovne daného faktoru $+1$ a nízkej úrovne -1. Iné značenie úrovní (ktoré používa napr. [11]) je $0, 1$, motivované označením prítomnosti daného faktoru 1 a neprítomnosti 0.

Prvky L často potrebujeme mať usporiadané. Vtedy zvyčajne použijeme *štandardné usporiadanie*, čo je opačné lexikografické usporiadanie. Poradie dvoch kombinácií úrovní je určené na lexikografickom základe (v prípade čísel to značí, že najprv ide nižšie číslo), pričom najprv sa porovnáva posledná úroveň, v prípade zhody predchádzajúca atď. Toto usporiadanie používajú okrem iných práce [11] a [2]. V iných publikáciach (napr. [8]) sa používa lexikografické usporiadanie.

Príklad 4.1. *Pre $k = 3$ a $s_1 = s_2 = 2$ je štandardné usporiadanie kombinácií úrovní* $(-,-,-),(+,-,-),(-,+,-),(+,+,-),(-,-,+),(+,-,+),(-,+,+),(+,+,+)$.

Faktorový experiment je určený tým, na akých úrovniach sú faktory v jednotlivých meraniach. Potom *faktorový dizajn* je $N \times k$ matica s riadkami vyjadrujúcimi merania a stĺpcami vyjadrujúcimi faktory, ktorá v každom riadku obsahuje na l-tej pozícii prvok podľa toho na akej úrovni bol l-tý faktor v danom meraní. Taká matica plne charakterizuje faktorový experiment.

Definícia 4.2. Faktorovým dizajnom *nazývame $N \times k$ maticu F ktorej prvok na pozícii (i, l) je rovný úroveni l-tého faktoru v i-tom meraní.*

Ak $r_\tau \geq 1$ pre každú kombináciu úrovní $\tau \in L$, tak faktorový dizajn sa nazýva úplný faktorový dizajn *(angl. complete factorial design).*

Ak $r_\tau = 0$ pre niektorú kombináciu úrovní $\tau \in L$, tak faktorový dizajn sa nazýva čiastočný (neúplný) faktorový dizajn *(angl. fractional factorial design).*

Pre $r_\tau \geq 1$ bude $Y_{\tau j}, j = 1, 2, \ldots, r_\tau$ značiť nameranú hodnotu meranej veličiny prislúchajúcu k j-temu meraniu, ktoré je priradené ku kombinácii úrovní τ. Potom lineárny model pre príslušnú premennú je

$$Y_{\tau j} = \mu_\tau + \varepsilon_{\tau j}, \tag{4.1}$$

kde μ_τ je populačný priemer meranej veličiny pri kombinácii úrovní τ a $\varepsilon_{\tau j}$ je náhodná odchýlka j-teho merania pre τ od populačného priemeru. Budeme predpokladať, že všetky $\varepsilon_{\tau j}$ majú strednú hodnotu 0 a konštantnú varianciu σ^2. Potom $E(Y_{\tau j}) = \mu_\tau$ a $\mathrm{Var}(Y_{\tau j}) = \sigma^2$. Budeme tiež predpokladať, že $\varepsilon_{\tau j}$ sú nekorelované.

Označme μ $M \times 1$ vektor populačných priemerov μ_τ v štandardnom poradí podľa kombinácií úrovní. Y bude značiť $N \times 1$ vektor náhodných premenných $Y_{\tau j}$ v štandardnom poradí podľa τ a podobne ε bude $N \times 1$ vektor náhodných chýb.
Potom model (4.1) môžeme zapísať vektorovo

$$Y = X\mu + \varepsilon, \tag{4.2}$$

kde X je $N \times M$ matica jednotiek a núl so stĺpcami označenými kombináciami úrovní v štandardnom poradí a riadkami označenými podľa indexov Y. Pričom jej prvky spĺňajú

$$X_{\tau j, \tau'} = \begin{cases} 1, & \text{ak } \tau = \tau', \\ 0 & \text{inak.} \end{cases}$$

Teda X vyjadruje, od ktorého populačného priemeru μ_τ závisí prvok τj vektoru Y. Keďže pre dané meranie τj existuje práve jeden populačný priemer $\mu_{\tau'}$ spĺňajúci $\tau' = \tau$, tak X má v každom riadku práve jednu 1. Ak $r_\tau = 0$ pre $\tau \in L$, teda ak populačný priemer μ_τ nemeriame, tak stĺpec τ matice X má všetky prvky rovné 0. Ak $r_\tau = 1$ pre každé $\tau \in L$, potom X je matica identity I_M.

Takto zapísaný model nám poskytuje informáciu o tom, akú hodnotu meranej veličiny môžeme očakávať pri daných úrovniach faktorov. Nás ale najmä zaujíma, aký majú na meranú veličinu jednotlivé faktory a ich interakcie vplyv, preto potrebujeme model transformovať do viac vyhovujúceho tvaru.

Definícia 4.3 (podľa [11]). *Nech c je $M \times 1$ vektor spĺňajúci $c^T 1_M = 0$. Potom* kontrastom *nazývame lineárnu kombináciu $c^T \mu$. Kontrast je teda lineárna kombinácia*

populačných priemerov, ktorej koeficienty sa sčítajú na 0.
Hovoríme, že dva kontrasty $c_1^T\mu$ *a* $c_2^T\mu$ *sú* ortogonálne, *ak spĺňajú* $c_1^T c_2 = 0$.
Kontrast $c^T\mu$ *je* odhadnuteľný *pri danom modeli a pri výbere* N *kombinácií úrovní, ak existuje* $h^T Y$ *lineárna kombinácia* $Y_{\tau j}$*, kde* h *je* $M \times 1$ *vektor a* $E(h^T Y) = c^T\mu$. *Taký vektor* h *sa potom nazýva* nevychýlený odhad $c^T\mu$.

V práci [11] je spracovanie faktorového experimentu pre čitateľa pochopiteľne naznačené v nasledujúcom príklade.

Príklad 4.4. *Skúmame* $2^2 (= 2 \times 2)$ *faktorový experiment. Máme teda 2 faktory, každý je na dvoch úrovniach, označme ich* $-1, +1$*, alebo skrátene* $-, +$. *Potom kombinácie úrovní v štandardnom poradí sú* $(-,-)$, $(+,-)$, $(-,+)$, $(+,+)$. *Vektor populačných priemerov je*

$$\mu = (\mu_{--}, \mu_{+-}, \mu_{-+}, \mu_{++})^T.$$

Nech

$$c_1 = \frac{1}{2}(-1, +1, -1, +1)^T,$$

potom

$$\begin{aligned} c_1^T\mu &= \frac{1}{2}(-\mu_{--} + \mu_{+-} - \mu_{-+} + \mu_{++}) \\ &= \frac{1}{2}(\mu_{++} - \mu_{-+} + \mu_{+-} - \mu_{--}) \end{aligned}$$

je kontrast, keďže $c^T 1_4 = 0$. $(\mu_{++} - \mu_{-+})$ *a* $(\mu_{+-} - \mu{--})$ *predstavujú vplyv zmeny úrovne faktoru* A_1 *ak úroveň faktoru* A_2 *ostáva rovnaká (v prvom prípade* $+1$*, v druhom* -1*). Teda tento kontrast predstavuje vplyv* A_1 *spriemerovaný cez obe úrovne* A_2. *Takýto kontrast budeme nazývať* hlavný vplyv *alebo* hlavný efekt *(main effect) faktora* A_1.

Hlavný efekt faktora A_2 *je podobne*

$$\begin{aligned} c_2^T\mu &= \frac{1}{2}(-\mu_{--} - \mu_{+-} + \mu_{-+} + \mu_{++}) \\ &= \frac{1}{2}(\mu_{++} - \mu_{+-} + \mu_{-+} - \mu_{--}) \end{aligned}$$

pre

$$c_2 = \frac{1}{2}(-1, -1, +1, +1)^T.$$

Iný kontrast, ktorý sa často skúma je

$$\begin{aligned} c_3^T\mu &= \frac{1}{2}(\mu_{--} - \mu_{+-} - \mu_{-+} + \mu_{++}) \\ &= \frac{1}{2}(\mu_{++} - \mu_{-+} - (\mu_{+-} - \mu_{--})) \end{aligned}$$

a teda

$$c_3 = \frac{1}{2}(+1, -1, -1, +1)^T,$$

kde $(\mu_{++} - \mu_{-+})$ *predstavuje vplyv faktora* A_1*, keď* A_2 *je na úrovni* 1 *a* $(\mu_{-+} - \mu_{--})$ *predstavuje vplyv faktora* A_1*, keď* A_2 *je na úrovni* -1*. Kontrast* $c_3^T \mu$ *porovnáva tieto dva vplyvy a teda zisťuje, či vplyv* A_1 *závisí od úrovne* A_2 *alebo ekvivalentne či vplyv* A_2 *závisí od úrovne* A_1*. Takýto kontrast sa nazýva* vplyv (efekt) interakcie *(interaction effect) faktorov* A_1 *a* A_2*.*

Kontrasty $c_1^T \mu$*,* $c_2^T \mu$ *a* $c_3^T \mu$ *sú navzájom ortogonálne, keďže* $c_1^T c_2 = c_1^T c_3 = c_2^T c_3 = 0$*. Tieto kontrasty sa dajú získať aj zadefinovaním matice* Z *pomocou Hadamardovej matice* H*.*

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2}} H$$

Potom, keď $\otimes$ *značí Kroneckerov súčin podľa Definície 2.1 z kapitoly 2, vektor*

$$(Z \otimes Z)\mu = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{--} \\ \mu_{+-} \\ \mu_{-+} \\ \mu_{++} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mu_{--} + \mu_{+-} + \mu_{-+} + \mu_{++} \\ -\mu_{--} + \mu_{+-} - \mu_{-+} + \mu_{++} \\ -\mu_{--} - \mu_{+-} + \mu_{-+} + \mu_{++} \\ \mu_{--} - \mu_{+-} - \mu_{-+} + \mu_{++} \end{bmatrix}$$

obsahuje na svojich posledných troch miestach kontrasty $c_1^T \mu$*,* $c_2^T \mu$ *a* $c_3^T \mu$*.*

Postup z Príkladu 4.4 môžeme zovšeobecniť. Nech H je 2×2 Hadamardova matica

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix},$$

nech Z_l sú ortogonálne matice

$$Z_l = \frac{1}{\sqrt{2}} H, \ 1 \leq l \leq k.$$

Označme $V = Z_k \otimes Z_{k-1} \otimes \cdots \otimes Z_1$. Keďže $H \otimes H \otimes \cdots \otimes H$ je Hadamardova, platí

$$V^T V := \frac{1}{M^{1/2}} (H \otimes H \otimes \cdots \otimes H)^T \frac{1}{M^{1/2}} (H \otimes H \otimes \cdots \otimes H) = \frac{1}{M} M I_M = I_M$$

a teda V je ortogonálna matica.

Definujme $M \times 1$ vektor β

$$\beta := V\mu$$

a označme jeho prvky $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k}$, kde $i_l \in \{-1, +1\}$, $l = 1, 2, \ldots, k$ s indexami usporiadanými v štandardnom poradí. Pre $k = 2$ bude $\beta = (\beta_{-,-}, \beta_{+,-}, \beta_{-,+}, \beta_{+,+})^T$,.

Veta 4.5. *Posledných $(M-1)$ prvkov vektora β sú navzájom ortogonálne kontrasty. Navyše ak vyjadríme $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k} = c^T \mu$, potom $c^T c = 1$.*

Dôkaz. Označme ľubovoľný prvok β okrem prvého $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k} = \beta_\tau = c^T \mu$. Vieme, že

$$\beta_\tau = v_\tau^T \mu = \frac{1}{M^{1/2}} h_\tau^T \mu,$$

kde v_τ^T je riadok matice V prislúchajúci kombinácií úrovní τ a h_τ^T je príslušný riadok riadok matice $H \otimes H \otimes \cdots \otimes H$. Teda $c = \frac{1}{M^{1/2}} h_\tau$.
Keďže H je Hadamardova matica, tak k-násobným použitím Vety 2.2 z kapitoly 2 je $H \otimes H \otimes \cdots \otimes H$ Hadamardova matica veľkosti $M = 2^k$. H má v prvom riadku samé 1, potom aj $H \otimes H \otimes \cdots \otimes H$ má v prvom riadku samé 1: prvky prvého riadku výslednej matice totiž vznikli tak, že prvý riadok sa v každom medziprodukte vynásobil vždy prvkom z prvého riadku H, čo je $+1$. Potom, podľa Tvrdenia 1.8 z kapitoly 1, v každom z jej posledných $(M-1)$ riadkov je presne polovica prvkov 1 a polovica prvkov -1. Potom $h_\tau^T 1_M = 0$ a teda aj $c^T 1_M = \frac{1}{2^{M/2}} h_\tau^T 1_M = 0$, čiže β_τ je kontrast.

Keďže V je ortogonálna matica, tak $c^T c = v_\tau^T v_\tau = 1$. Nech dva spomedzi posledných $(M-1)$ prvkov β sú $\beta_{\tau_1} = c_1^T \mu$ a $\beta_{\tau_2} = c_2^T \mu$. Potom $c_1 = v_{\tau_1}$ a $c_2 = v_{\tau_2}$ a teda $c_1^T c_2 = v_{\tau_1}^T v_{\tau_2} = 0$, keďže V je ortogonálna matica. □

Definícia 4.6 (podľa [11]). *Nech $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k}$ je prvok vektora β. Označme*

$$I(i_1 i_2 \ldots i_k) = \{l \in 1, 2, \ldots, k |\, i_l = 1\},$$

teda $I(i_1 i_2 \ldots i_k)$ vyjadruje množinu indexov, ktoré predstavujú úrovne $+1$ príslušných faktorov.

Ak $I(i_1 i_2 \ldots i_k) = i_l$, teda množina je len jednoprvková, hovoríme že $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k}$ je hlavný vplyv (efekt) faktora A_l.

Ak $|I(i_1 i_2 \ldots i_k)| = m \geq 2$, teda $I(i_1 i_2 \ldots i_k) = \{l_1, l_2, \ldots, l_m\}$, hovoríme, že $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k}$ je vplyv (efekt) m-faktorovej interakcie faktorov $A_{l_1}, A_{l_2}, \ldots, A_{l_m}$.

Prvý prvok (v štandardnom usporiadaní) vektora β, teda jediný, pre ktorý platí $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| = 0$ nazývame konštantným prvkom.

Ukážeme, že táto formálna definícia je v zhode s intuitívnymi očakávaniami o hlavných a interakčných vplyvoch. Najprv si treba uvedomiť, čo by mali efekty spĺňať.

Podobne ako v Príklade 4.4, predstavuje hlavný vplyv faktoru l v k-faktorovom experimente vplyv zmeny úrovne faktoru l, keď úroveň všetkých ostatných faktorov sa nemení – teda normovaný súčet rozdielov $\mu_\tau - \mu_{\tau'}$, kde l je v τ na úrovni 1, v τ' je na úrovni -1 a ostatné faktory sú v τ a τ' na rovnakých úrovniach. Čiže

$$K \sum (\mu_\tau - \mu_{\tau'}),$$

kde K je normujúca konštanta závisiaca od počtu faktorov k, suma je cez všetky kombinácie úrovní faktorov $1, \dots, l-1, l+1, \dots, k$,
$\tau = i_1 i_2 \dots i_k,\ i_l = 1,\ \tau' = f_1 f_2 \dots f_k,\ f_l = -1$ a $i_t = f_t$ pre $t \neq l$. Teda aby bol kontrast hlavným efektom, mal by spĺňať

$$K \left(\sum_{i_l=1} \mu_\tau - \sum_{i_l=-1} \mu_\tau \right), \tag{4.3}$$

kde sumácia je cez všetky faktory okrem l.

Analogicky ako v spomínanom príklade, interakčný efekt dvoch faktorov l_1 a l_2 môžeme vyjadriť ako porovnanie vplyvov zmeny faktora l_1 pri rôznych úrovniach faktora l_2, teda

$$K \left(\sum (\mu_{\tau_1} - \mu_{\tau_2}) - \sum (\mu_{\tau_3} - \mu_{\tau_4}) \right), \tag{4.4}$$

kde suma je cez všetky faktory okrem l_1 a l_2 a
v τ_1 je faktor l_1 na úrovni 1, faktor l_2 na úrovni 1,
v τ_2 je faktor l_1 na úrovni -1, faktor l_2 na úrovni 1,
v τ_3 je faktor l_1 na úrovni 1, faktor l_2 na úrovni -1 a
v τ_4 je faktor l_1 na úrovni -1, faktor l_2 na úrovni -1.

Upravme výraz (4.4) na tvar

$$K \sum (\mu_{\tau_1} - \mu_{\tau_2} - \mu_{\tau_3} + \mu_{\tau_4}).$$

Keď si uvedomíme, že v τ_1 a τ_4 platí $i_{l_1} i_{l_2} = 1$ a v τ_2 a τ_3 platí $i_{l_1} i_{l_2} = -1$, potom (4.4) sa dá zapísať

$$K\left(\sum_{i_{l_1} i_{l_2}=1} \mu_{i_1 \dots i_k} - \sum_{i_{l_1} i_{l_2}=-1} \mu_{i_1 \dots i_k}\right). \tag{4.5}$$

Podobne môžeme vyjadriť vplyvy interakcií vyššieho rádu. Vplyv interakcie t faktorov $i_{l_1}, i_{l_2}, \dots, i_{l_t}$ je porovnaním vplyvu $t-1$ faktorov $i_{l_1}, i_{l_2}, \dots, i_{l_{t-1}}$ pri rôznych úrovniach faktoru i_{l_t}. Z toho vyplýva nasledovný zápis interakčných efektov.

Tvrdenie 4.7. *Intuitívne chápaný vplyv interakcie faktorov $l_1, l_2, \dots, l_t$, $t \geq 2$ sa dá zapísať ako*

$$K\left(\sum_{T=1} \mu_{i_1 \dots i_k} - \sum_{T=-1} \mu_{i_1 \dots i_k}\right), \tag{4.6}$$

kde K je normujúca konštanta závisiaca od k, $T = \prod_{u=1}^{t} i_{l_u}$ a sumy sú cez všetky faktory okrem $l_1, l_2, \dots, l_t$. Navyše táto rovnosť platí aj pre hlavné vplyvy, čiže pre $t = 1$, vtedy $T = i_l$.

Dôkaz. Dokážeme matematickou indukciou vzhľadom na t.

(i) Pre $t = 2$ sme tvrdenie dokázali vyššie, viď (4.5).

(ii) Označme $\tau = i_1 i_2 \dots i_k$, $T' = \prod_{u=1}^{t-1} i_{l_u}$ a γ vplyv interakcie faktorov $l_1, l_2, \dots, l_{t-1}$. Potom na základe indukčného predpokladu platí

$$\gamma = K\left(\sum_{T'=1} \mu_\tau - \sum_{T'=-1} \mu_\tau\right),$$

kde suma je cez všetky faktory okrem $l_1, l_2, \dots, l_{t-1}$. Pri danej úrovni faktoru l_t je teda vplyv faktorov $i_{l_1}, i_{l_2}, \dots, i_{l_{t-1}}$

$$\gamma_{l_t = i_{l_t}} := K\left(\sum_{T'=1, l_t = i_{l_t}} \mu_\tau - \sum_{T'=-1, l_t = i_{l_t}} \mu_\tau\right),$$

kde suma je cez všetky faktory okrem $l_1, l_2, \dots, l_t$.

Efekt interakcie t faktorov $i_{l_1}, i_{l_2}, \dots, i_{l_t}$ predstavuje porovnanie vplyvu $t-1$ faktorov $i_{l_1}, i_{l_2}, \dots, i_{l_{t-1}}$ pri faktore t na úrovni 1 s vplyvom $t-1$ faktorov pri faktore t na úrovni -1. Teda efekt interakcie faktorov $i_{l_1}, i_{l_2}, \dots, i_{l_t}$ je $\gamma_{l_t=1} - \gamma_{l_t=-1}$, čiže

$$K\left[\left(\sum_{T'=1, l_t=1} \mu_\tau - \sum_{T'=-1, l_t=1} \mu_\tau\right) - \left(\sum_{T'=1, l_t=-1} \mu_\tau - \sum_{T'=-1, l_t=-1} \mu_\tau\right)\right],$$

kde sumy sú cez všetky faktory okrem $i_{l_1}, i_{l_2}, \ldots, i_{l_t}$. To sa dá upraviť na

$$K\left(\sum_{T'=1, l_t=1} \mu_\tau - \sum_{T'=-1, l_t=1} \mu_\tau - \sum_{T'=1, l_t=-1} \mu_\tau + \sum_{T'=-1, l_t=-1} \mu_\tau\right)$$

a to sa rovná, ak označíme $T = \prod_{u=1}^{t} i_{l_u} = T' i_{l_t}$,

$$K\left(\sum_{T=1} \mu_\tau - \sum_{T=-1} \mu_\tau\right).$$

Že táto rovnosť platí aj pre hlavné vplyvy je zjavné z (4.3). □

Na dôkaz toho, že formálne definované hlavné a interakčné efekty spĺňajú (4.6) budeme potrebovať nasledujúcu lemu.

Lema 4.8. *Nech $B_1, B_2, \ldots, B_k$ sú $s_l \times s_l$ matice pre $1 \leq l \leq k$. Označme ich prvky: $b_{i,j}^{(l)}$ je prvok v i-tom riadku a j-tom stĺpci matice B_l. Nech $A := B_k \otimes B_{k-1} \otimes \ldots \otimes B_1$. Označme riadky matice A $(i_1, i_2, \ldots, i_k)$, $1 \leq i_l \leq s_l \, \forall l$ a jej stĺpce $(j_1, j_2, \ldots j_k)$, $1 \leq j_l \leq s_l \, \forall l$. Potom pre prvky matice A platí*

$$a_{(i_1, i_2, \ldots, i_k),(j_1, j_2, \ldots j_k)} = \prod_{l=1}^{k} b_{i_l, j_l}^{(l)}$$

Dôkaz. Lema priamo vyplýva z definície Kroneckerovho súčinu, keď riadky a stĺpce výslednej matice značíme kombináciami prvkov jednotlivých matíc B_l. Formálne dokážeme matematickou indukciou vzhľadom na k.

(i) Nech $B_1 = (b_{i,j}^{(1)}), B_2 = (b_{i,j}^{(2)})$, $A = B_2 \otimes B_1$, jej prvky označme $a_{(i_1, i_2)(j_1, j_2)}$.

$$A = B_2 \otimes B_1 = \begin{pmatrix} b_{11}^{(2)} B_1 & b_{12}^{(2)} B_1 & \cdots \\ b_{21}^{(2)} B_1 & b_{22}^{(2)} B_1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix},$$

teda prvky v každom bloku (i_2, j_2) sú $b_{i_2, j_2}^{(2)} b_{i_1, j_1}^{(1)} \forall i_1 \forall j_1$, takéto prvky sú značené $a_{(i_1, i_2),(j_2, j_2)}$. Teda $a_{(i_1, i_2),(j_1, j_2)} = b_{i_2, j_2}^{(2)} b_{i_1, j_1}^{(1)}$, čiže tvrdenie platí pre súčin 2 matíc.

(ii) Predpokladajme, že lema platí pre súčin ľubovoľných $k-1$ matíc. Nech $A := B_k \otimes B_{k-1} \otimes \ldots \otimes B_1 = B_k \otimes C$, kde $C = B_{k-1} \otimes B_{k-2} \otimes \ldots \otimes B_1$ s prvkami $c_{(i_1, i_2, \ldots, i_{k-1}),(j_1, j_2, \ldots j_{k-1})}$ značenými požadovaným spôsobom. Pre prvok A platí analogicky ako v prvej časti dôkazu $a_{(i_1,i_2,\ldots,i_k),(j_1,j_2,\ldots j_k)} = b^{(k)}_{i_k,j_k} c_{(i_1,i_2,\ldots,i_{k-1}),(j_1,j_2,\ldots j_{k-1})}$. Z indukčného predpokladu vyplýva, že

$$c_{(i_1,i_2,\ldots,i_{k-1}),(j_1,j_2,\ldots j_{k-1})} = \prod_{l=1}^{k-1} z^{(l)}_{i_l,j_l}$$

a teda

$$a_{(i_1,i_2,\ldots,i_k),(j_1,j_2,\ldots j_k)} = \prod_{l=1}^{k} z^{(l)}_{i_l,j_l}.$$

□

Pri ďalšom skúmaní faktorového dizajnu využijeme ešte jednu technickú lemu o Kroneckerovom súčine.

Lema 4.9. *Pre Kroneckerov súčin dvoch matíc A, B platí*

$$(A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$$

Dôkaz. Nech $A = (a_{ij})$ je $m_1 \times m_2$ matica a $B = (b_{ij})$ je $n_1 \times n_2$ matica. Potom v blokovom zápise platí

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix},$$

teda blok (i,j) matice $A \otimes B$ je $a_{ij}B$. Potom blok (i,j) matice $(A \otimes B)^T$ je $a_{ji}B^T$. Zároveň

$$A^T \otimes B^T = \begin{pmatrix} a_{11}B^T & a_{21}B^T & \cdots \\ a_{12}B^T & a_{22}B^T & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix},$$

teda blok (i,j) matice $A^T \otimes B^T$ je zhodný s blokom (i,j) $(A \otimes B)^T$ pre ľubovoľné i,j, čiže matice sa rovnajú. □

Veta 4.10. *Nech $|I(i_1 i_2 \ldots i_k)| = t$, potom pre $\beta_{i_1 i_2 \ldots i_k}$ platí rovnosť* (4.6) *z Tvrdenia* 4.7.

Dôkaz. Označme $\tau = i_1 \ldots i_k$, nech $|I(\tau)| = t$. Označme $l_1, l_2, \ldots, l_t$ tie faktory, ktoré sú v τ na úrovni 1. Vieme, že

$$\beta = V\mu = Z_k \otimes Z_{k-1} \otimes \cdots \otimes Z_1 \mu = \frac{1}{2^{k/2}} H_k \otimes H_{k-1} \otimes \cdots \otimes H_1,$$

kde

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Označme prvky matice H h_{ij}, kde riadky a stĺpce sú značené úrovňami faktorov i a j. Teda v prvom riadku je $i = -1$, v druhom riadku je $i = 1$ a podobne pre stĺpce. Označme stĺpce matice V kombináciami úrovní, jej riadky jednotlivými kontrastami a teda jej prvky $v_{\beta_{f_1 \dots f_k},(j_1 \dots j_k)}$.

Potom podľa Lemy 4.8 platí

$$v_{\beta_{f_1 \dots f_k},(j_1 \dots j_k)} = \frac{1}{2^{k/2}} \prod_{l=1}^{k} h_{f_l j_l},$$

teda pre β_τ platí

$$\beta_\tau = \sum_{\tau'} v_{\beta_\tau,\tau'} \mu_{\tau'} = \frac{1}{2^{k/2}} \sum_{\tau'} \prod_{l=1}^{k} h_{i_l j_l} \mu_{\tau'}, \tag{4.7}$$

kde sumácia je cez všetky kombinácie úrovní $\tau' = j_1 \dots j_k$. Keďže $\prod\limits_{l} h_{i_l j_l}$ môže nadobúdať iba hodnoty 1 alebo -1, zisťujeme len aké znamienko je pred rôznymi $\mu_{\tau'}$.

Prvok $h_{i_l j_l}$ nadobúda hodnotu -1, teda mení znamienko súčinu, iba ak $i_l = 1$ a $j_l = -1$. Teda $h_{i_l j_l}$ má šancu zmeniť znamienko súčinu iba ak $i_l = 1$. Potom celý produkt môžeme zapísať ako produkt cez množinu $l_1, l_2, \dots, l_t$. Čiže

$$\prod_{l=1}^{k} h_{i_l j_l} = \prod_{i_l=1} h_{i_l j_l} = \prod_{u=1}^{t} h_{i_{l_u} j_{l_u}}.$$

Označme $T = \prod\limits_{u=1}^{t} h_{i_{l_u} j_{l_u}}$. Potom $\mu_{\tau'}$ je vo výraze (4.7) so znamienkom + ak $T = 1$ a so znamienkom $-$ ak $T = -1$.

Teda β_τ môžeme zapísať

$$\beta_\tau = \frac{1}{2^{k/2}} \sum_{\tau'} \prod_{u=1}^{t} h_{i_{l_u} j_{l_u}} \mu_{\tau'} = \frac{1}{2^{k/2}} \left(\sum_{T=1} \mu_{\tau'} - \sum_{T=-1} \mu_{\tau'} \right).$$

□

Teda formálna definícia hlavných a interakčných vplyvov je v zhode s intuitívnym vnímaním týchto vplyvov.

Keďže V je ortogonálna matica a $\beta = V\mu$, tak $\mu = V^T\beta$. k-násobným použitím Lemy 4.9 platí $V^T = (Z_k \otimes Z_{k-1} \otimes \cdots \otimes Z_1)^T = (Z_k^T \otimes Z_{k-1}^T \otimes \cdots \otimes Z_1^T)$, čiže

$$\mu = (Z_k^T \otimes Z_{k-1}^T \otimes \cdots \otimes Z_1^T)\beta.$$

Potom model (4.2) môžeme pomocou efektov zapísať

$$Y = X(Z_k^T \otimes Z_{k-1}^T \otimes \cdots \otimes Z_1^T)\beta + \varepsilon. \tag{4.8}$$

Tým sme zapísali model tak, že vyjadruje vplyvy faktorov a ich interakcií na meranú veličinu.

Poznamenajme, že pre maticu V platí: keďže

$$Z_l = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix},$$

tak podľa Lemy 4.8 je každý prvok v prvom riadku matice V rovný

$$\prod_{l=1}^{k} z(-1, j_l) = \prod_{l=1}^{k} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2^{k/2}}.$$

Teda prvý stĺpec matice V^T sa skladá zo samých $\frac{1}{2^{k/2}}$. Teda, ekvivalentne, $H^T \otimes \ldots \otimes H^T$ je seminormalizovaná.

4.2 Ortogonálne polia

Pri skúmaní čiastočného faktorového dizajnu využijeme tzv. Ortogonálne polia. Najprv ale čitateľa s porblematikou ortogonálnych polí oboznámime a ukážeme ako sú s nimi prepojené Hadamardove matice.

Definícia 4.11 (podľa [11]). *Nech S je množina s prvkov. $N \times k$ matica A sa nazýva* ortogonálne pole (orthogonal array) s s úrovňami, so silou t a indexom λ *(pre t spĺňajúce $0 \leq t \leq k$) ak každá $N \times t$ podmatica A obsahuje každú usporiadanú t-ticu prvkov z S presne λ-krát ako riadok. Značíme ho $OA(N, k, s, t)$.*

Index λ sa v zápise ortogonálneho poľa neuvádza, keďže je priamo vypočítateľný zo zvyšných parametrov.

Tvrdenie 4.12. *Nech A je $OA(N, k, s, t)$ s indexom λ, potom $\lambda = N/s^t$.*

Dôkaz. Počet rozdielnych t-tic prvkov z S je s^t. Vezmime ľubovoľnú $N \times t$ podmaticu A' matice A. Potom každá t-tica sa vyskytuje ako riadok A' rovnako často. Celkovo obsahuje A' N riadkov a teda každá t-tica sa vyskytuje ako riadok A' presne N/s^t-krát. □

Ak $s > 2$, prvky množiny S sa značia zvyčajne $0, 1, \ldots, s-1$. V tejto práci sa však budeme zaoberať najmä ortogonálnymi poľami s 2 úrovňami, vtedy S bude zvyčajne $\{-1, 1\}$, v súlade so značením úrovní vo faktorovom experimente.

Sila t poľa A značí, že ak vyberieme ľubovoľných t stĺpcov, bude sa v nich vyskytovať každá možná t-tica prvkov S a navyše sa budú vyskytovať rovnako často.

Príklad 4.13. *Nasledovné je $OA(2, 5, 2, 1)$, keďže je to 2×5 pole s prvkami z množiny $\{-1, 1\}$ veľkosti 2 a v každom stĺpci obsahuje -1 aj 1 presne raz (má teda index $\lambda = 1$).*

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Príklad 4.14. *Každá dvojica stĺpcov 8×3 poľa A uvedeného nižšie obsahuje ako riadok každú uspriadanú dvojicu prvkov z množiny $\{-1, 1\}$, čiže $(-1, -1), (-1, 1), (1, -1), (1, 1)$, presne 2-krát (má teda index $\lambda = 2$). Teda je to ortogonálne pole $OA(8, 3, 2, 2)$.*

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Lema 4.15. *Ak A je $OA(N, k, s, t)$ a $m < t$, potom A je aj $OA(N, k, s, m)$.*

Dôkaz. Nech A je $OA(N, k, s, t)$. Vezmime bez ujmy na všeobecnosti prvých m stĺpcov A a označme nimi vytvorenú maticu A'. Ak by sme nevzali prvých m stĺpcov, mohli by sme permutovať stĺpce A a vytvoriť ortogonálne pole B, ktoré je $OA(N, k, s, t)$ a jeho prvých m stĺpcov tvorí A'. Ukážeme, že A' obsahuje každú m-ticu prvkov z S ako riadok presne $\lambda = N/s^m$-krát.

Uvážme t stĺpcov A obsahujúcich stĺpce A' doplnené o ľubovoľných iných $t-m$ stĺpcov A, označme nimi tvorenú maticu A''. Teda $A'' = [A'\ C]$. Označme v ľubovoľnú m-ticu prvkov z S. Potom počet rozdielnych t-tic prvkov z S začínajúcich na v je s^{t-m}. Zároveň, keďže A je sily t, každá t-tica sa vyskytuje ako riadok A'' N/s^t-krát. Výskyt v ako riadku v A' je súčtom výskytov rozdielnych t-tic v A'' začínajúcich na v, čiže

$$s^{t-m}\frac{N}{s^t}$$

a to sa rovná N/s^m. Teda A je sily m. □

Lema 4.16. *Nech A je $OA(N,k,s,t)$, potom ľubovoľných $m \leq t$ stĺpcov A tvorí $OA(N,m,s,m)$.*

Dôkaz. Nech A je $OA(N,k,s,t)$. Podľa Lemy 4.15 je A aj $OA(N,k,s,m)$. Nech A' je $N\times m$ podmatica A. Keďže A má silu m, obsahuje A' každú m-ticu ako riadok presne N/s^m-krát. Zároveň je A' $N\times m$ matica s prvkami z s-prvkovej množiny. Teda A' je $OA(N,m,s,m)$. □

Teraz môžeme ukázať prepojenie Ortogonálnych polí a Hadamardových matíc.

Veta 4.17. *Ortogonálne pole $OA(4\lambda, 4\lambda-1, 2, 2)$ existuje práve vtedy, keď existuje Hadamardova matica veľkosti 4λ.*

Dôkaz (na základe [11]). Nech A je $OA(4\lambda, 4\lambda{-}1, 2, 2)$ pre úrovne z množiny $S{=}\{-1,1\}$. Označme tiež $N = 4\lambda$, teda A je $N\times(N-1)$ matica s prvkami z množiny $\{\pm1\}$. Nech $H = [1_N\, A]$, teda H je $N\times N$ matica s prvkami z množiny $\{\pm1\}$. Ukážeme, že H je Hadamardova matica veľkosti N.

$$H^TH = \begin{bmatrix} 1_N^T \\ A^T \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1_N & A \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & 1_N^TA \\ A^T1_N & A^TA \end{bmatrix}.$$

Označme prvky matice A a_{ij} a jej stĺpce a_j. Keďže A má silu 2, tak pre jej ľubovoľné dva stĺpce a_j, a_k platí že obsahujú v riadkoch každú z $(-1,-1)$, $(1,-1)$, $(-1,1)$, $(1,1)$ presne $(N/4)$-krát. Teda $n_+^- := |\{i|a_{ij} = -1, a_{ik} = 1\}| = \frac{N}{4}$ a podobne definované $n_-^+ = n_-^- = n_+^+ = \frac{N}{4}$. Počet prvkov stĺpca a_j, ktoré sa rovnajú 1 je teda $n_+^+ + n_-^+ = \frac{N}{2}$ a takisto počet -1 v j-tom stĺpci je $\frac{N}{2}$.

Potom

$$1_N^Ta_i = \sum_{j=1}^{N} a_ij = \sum_{i:a_i=1} 1 + \sum_{i:a_i=-1}(-1) = \frac{N}{2} - \frac{N}{2} = 0$$

a teda $1_N^T A = 0_{N-1}^T$ a $A^T 1_N = (1_N^T A)^T = 0_{N-1}$.

Zároveň pre $j \neq k$:

$$\begin{aligned} a_j^T a_k &= n_+^+ \cdot 1 \cdot 1 + n_-^+ \cdot 1 \cdot (-1) + n_+^- \cdot (-1) \cdot 1 + n_-^- \cdot (-1) \cdot (-1) = \\ &= \frac{N}{4} - \frac{N}{4} - \frac{N}{4} + \frac{N}{4} = 0 \end{aligned}$$

a pre ľubovoľný stĺpec

$$a_j^T a_j = \sum_{i=1}^{N} a_{ij}^2 = N \cdot 1 = N$$

a teda $A^T A = N I_{N-1}$.

Potom

$$H^T H = \begin{bmatrix} N & 0_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & N I_{N-1} \end{bmatrix} = N I_N,$$

čiže H je (seminormalizovaná) Hadamardova matica. Tým je dokázaný jeden smer ekvivalencie.

Pre dôkaz druhej implikácie opäť označme $N = 4\lambda$. Nech H_N je seminormalizovaná Hadamardova matica veľkosti N, nech $S = \{-1, 1\}$. Vynechaním prvého stĺpca vznikne $N \times (N-1)$ matica, označme ju A. Potom spĺňa A definíciu ortogonálneho poľa $OA(4\lambda, 4\lambda - 1, 2, 2)$, keďže má správnu veľkosť, jej prvky sú z dvojprvkovej množiny S a A má silu 2 podľa Tvrdenia 1.8 v kapitole 1: podmatica tvorená ľubovoľnými dvoma rôznymi stĺpcami A obsahuje ako riadok (-1,-1), (1,-1), (-1,1), (1,1) presne $(N/4)$-krát, čiže λ-krát. □

Veta 4.18. *Ortogonálne pole $OA(N, k, 2, 2u)$ existuje práve vtedy, keď existuje ortogonálne pole $OA(2N, k+1, 2, 2u+1)$*

Dôkaz (na základe [11]). Nech A je $OA(N, k, 2, 2u)$ s indexom λ, nech $S = \{1, -1\}$. Označme

$$B = \begin{bmatrix} A & -1_N \\ -A & 1_N \end{bmatrix}_{2N \times k+1}.$$

Je zjavné, že $-A$ je tiež $OA(N, k, 2, 2u)$, keďže vznikla len preznačením prvkov A. Ukážeme, že B je $OA(2N, k+1, 2, 2u+1)$, takisto s indexom λ. Označme $t = 2u + 1$. Nech B' je $2N \times t$ podmatica B. Môžu nastať dva prípady.

(i) Posledný stĺpec B je zároveň (posledným) stĺpcom B'. Potom každá $(t-1)$-tica z prvkov 1,-1 sa nachádza v prvých $t - 1$ stĺpcoch prvých N riadkov B' λ-krát, keďže

A má silu $t-1$. Potom každá t-tica končiaca na -1 sa nachádza ako jeden z prvých N riadkov B' presne λ-krát. Teda každá t-tica končiaca na -1 sa nachádza ako riadok v celej B' presne λ-krát, keďže v druhých N riadkoch končí každý riadok na 1. Podobne keďže $-A$ má silu $t-1$, každá t-tica končiaca na 1 sa nachádza ako riadok v druhých N riadkoch B' a teda ako riadok v celej B' presne λ-krát. Teda v takom prípade je splnená definícia pre silu t.

(ii) Posledný stĺpec B nie je stĺpcom B'. Bez ujmy na všeobecnosti predpokladajme, že B' sa skladá z prvých t stĺpcov B. Nech $v = v_1 v_2 \dots v_t$ je t-tica prvkov z S. Definujme $n(v)$ počet riadkov A začínajúcich na v. Potrebujeme teda dokázať, že počet riadkov B začínajúcich na v je λ. Teda, že počet riadkov A začínajúcich na v sčítaný s počtom riadkov $-A$ začínajúcich na v je λ, čiže $n(v) + n(-v) = \lambda$.

Nech v' je t-tica, ktorá sa líši od v práve na j-tom mieste. Označme l $(t-1)$-ticu vytvorenú vynechaním j-teho miesta v. Vieme, že A má silu $t-1$ a teda ak vyberieme tých $t-1$ jej stĺpcov, v ktorých sú v a v' rovnaké, bude sa v nich vyskytovať l λ-krát. To je zároveň počet riadkov A začínajúcich na v sčítaný s počtom riadkov A začínajúcich na v', keďže na j-tom mieste v ľubovoľnom riadku A sa nachádza buď 1 alebo -1 a vznikne tak z l buď v alebo v'. Teda $n(v) + n(v') = \lambda$.

Nech v'' je taká t-tica, ktorá sa líši od v presne na dvoch miestach, nech sú to j_1 a j_2. Potom j-tica, ktorá sa líši od v práve na j_1-tom mieste, sa teda zhoduje s v'' na j_1-tom mieste, ale líši sa od v'' na j_2-tom mieste a všade inde sa s v'' zhoduje. Označme ju v'. Teda v' sa líši od v aj v'' na presne jednom mieste. Potom $n(v) - n(v'') = n(v) - n(v') + n(v') - n(v'') = \lambda - \lambda = 0$, teda $n(v) = n(v'')$.

Matematickou indukciou sa dá dokázať, že pre w a w', ktoré sa líšia na párnom počte miest, platí $n(w) = n(w')$. Prvý krok, pre t-tice, ktoré sa líšia na 2 miestach, sme dokázali vyššie. Predpokladajme, že tvrdenie platí pre každé dve t-tice, ktoré sa líšia na $2k$ miestach. Nech w a w' sa líšia na $2k+2$ miestach pre $k \geq 1$. Zvoľme w'' takú t-ticu, ktorá sa zhoduje s w a w' na ich rovnakej časti a spomedzi $2k+2$ miest, na ktorých sa w a w' líšia, sa zhoduje s w na presne dvoch miestach. Teda w'' sa líši od w na $2k+2-2 = 2k$ miestach a od w' sa líši na 2 miestach. Podľa indukčného predpokladu platí $n(w) = n(w'')$ a podľa dôkazu prvého kroku platí aj $n(w') = n(w'')$. Potom $n(w) - n(w') = n(w) - n(w'') + n(w'') - n(w') = 0 + 0 = 0$, teda $n(w) = n(w')$

a tým je pomocné tvrdenie dokázané.

Vráťme sa k v a v', ktoré sa líšia na jednom mieste. Potom v' sa líši od $-v$ všade okrem jedného miesta, čiže na $t-1 = 2u+1-1 = 2u$ miestach, čo je párne číslo. Teda platí $n(-v) = n(v')$. Keďže sme ukázali, že $n(v)+n(v') = \lambda$, tak počet riadkov B začínajúcich na v je $n(v)+n(-v) = n(v)+n(v') = \lambda$, čo sme chceli dokázať.

Na dôkaz opačnej implikácie predpokladajme, že A je $OA(2N, k+1, 2, 2u+1)$ s indexom λ, pričom $S = \{-1, 1\}$. Podľa Lemy 4.15 pre $m = 1$ je A sily 1, teda každý jej stĺpec obsahuje $2N/2 = N$-krát -1 a N-krát 1. Teda špeciálne to platí aj pre prvý stĺpec. Môžeme predpokladať, že prvých N riadkov A začína na -1, keďže permutovaním riadkov ostane stále ortogonálne pole $OA(2N, k+1, 2, 2u+1)$. Označme maticu B tvorenú prvými N riadkami A vynechaním prvého stĺpca. Teda

$$A = \begin{bmatrix} -1_N & B \\ 1_N & C \end{bmatrix}.$$

Ukážeme, že $N \times k$ matica B je $OA(N, k, 2, 2u)$ s indexom λ. Označme $t := 2u+1$. Nech v je $(t-1)$-tica prvkov z S. Vezmime ľubovoľných $t-1$ stĺpcov B, potrebujeme dokázať, že sa v nich vyskytuje v ako riadok λ-krát. Ak sa pozrieme na príslušných $(t-1)$ stĺpcov A a pridáme k nim prvý stĺpec, máme t stĺpcov. Keďže A má silu t, vyskytuje sa v nich každá t-tica ako riadok λ-krát. Teda obsahujú t-ticu $(-1, v)$ λ-krát. $(-1, v)$ začína na -1 a teda sa vyskytuje iba v prvých N riadkoch. Potom vybrané stĺpce A bez prvého stĺpca obsahujú v medzi prvými N riadkami λ-krát. Teda ľubovoľných $t-1$ stĺpcov B obsahuje v λ-krát, čo sme chceli dokázať. □

Dôsledok 4.19. *Ortogonálne pole $OA(8\lambda, 4\lambda, 2, 3)$ existuje práve vtedy, keď existuje Hadamardova matica veľkosti 4λ.*

Dôkaz. Podľa Vety 4.17 existuje $OA(4\lambda, 4\lambda-1, 2, 2)$ práve vtedy, keď existuje Hadamardova matica veľkosti 4λ a podľa Vety 4.18 existuje $OA(8\lambda, 4\lambda, 2, 3)$ práve vtedy, keď existuje $OA(4\lambda, 4\lambda-1, 2, 2)$. □

4.3 Čiastočý faktorový dizajn

Ako sme už spomínali, množstvo meraní $N = M$ potrebné na uskutočnenie úplného faktorového experimentu môže byť veľmi vysoké. Už pri $k = 7$ faktoroch je počet meraní $N = 2^7 = 128$, čo môže byť z časového alebo finančného hľadiska neúnosné. V takých prípadoch sa skúmajú iba niektoré vplyvy a podľa toho sa uskutočnia merania iba pre niektoré kombinácie úrovní, tie tvoria *čiastočný (neúplný) faktorový experiment.*

Táto podkapitola naväzuje na podkapitolu 4.1 Faktorový dizajn, značenie teda ostáva rovnaké.

Predpokladajme, že niektoré prvky β sú zanedbateľné, a teda môžu byť položené nule. Potom model (4.8) sa dá zapísať

$$Y = XU\gamma + \varepsilon, \tag{4.9}$$

kde γ je $R \times 1$ vektor zložený z R prvkov vektoru β, ktoré sme nepoložili nule, U je $M \times R$ podmatica matice $Z_k^T \otimes Z_{k-1}^T \otimes \cdots \otimes Z_1^T$ pozostávajúca z R stĺpcov prislúchajúcich k R prvkom β, ktoré ostali v γ.

Definícia 4.20. *Nech platí model* (4.9)*, potom matica C taká, že*

$$C = U^T X^T XU$$

sa nazýva informačná matica *pre γ v modeli* (4.9).

Keď v modeli (4.9) nepotrebujeme odhadnúť všetky parametre, ktoré sa v ňom vyskytujú, je vhodné ich rozdeliť do dvoch častí

$$Y = XU_1\gamma_1 + XU_2\gamma_2, \tag{4.10}$$

kde prvky γ, ktoré chceme odhadnuť dáme do $R_1 \times 1$ vektora γ_1. Do $R_2 \times 1$ vektora γ_2 dáme ostatné prvky modelu, teda tie, ktoré neodhadujeme, hoci sme ich nezanedbali.

Definícia 4.21 (podľa [8])**.** Zovšeobecnenou inverznou maticou *k ľubovoľnej matici A nazývame takú maticu A^-, pre ktorú platí*

$$AA^-A = A.$$

Definícia 4.22 (podľa [8], [11])**.** *Nech platí model* (4.10)*, definujme*

$$C = U_1^T X^T (I_N - XU_2(U_2^T X^T XU_2)^- U_2^T X^T)XU_1,$$

kde horný index $^-$ označuje zovšeobecnenú inverznú maticu. Potom C sa nazýva informačná matica *pre γ_1 v modeli* (4.10).

Ak γ_2 neobsahuje žiadne parametre, tak $I_N - XU_2(U_2^T X^T XU_2)^- U_2^T X^T$ interpretujeme ako I_N a teda $C = U_1^T X^T XU_1 = U^T X^T XU$, čo je informačná matica pre γ nerozdeleného modelu (4.9).

Tvrdenie 4.23 (podľa [8], [11]). *Všetky prvky γ_1 sú odhadnuteľné, práve vtedy keď C je regulárna. Potom odhad metódou najmenších štvorcov je BLUE (najlepší nevychýlený lineárny odhad) a je rovný $\hat{\gamma}_1 = C^{-1}U_1^T X^T(I_N - XU_2(U_2^T X^T XU_2)^- U_2^T X^T)Y$ pre neprázdny vektor γ_2. Pre $\gamma_1 = \gamma$ je odhad metódou najmenších štvorcov $\hat{\gamma} = C^{-1}U^T X^T Y = (U^T X^T XU)^{-1}U^T X^T Y$.*

Variancia odhadu γ_1 je potom $\mathrm{Var}(\hat{\gamma}_1) = \sigma^2 C^{-1}$.

Dôkaz. Dôkaz v [8]. □

Keďže jedným z cieľov dizajnu experimentu je mať pre odhad parametrov čo najmenšiu varianciu a tá je rovná $\sigma^2 C^{-1}$, štatistici definovali rôzne typy optimálnych dizajnov, ktoré v istom zmysle minimalizujú C^{-1} a teda varianciu odhadu.

Definícia 4.24 (podľa [8]). *Dizajn D z množiny $\mathfrak{M}$ sa nazýva*

A-optimálny*, ak stopa C^{-1} je minimálna spomedzi všetkých dizajnov z množiny $\mathfrak{M}$,*

D-optimálny*, ak determinant C^{-1} je minimálny spomedzi všetkých dizajnov z množiny $\mathfrak{M}$,*

E-optimálny*, ak najväčšia vlastná hodnota C^{-1} je minimálna spomedzi všetkých dizajnov z množiny $\mathfrak{M}$.*

Poznamenajme, že keďže táto definícia uvažuje všeobecný dizajn, Definícia 3.5 z kapitoly 3 je jej špeciálnym prípadom. Pre dizajn váženia X je totiž informačná matica $X^T X$. Keďže má však jednoduchý zápis, zvyčajne sa nepomenúva, aj keď v niektorých prácach (napr. [15]) sa nazýva informačnou maticou.

[8] a [14] uvádzajú zovšeobecnenie Definície 4.24.

Definícia 4.25 (podľa [8], [14]). *Nech C je informačná matica pre dizajny z množiny $\mathfrak{M}$. Dizajn D z množiny $\mathfrak{M}$ sa nazýva* univerzálne optimálny *ak minimalizuje $\phi(C)$ pre každú funkciu ϕ zobrazujúcu z množiny kladne definitných matíc veľkosti K do reálnych čísel, ktorá spĺňa* *(i)* ϕ *je konvexná;*

(ii) $\phi(c_1M_1 + c_2M_2) \geq \phi(cM_1)$ *pre každé skaláry* c_1, c_2, c *spĺňajúce, že* $c \geq c_1 + c_2$, $c_1M_1 + c_2M_2$ *je kladne definitná a* cM_1 *je kladne definitná;*

(iii) $\phi(M)$ *je permutačne invariantná, t.j.* $\phi(PMP^T) = \phi(M)$ *pre každú kladne definitnú maticu* M *a pre každú permutačnú maticu* P *veľkosti* K.

Tvrdenie 4.26. *Podľa* [8] *platí, že ak je dizajn univerzálne optimálny, tak je aj D-, A- a E- optimálny, keďže funkcie*

$\phi_1(M) = \ln(\det(M^{-1}))$

$\phi_2(M) = \mathrm{tr}(M^{-1})$

$\phi_3(M) =$*najväčšia vlastná hodnota* M^{-1}

spĺňajú vlastnosti (*i*), (*ii*) *a* (*iii*) *z definície* 4.25.

Je zrejmé, že ϕ_2 *a* ϕ_3 *predstavujú A- a E- optimalitu. Keďže argument minima funkcie* $\ln(\phi)$ *je ten istý ako argument funkcie* ϕ, *tak* ϕ_1 *predstavuje D-optimalitu.*

Definujme ďalšie vlastnosti charakterizujúce čiastočný faktorový dizajn.

Definícia 4.27 (podľa [10])**.** *Hovoríme, že čiastočný faktorový dizajn je* rozlíšenia r *(resolution* r*), ak spĺňa*

(i) ak r *je nepárne, tak všetky hlavné efekty a všetky efekty nanajvýš* $\frac{r-1}{2}$ *faktorov sú odhadnuteľné, ak všetky efekty viac ako* $\frac{r-1}{2}$ *faktorov sú zanedbané.*

(ii) ak r *je párne, tak všetky hlavné efekty a všetky efekty nanajvýš* $\frac{r}{2} - 1$ *faktorov sú odhadnuteľné, ak všetky efekty aspoň* $\frac{r}{2} + 1$ *faktorov sú zanedbané.*

Čiastočný faktorový dizajn sa nazýva nasýtený, *ak počet odhadovaných parametrov je rovnaký ako počet meraní* N.

Hovoríme, že čiastočný faktorový dizajn je ortogonálny, *ak ľubovoľné dva odhady efektov sú nekorelované.*

Poznamenajme, že zvyčajne okrem hlavných a interakčných efektov odhadujeme aj konštantný prvok $\beta_{-1,\dots,-1}$ a teda zvyčajne je nasýtený taký dizajn, ktorý odhaduje $N - 1$ efektov a konštantný prvok.

Veta 4.28. *Nech existuje čiastočný faktorový dizajn D, taký, že jeho informačná matica je $C_D = \frac{N}{M} I_{R_1}$. Potom D je univerzálne optimálny čiastočný faktorový dizajn rozlíšenia $t+1$, teda $\mathfrak{M}$ z Definície 4.25 je množina všetkých čiastočných faktorových dizajnov rozlíšenia $t+1$.*

Dôkaz. Táto veta je dokázaná v [8]. □

Ortogonálne polia sú veľmi úzko prepojené s faktorovým dizajnom: ortogonálne pole $OA(N,k,2,t)$, určuje N kombinácií úrovní k faktorov v 2^k faktorovom experimente. Teda i-ty riadok ortogonálneho poľa predstavuje kombinácie úrovní na ktorých uskutočňujeme i-te meranie. Čiže ortogonálne pole predstavuje čiastočný faktorvý dizajn F. Takýto dizajn F bude mať užitočné vlastnosti, ako ukazuje nasledujúca veta.

Veta 4.29. *Ak čiastočný faktorový dizajn F je $OA(N,k,2,t)$, $t \geq 2$, potom je ortogonálny a rozlíšenia $t+1$.*

Dôkaz (na základe [11]). Nech neúplný faktorový dizajn F je $OA(N,k,2,t)$. Pripomeňme, že $C = U_1^T X^T (I_N - XU_2(U_2^T X^T XU_2)^- U_2^T X^T) XU_1$.

Ak t je párne, $r = t+1$ je nepárne. Potom uvažujeme $\gamma_2 = \emptyset$ a $\gamma_1 = \gamma$ pozastávajúcu z konštantného parametru, hlavných vplyvov a vplyvov nanajvýš $\frac{r-1}{2} = \frac{t}{2}$ faktorov. Stačí v takom prípade ukázať, že stĺpce matice XU sú ortogonálne. Potom $C = U^T X^T XU$ je diagonálna matica. Navyše je v takom prípade regulárna, keďže stĺpce XU nie sú nulové a teda diagonála C je nenulová.

Ak t je nepárne, $r = t+1$ je párne. Potom uvažujeme γ_2 pozostávajúcu z interakčných efektov $\frac{r}{2} = \frac{t+1}{2}$ faktorov a γ_1 pozostávajúcu z konštantného parametra, hlavných efektov a interakčných efektov $\frac{r}{2} - 1 = \frac{t-1}{2}$ faktorov. V takom prípade stačí ukázať, že stĺpce matice XU_1 sú navzájom ortogonálne a že každý stĺpec XU_1 je ortogonálny na každý stĺpec XU_2. Ak to dokážeme, potom môžeme upraviť C na $C = U_1^T X^T XU_1 - U_1^T X^T XU_2(U_2^T X^T XU_2)^- U_2^T X^T XU_1$. Potom $U_1^T X^T XU_2(U_2^T X^T XU_2)^- U_2^T X^T XU_1 = 0_{R_1}$ a $U_1^T X^T XU_1$ je diagonálna matica. Keďže stĺpce XU_1 nie sú nulové a teda diagonála je nenulová, tak $C = U_1^T X^T XU_1$ je regulárna diagonálna matica.

Ukážeme teda, že v každom prípade je C regulárna diagonálna matica, potom variancia odhadu najmenších štvorcov bude $\sigma^2 C^{-1}$, čo bude opäť diagonálna matica, teda jednotlivé odhady budú nekorelované, dizajn bude ortogonálny.

Označme riadky aj stĺpce $X_{(N\times M)}$ kombináciami úrovní. Teda X obsahuje riadky prislúchajúcie kombináciam úrovní daných faktorovým dizajnom F a stĺpec pre každú možnú kombináciu úrovní. Označme riadky $U_{(M\times R)}$ kombináciami úrovní a stĺpce U parametrami β_τ.

Ak je prvok $x_{(j_1,j_2\dots,j_k)\beta_{i_1 i_2\dots i_k}}$ matice XU v riadku $(j_1,j_2\dots,j_k)$ a stĺpci $\beta_{i_1 i_2\dots i_k}$, potom to značí, že vznikol vynásobením riadku $(j_1,j_2\dots,j_k)$ matice X a stĺpca $\beta_{i_1 i_2\dots i_k}$ matice U. Keďže v riadku $(j_1,j_2\dots,j_k)$ matice X je 1 práve na mieste $(j_1,j_2\dots,j_k),(j_1,j_2\dots,j_k)$, tak je teda prvok $(XU)_{(j_1,j_2\dots,j_k)\beta_{i_1 i_2\dots i_k}}$ rovný prvku $(j_1,j_2\dots,j_k)$ matice U v stĺpci $\beta_{i_1 i_2\dots i_k}$, teda $u_{(j_1,j_2\dots,j_k)\beta_{i_1 i_2\dots i_k}}$.

Keďže U vznikla výberom R stĺpcov $Z_k^T\otimes Z_{k-1}^T\otimes\dots\otimes Z_1^T$, tak pre jej prvok u podľa Lemy 4.8 platí

$$u_{(j_1,j_2\dots,j_k)\beta_{i_1 i_2\dots i_k}}=\prod_{l=1}^{k} w_{j_l,i_l},$$

kde w_{j_l,i_l} je prvok (j_l,i_l) matice Z_l^T. Ak označíme prvky matíc Z_l $z(i,j)$, tak $z(i_l,j_l)=w_{j_l,i_l}$. Teda pre kombináciu úrovní $(j_1,j_2\dots,j_k)$ z faktorového dizajnu F a kontrast $\beta_{i_1 i_2\dots i_k}$ z vektoru γ platí

$$(XU)_{(j_1,j_2\dots,j_k)\beta_{i_1 i_2\dots i_k}}=u_{(j_1,j_2\dots,j_k)\beta_{i_1 i_2\dots i_k}}=\prod_{l=1}^{k} z(i_l,j_l).$$

Potom skalárny súčin dvoch stĺpcov matice XU prislúchajúcich k dvom rôznym parametrom $\beta_{i_1 i_2\dots i_k}$ a $\beta_{f_1 f_2\dots f_k}$ je rovný

$$\sum_{(j_1 j_2\dots j_k)}\prod_{l=1}^{k} z(i_l,j_l)z(f_l,j_l), \tag{4.11}$$

kde suma je cez všetky kombinácie úrovní $(j_1 j_2\dots j_k)$, na ktorých sme uskutočnili merania, teda cez všetky riadky dizajnu F.

Potrebujeme dokázať, že výraz (4.11) je nulový pre $\beta_{i_1 i_2\dots i_k}$ a $\beta_{f_1 f_2\dots f_k}$, ktoré sú

(i) hlavné vplyvy alebo vplyvy nanajvýš $\frac{t}{2}$ faktorov pre párne t. Pre také parametre potom pre I z Definície 4.6 platí $|I(i_1 i_2\dots i_k)|\le\frac{t}{2}$, $|I(f_1 f_2\dots f_k)|\le\frac{t}{2}$. Teda počet 1 v $\{i_1,i_2,\dots,i_k,f_1,f_2,\dots,f_k\}$ je nanajvýš $\frac{t}{2}+\frac{t}{2}=t$;

(ii) hlavné vplyvy alebo vplyvy nanajvýš $\frac{t-1}{2}$ faktorov, alebo jeden z nich je vplyv $\frac{t+1}{2}$ faktorov, pre nepárne t. Ak sú obidva parametre hlavné vplyvy alebo vplyvy nanajvýš $\frac{t-1}{2}$ faktorov, potom $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| \le \frac{t-1}{2}$ a $|I(f_1 f_2 \dots f_k)| \le \frac{t-1}{2}$ a teda počet 1 v $\{i_1 i_2 \dots i_k, f_1 f_2 \dots f_k\}$ je nanajvýš $\frac{t-1}{2} + \frac{t-1}{2} = t - 1 < t$. Ak jeden z nich, nech je to bez ujmy na všeobecnosti $\beta_{i_1 i_2 \dots i_k}$, je hlavný vplyv alebo vplyv nanajvýš $\frac{t-1}{2}$ faktorov a druhý je vplyv $\frac{t+1}{2}$ faktorov, potom $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| \le \frac{t-1}{2}$ a $|I(f_1 f_2 \dots f_k)| = \frac{t+1}{2}$. Takže počet 1 v $\{i_1, i_2, \dots, i_k, f_1, f_2, \dots, f_k\}$ je nanajvýš $\frac{t-1}{2} + \frac{t+1}{2} = t$.

(iii) Špeciálny prípad je konštantný prvok $\beta_{-1,-1,\dots,-1}$, ktorý nemá žiaden prvok svojho indexu rovný 1. Preň potrebujeme ukázať, že skalárny súčin dvoch stĺpcov matice, z ktorých jeden prislúcha $\beta_{-1,-1,\dots,-1}$ a druhý $\beta_{i_1 i_2 \dots i_k}$, je rovný 0. Pritom pre párne t berieme také $\beta_{i_1 i_2 \dots i_k}$, že $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| \le \frac{t}{2}$ a pre nepárne t je $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| \le \frac{t-1}{2}$ alebo $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| \le \frac{t+1}{2}$. V každom prípade platí $|I(i_1 i_2 \dots i_k)| \le t$ a teda v množine $\{-1, -1, \dots, -1, i_1, i_2, \dots, i_k\}$ je nanajvýš t prvkov rovných 1.

Teda bez ohľadu na paritu t stačí ukázať, že výraz (4.11) sa rovná nule pre také parametre $\beta_{i_1 i_2 \dots i_k}$ a $\beta_{f_1 f_2 \dots f_k}$, kde počet 1 v $\{i_1, i_2, \dots, i_k, f_1, f_2, \dots, f_k\}$ je nanajvýš t.

Pripomeňme, že pre každé $1 \le l \le k$ platí

$$Z_l = \frac{1}{\sqrt{2}} H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

a označme prvky matice H $h(i,j)$. Keďže $z(i,j) = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$, tak platí

$$\prod_{l=1}^{k} z(i_l, j_l) z(f_l, j_l) = \pm \frac{1}{(\sqrt{2}\sqrt{2})^k} = \pm \frac{1}{2^k} = \pm \frac{1}{M},$$

keďže $M = 2^k$. Takže o tom, či sa súčet (4.11) týchto produktov vynuluje, rozhodujú znamienka jednotlivých sčítancov, keďže všetky sčítance majú rovnakú absolútnu hodnotu. Potrebujeme teda zistiť aké znamienka majú jednotlivé súčiny.

Rozpíšme produkt $\prod_{l=1}^{k} z(i_l, j_l) z(f_l, j_l)$ na

$$z(i_1, j_1) \cdot \ldots \cdot z(i_k, j_k) \cdot z(f_1, j_1) \cdot \ldots \cdot z(f_k, j_k). \tag{4.12}$$

Vieme, že prvý riadok H sa skladá iba z 1, teda $z(-1,-1) = z(-1,1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Ak teda pre $l \in \{1, \dots k\}$ platí $i_l = -1$, resp. $f_l = -1$, potom prvok $z(i_l, j_l)$, resp. $z(f_l, j_l)$

nemá pre žiadne j_l na znamienko produktu (4.12) vplyv. Vplyv majú teda iba tie l pre ktoré buď i_l, alebo f_l, alebo obidve sú rovné 1. Takých je nanajvýš t, označme ich $l_1, l_2, \dots, l_m$, kde $m \leq t$, navyše ich rozdeľme na

$l_1, \dots, l_c$, pre ktoré sú i_{l_p} aj f_{l_p} rovné 1,

$l_{c+1}, \dots, l_q$, pre ktoré sú i_{l_p} rovné 1 a f_{l_p} rovné -1 a

$l_{q+1}, \dots, l_m$, pre ktoré sú i_{l_p} rovné -1 a f_{l_p} rovné 1.

Teda produkt (4.12) sa rovná

$$\frac{1}{M} h(i_{l_1}, j_{l_1}) \cdot \ldots \cdot h(i_{l_m}, j_{l_m}) \cdot h(f_{l_1}, j_{l_1}) \cdot \ldots \cdot h(f_{l_m}, j_{l_m})$$

a teda sumu (4.11) môžeme zapísať

$$\sum_{(j_{l_1}, \dots, j_{l_m})} \frac{1}{M} h(i_{l_1}, j_{l_1}) \cdot \ldots \cdot h(i_{l_m}, j_{l_m}) \cdot h(f_{l_1}, j_{l_1}) \cdot \ldots \cdot h(f_{l_m}, j_{l_m}), \tag{4.13}$$

pričom suma je cez úrovne ortogonálneho poľa na vybraných stĺpcoch $j_{l_1}, \dots, j_{l_m}$.

Vo výraze (4.13) sa vyskytujú "zbytočné" prvky: pre $p > c$ je iba jeden z i_{l_p}, j_{l_p} rovný 1, druhý je rovný -1, teda iba jeden z nich má potenciál zmeniť znamienko súčinu, a predsa sú v zápise zahrnuté oba: pre $c < p \leq q$ platí $h(f_{l_p}, j_{l_p}) = 1$ pre ľubovoľné j_{l_p}. Taký prvok je zbytočný, keďže nemení znamienko produktu. Podobne pre $p > q$. Takže (4.13) sa dá upraviť na

$$\begin{aligned} \sum_{(j_{l_1}, \dots, j_{l_m})} \frac{1}{M} & h(i_{l_1}, j_{l_1}) \cdot \ldots \cdot h(i_{l_c}, j_{l_c}) \cdot h(f_{l_1}, j_{l_1}) \cdot \ldots \cdot h(f_{l_c}, j_{l_c}) \cdot \\ & \cdot h(i_{l_{c+1}}, j_{l_{c+1}}) \cdot \ldots \cdot h(i_{l_q}, j_{l_q}) \cdot \\ & \cdot h(f_{l_{q+1}}, j_{l_{q+1}}) \cdot \ldots \cdot h(f_{l_m}, j_{l_m}), \end{aligned} \tag{4.14}$$

kde už všetky i_{l_p}, f_{l_p} sú rovné 1. Potom o znamienku jednotlivých členov $h(i_{l_p}, j_{l_p})$, $h(f_{l_p}, j_{l_p})$ rozhoduje hodnota j_{l_p}. Ak $j_{l_p} = -1$, tak $h(i_{l_p}, j_{l_p}) = -1$; ak $j_{l_p} = 1$, tak $h(i_{l_p}, j_{l_p}) = 1$, podobne pre $h(f_{l_p}, j_{l_p})$. Teda o znamienku produktu (4.12) rozhoduje m-tica $j_{l_1}, \dots j_{l_m}$.

Podľa Lemy 4.16 vieme, že m stĺpcov F, $l_1, \dots l_m$, tvorí ortogonálne pole sily m, označme ho $\tilde{A}$. V $\tilde{A}$ sa teda každá m-tica $j_{l_1}, \dots, j_{l_m}$ nachádza $\lambda = \frac{N}{2^m}$-krát. Keďže znamienka jednotlivých produktov závisia práve od $j_{l_1}, \dots j_{l_m}$, tak každých $\frac{N}{2^m}$ súčinov

(4.12) prislúchajúcich jednej m-tici má rovnaké znamienko. Také súčiny sa dajú zapísať ako

$$\frac{1}{M}\left(\prod_{p=1}^{c} h(i_{l_p}, j_{l_p})h(f_{l_p}, j_{l_p})\right)\left(\prod_{p=c+1}^{q} h(i_{l_p}, j_{l_p})\right)\left(\prod_{p=q+1}^{m} h(f_{l_p}, j_{l_p})\right).$$

Označme štandardne $S = \{-1, +1\}$. (4.14) je suma produktov cez všetky také m-tice v $\tilde{A}$ a teda sa rovná

$$\frac{1}{M}\frac{N}{2^m}\sum_{j_{l_1}\in S}\sum_{j_{l_2}\in S}\cdots\sum_{j_{l_m}\in S}\left(\prod_{p=1}^{c} h(i_{l_p}, j_{l_p})h(f_{l_p}, j_{l_p})\right)\left(\prod_{p=c+1}^{q} h(i_{l_p}, j_{l_p})\right)\left(\prod_{p=q+1}^{m} h(f_{l_p}, j_{l_p})\right).$$

Od j_{l_m} závisí až posledný produkt a teda suma sa dá zapísať ako

$$\frac{N}{M2^m}\sum_{j_{l_1}\in S}\sum_{j_{l_2}\in S}\cdots\sum_{j_{l_{m-1}}\in S}\kappa\rho\left(\prod_{p=q+1}^{m-1} h(f_{l_p}, j_{l_p})\right)\sum_{j_{l_m}\in S} h(f_{l_m}, j_{l_m}),$$

kde

$$\kappa = \left(\prod_{p=1}^{c} h(i_{l_p}, j_{l_p})h(f_{l_p}, j_{l_p})\right) \text{ a } \rho = \left(\prod_{p=c+1}^{q} h(i_{l_p}, j_{l_p})\right).$$

Navyše $\sum_{j_{l_m}\in S} h(f_{l_m}, j_{l_m}) = -1 + 1 = 0$ a teda celá suma je rovná nule.

Problém by mohol nastať, ak $q = m$, teda by nebol žiaden index l_p, v ktorom by bolo i_{l_p} rovné -1 a f_{l_p} rovné 1. Ak by zároveň ale platilo $c < m$, teda $i_{l_m} = 1$ a $f_{l_m} = -1$, tak by sa dal výraz (4.14) upraviť na

$$\frac{N}{M2^m}\sum_{j_{l_1}\in S}\sum_{j_{l_2}\in S}\cdots\sum_{j_{l_{m-1}}\in S}\kappa\left(\prod_{p=c+1}^{m-1} h(i_{l_p}, j_{l_p})\right)\sum_{j_{l_m}\in S} h(i_{l_m}, j_{l_m}),$$

kde

$$\kappa = \left(\prod_{p=1}^{c} h(i_{l_p}, j_{l_p})h(f_{l_p}, j_{l_p})\right)$$

a platilo by $\sum_{j_{l_m}\in S} h(i_{l_m}, j_{l_m}) = -1 + 1 = 0$.

Výraz (4.14) by sa nedal vynulovať, keby nastalo $c = m$. To by ale značilo to, že

$i_l = f_l = 1$ pre $l \notin \{l_1, l_2 \ldots, l_m\}$

$i_{l_p} = f_{l_p} = -1$ pre $p \in \{1, 2 \ldots, m\}$

teda $i_1, \ldots, i_k$ a $f_1, \ldots, f_k$ sú totožné. My sme ale uvažovali rozdielne $\beta_{i_1\ldots i_k}$, $\beta_{f_1\ldots f_k}$. Takže určite platí $c < m$, čiže výraz (4.14) je skutočne rovný 0. □

Veta 4.30. *Pri použití dizajnu F a vektorov γ_1 a γ_2 z Vety 4.29 je variančno-kovariančná matica odhadu $\hat{\gamma}_1$*

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}_1) = \sigma^2 \frac{M}{N} I_{R_1}$$

a dizajn F je univerzálne optimálny dizajn rozlíšenia $t+1$.

Dôkaz. Nech neúplný faktorový dizajn F je $OA(N, k, 2, t)$. Dokázali sme, že matica $C_{(R_1 \times R_1)}$ je v takom prípade diagonálna a platí $C = U_1^T X^T X U_1$. V dôkaze minulej vety sme zároveň ukázali, že pre ľubovoľné dva parametre príslušného vektora γ_1 platí, že skalárny súčin nim prislúchajúcich stĺpcov XU_1 je (4.11), čiže

$$\sum_{(j_1 j_2 \ldots j_k)} \prod_{l=1}^{k} z(i_l, j_l) z(f_l, j_l).$$

Nech $\beta_{i_1 \ldots i_k}$ je ľubovoľný prvok γ. Potom diagonálny prvok $C_{\beta_{i_1 \ldots i_k}, \beta_{i_1 \ldots i_k}}$ je skalárnym súčninom stĺpca XU_1 prislúchajúcemu k $\beta_{i_1 \ldots i_k}$ samého so sebou, čo sa podľa (4.11) rovná

$$\sum_{(j_1 j_2 \ldots j_k)} \prod_{l=1}^{k} z(i_l, j_l) z(i_l, j_l). \tag{4.15}$$

To sa dá, podobne ako v dôkaze Vety 4.29, upraviť na tvar

$$\frac{1}{M} \sum_{(j_1 j_2 \ldots j_k)} \prod_{l=1}^{k} (h(i_l, j_l))^2.$$

Keďže $h(i_l, j_l) = \pm 1$, tak $(h(i_l, j_l))^2 = 1$ a teda suma $\sum_{(j_1 j_2 \ldots j_k)} \prod_{l=1}^{k} (h(i_l, j_l))^2$ je rovná počtu uvažovaných k-tic, čiže počtu meraní. Keďže počet meraní je N, tak výraz (4.15) sa dá upraviť na $\frac{1}{M} N = \frac{N}{M}$.

Tento výsledok platí pre ľubovoľný diagonálny prvok a zjavne nezávisí od voľby $\beta_{i_1 \ldots i_k}$, teda

$$C = \frac{N}{M} I_{R_1}.$$

Teda F je podľa Vety 4.28 univerzálne optimálny rozlíšenia $t+1$, variancia odhadu je $\sigma^2 C^{-1}$, čiže

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}_1) = \sigma^2 \frac{M}{N} I_{R_1}.$$

□

Teraz môžeme využiť, čo sme dokázali o vzťahu Hadamardových matíc a ortogonálnych polí.

Veta 4.31 (podľa [10]). *Ak existuje Hadamardova matica veľkosti $4n$, potom existuje čiastočný faktorový dizajn pre $4n-1$ faktorov na 2 úrovniach, používajúci $4n$ meraní, ktorý je ortogonálny, nasýtený, univerzálne optimálny rozlíšenia 3 a odhaduje γ s varianciou*

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}) = \sigma^2 \frac{2^{4n}}{8n} I_R$$

Dôkaz. Nech H je Hadamardova matica veľkosti $4n$. Podľa Vety 4.17 potom existuje ortogonálne pole $OA(4n, 4n-1, 2, 2)$. Také ortogonálne pole reprezentuje čiastočný faktorový dizajn pre $4n-1$ faktorov na 2 úrovniach, na $4n$ meraniach, ktorý je podľa Vety 4.29 ortogonálny a rozlíšenia 3. Keďže je rozlíšenia 3, odhadujeme okrem konštantného parametru všetky hlavné efekty, ktorých je $4n-1$. Teda odhadujeme spolu $4n$ parametrov počas $4n$ meraní, čiže dizajn je nasýtený. Podľa Vety 4.30 je univerzálne optimálny rozlíšenia 3 a pre varianciu odhadu γ podľa tej istej vety platí

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}) = \sigma^2 \frac{2^{4n-1}}{4n} I_{4n} = \sigma^2 \frac{2^{4n}}{8n} I_{4n}.$$

□

Veta 4.32 (podľa [10]). *Ak existuje Hadamardova matica veľkosti $4n$, potom existuje čiastočný faktorový dizajn pre $4n$ faktorov na 2 úrovniach, na $8n$ meraniach, ktorý je ortogonálny, univerzálne optimálny rozlíšenia 4 a odhaduje γ_1 s varianciou*

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}_1) = \sigma^2 \frac{2^{4n}}{8n} I_{4n+1}.$$

Dôkaz. Nech H je Hadamardova matica veľkosti $4n$. Potom podľa Dôsledku 4.19 existuje ortogonálne pole $OA(8n, 4n, 2, 3)$. Také ortogonálne pole reprezentuje neúplný faktorový dizajn pre $4n$ faktorov na 2 úrovniach, na $8n$ meraniach, ktorý je podľa Vety 4.29 ortogonálny a rozlíšenia 4. Podľa Vety 4.30 je univerzálne optimálny rozlíšenia 4 a pre varianciu odhadu γ_1 podľa tej istej vety platí

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}_1) = \sigma^2 \frac{2^{4n}}{8n} I_{4n+1},$$

keďže γ_1 pozostáva z konštantného parametra a $4n$ hlavných efektov a teda je dĺžky $4n+1$, čiže $R_1 = 4n+1$. □

Príklad 4.33. *Príklad čiastočného faktorového dizajnu pre 3 faktory na 2 úrovniach. Nech $N = 4$, zvoľme čiastočný dizajn definovaný seminormalizovanou (v tomto prípade* *dokonca normalizovanou) Hadamardovou maticou*

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Teda dizajn D je

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{bmatrix},$$

potom X bude 4×8 matica so stĺpcami označenými v štandardnom poradí $(-1,-1,-1)$, $(1,-1,-1)$, $(-1,1,-1)$, $(1,1,-1)$, $(-1,-1,1)$, $(1,-1,1)$, $(-1,1,1)$, $(1,1,1)$ a riadkami $(1,-1,-1)$, $(-1,1,-1)$, $(-1,-1,1)$, $(1,1,1)$.

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Vieme, že

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix},$$

teda

$$V = Z \otimes Z \otimes Z = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Spomedzi všetkých $2^3 = 8$ parametrov vyberme konštantný prvok a hlavné vplyvy, ostatné zanedbajme, teda

$$\gamma = (\beta_{-1,-1,-1}\beta_{1,-1,-1}\beta_{-1,1,-1}\beta_{-1,-1,1}).$$

Potom U obsahuje iba tie stĺpce V^T, ktoré prislúchajú prvkom γ,

$$U = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

teda

$$XU = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

a

$$C = U^T X^T X U = \frac{1}{2^3} \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4, \end{bmatrix}.$$

Teda skutočne platí

$$C = \frac{N}{M} I_R = \frac{4}{2^3} I_4,$$

dizajn je ortogonálny, nasýtený a rozlíšenia 3 *(a podľa Vety* 4.28 *univerzálne optimálny rozlíšenia* 3*), vektor γ je odhadnuteľný, pričom variancia odhadu je*

$$\mathrm{Var}(\hat{\gamma}) = \sigma^2 C^{-1} = \frac{2^3}{4} \sigma^2 I_4 = 2\sigma^2 I_4.$$

Záver

V tejto bakalárskej práci sme podrobne rozobrali teóriu Hadamardových matíc a ich vybrané aplikácie. Postupne sme prešli od ich základných vlastností ku známym konštrukciám Hadamardových matíc. V aplikačnej časti sme sa venovali využitiu Hadamardových matíc v optimálnom dizajne experimentov.

V prvých dvoch kapitolách venovaných teórii Hadamardových matíc sme prezentovali známe znalosti o Hadamardových maticiach a ich základné konštrukcie – Sylvestrovu konštrukciu a Paleyove konštrukcie. Tieto konštrukcie sme v príslušných sekciách 2.1 a 2.2 druhej kapitoly dôkladne rozobrali. Uviedli sme dôkazy funkčnosti spomenutých konštrukcií na základe dôkazov uvedených v inej literatúre. Dôkazy tvrdení však boli v literatúre, z ktorej sme čerpali, často iba naznačené a vyžadovali naštudovanie špecifickej problematiky (Kroneckerov súčin, Galoisove polia). Teda v súlade s cieľmi našej práce sme prezentovali dôkladné dôkazy a tiež úvod do problematiky potrebnej na pochopenie tvrdení.

V druhej časti práce sme prezentovali aplikácie Hadamardových matíc v optimálnom dizajne experimentov. V tretej kapitole sme čitateľa oboznámili s problémom optimálneho dizajnu váženia. Skúmali sme váženie na dvoch typoch váh, chemických a pružinových. Následne sme sa dopracovali k analýze aplikácií Hadamardových matíc v optimálnom dizajne váženia na chemických aj pružinových váhach. Tieto aplikácie sme zhrnuli vo vetách 3.4 a 3.6. V závere kapitoly sme ukázali vo vetách 3.9 a 3.12 aplikácie Hadamardových matíc pri tvorbe optimálnych dizajnov váženia na vychýlených chemických aj pružinových váhach.

Posledná kapitola bola venovaná aplikáciam Hadamardových matíc v optimálnom faktorovom dizajne. Najprv sme uviedli základné znalosti o faktorových experimentoch potrebné pre našu prácu. Vysvetlenie využitia Hadamardových matíc v tejto disciplíne si vyžadovalo použitie ortogonálnych polí. Preto sme im venovali jednu podkapitolu, ktorá pozostávala zo základov problematiky a využitia Hadamardových matíc pri tvorbe ortogonálnych polí. Po rozbore čiastočného faktorového dizajnu sme sa dopracovali k aplikáciam ortogonálnych polí v optimálnom čiastkovom faktorovom dizajne s faktormi na dvoch úrovniach. Tým sme sprostredkovane ukázali využitie Hadamardových matíc v optimálnom faktorovom dizajne. Výsledky tejto kapitoly sme zhrnuli vo vetách 4.31 a 4.32.

Postupovali sme formou tvrdení a ich dôkazov. Tvrdenia sme sa snažili formulovať jasne a dôkazy uviesť matematicky exaktne. Pri tvorbe práce sme vo veľkej miere čerpali z existujúcej literatúry (najmä [10], [17] a [11]). Získané znalosti sme však často dopĺňali vlastnými úvahami a dôkazmi tvrdení. Spomedzi použitých dôkazov bola veľká väčšina stručná, prípadne len s načrtnutou ideou. Také dôkazy sme dôkladne spracovali, aby bolo možné sledovať logický sled krokov bez preskočených častí.

V práci sme zhŕňali poznatky z mnohých zdrojov a rôznych oblastí matematiky (hlavne teória matíc a teória dizajnu experimentov) a spracovali ich tak, aby bola prístupná aj čitateľom, ktorí v daných oblastiach nie sú odborníkmi. Na rozdiel od inej literatúry sme uvádzali podrobné a dôkladné dôkazy vyslovených tvrdení. Takže hlavným prínosom práce je, že nielen zhŕňa poznatky, ale ich aj dôkladne vysvetľuje.

Čitateľ, ktorý sa zaujíma o teóriu matíc prípadne konkrétne o Hadamardove matice môže v tejto práci nájsť ich aplikácie v optimálnom dizajne aj s vysvetlením problematiky. Teda nemusí si teóriu dizajnu naštudovať zo špecializovanej publikácie. Na druhej strane je práca užitočná aj pre čitateľa zaujímajúceho sa o optimálny dizajn, ktorý hľadá spôsoby tvorby optimálneho dizajnu. Taký čitateľ v práci nájde najdôležitejšie aplikácie Hadamardových matíc pri konštrukcií dizajnu váženia a faktorového dizajnu. Navyše, v práci má možnosť sa oboznámiť aj so základmi teórie Hadamardových matíc a ich konštrukcií.

Prínosom pre autora práce bolo hlavne oboznámenie sa s problematikou Hadamardových matíc a dizajnu experimentov. Autor sa navyše stručne oboznámil s ďalšími oblasťami matematiky, najmä s Galoisovými poľami a ortogonálnymi poľami. Prínosom bola aj potreba hlbšieho zamyslenia sa nad dokazovaním v matematike a nutnosť tvorby vlastných dôkazov. Zároveň si autor uvedomil výraznú a mnohokrát nečakanú prepojenosť rôznorodých oblastí matematiky.

Spomedzi veľkého množstva aplikácií Hadamardových matíc sme v práci skúmali iba optimálny dizajn váženia a optimálny faktorový dizajn. Preto je možným rozšírením práce podrobné preskúmanie iných aplikácií Hadamardových matíc, či už v teórii dizajnu, alebo v iných častiach matematiky. V teoretickej oblasti je možné preskúmať ďalšie konštrukcie Hadamardových matíc alebo sa bližšie zaoberať vlastnosťami Hadamardových matíc.

Zoznam použitej literatúry

[1] Assmus, E. F., Key, J. D.: *Designs and Their Codes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994

[2] Box, G. E. P., Hunter, J. S.: *The 2^{k-p} Fractional Factorial Designs, Part I.*, Technometrics, Volume 3 (1961), 311-351

[3] Box, G. E. P., Hunter J. S., Hunter W. G.: *Statistics for Experimenters*, John Wiley & Sons New York, 2nd Edition, 2005

[4] Cameron, P. J.: *Hadamard matrices*, elektronické študijné materiály, The Encyclopaedia of Design Theory, 2006, dostupné na internete (5.5.2012): http://designtheory.org/library/encyc/topics/had.pdf

[5] Cameron, P. J.: *Galois fields*, elektronické študijné materiály, The Encyclopaedia of Design Theory, 2003, dostupné na internete (6.5.2012): http://designtheory.org/library/encyc/topics/gf.pdf

[6] Ceranka B., Graczyk M.: *On some method of construction optimum biased spring balance weighing design*, Colloquium Biometricum, Volume 39 (2009), 53-62

[7] Davidson R., MacKinnon J. G.:*Econometric Theory and Methods*, Oxford University Press, New York, 2004

[8] Dey, A., Mukerjee, R.: *Fractional Factorial Plans*, John Wiley & Sons, New York, 1999

[9] Hadamard, J.: *Résolution d'une question realative aux déterminants*, Bulletin des Sciences Mathématiques, Volume 17 (1893), Part 1, 240-246

[10] Hedayat, A. S., Wallis, W. D.: *Hadamard Matrices and Their Applications*, The Annals of Statistics, Volume 6 (1978), 1184-1238

[11] Hedayat, A. S., Sloane, N. J. A., Stufken, J.: *Orthogonal Arrays: Theory and Applications*, Springer, New York, 1999

[12] Horadam, K. J.: *Hadamard Matrices and Their Applications*, Princeton University Press, New Jersey, 2007

[13] Hotelling, H.: *Some improvements in weighing and other experimental techniques*, The Annals of Mathematical Statistics, Volume 15 (1944), 297-306

[14] Cheng, C. S.: *Orthogonal arrays with variable numbers of symbols*, The Annals of Mathematical Statistics, Volume 6 (1980), 447-453

[15] Jacroux, M., Wong, C. S., Masaro, J.: *On the optimality of chemical balance weighing designs*, Journal of Statistical Planning and Inference, Volume 8 (1983), 231-240

[16] Lidl, R., Niederreiter H.: *Finite Fields*, Cambridge University Press, Cambridge, 2nd Edition, 1997

[17] Mood, A. M.: *On Hotelling's weighing problem*, The Annals of Mathematical Statistics, Volume 17 (1946), 432-446

[18] Moriguti, S.: *Optimality of orthogonal designs*, Reports of Statistical Application Research. Union of Japanese Scientists and Engineers, Volume 3 (1954), 75-98

[19] Paley, R. E. A. C.: *On Orthogonal Matrices*, Journal of Mathematics and Physics, Volume 12 (1933), 311-320

[20] Seberry J., Yamada M.: *Hadamard Matrices, Sequences, and Block Designs*, Contemporary Design Theory - A Collection of Surveys (Dinitz and Stinson), John Wiley & Sons, 1992, 431-560

[21] Sloane, N.: *A Library of Hadamard Matrices*, knižnica Hadamardových matíc dostupná na internete (5.5.2012): http://www2.research.att.com/ njas/hadamard/

[22] Stinson, D. R.: *Combinatorial Designs: Constructions and Analysis*, Springer-Verlag, New York, 2004

[23] Strang, G.: *Introduction to Linear Algebra*, Wellesley-Cambridge Press, Cambridge, 3rd Edition, 2003

[24] Sylvester, J. J.: *Thoughts on Inverse Orthogonal Matrices, Simultaneous Sign-Successions, and Tessalated Pavements in Two or More Colors, with Applications to Newton's Rule, Ornamental Tile-Work, and Theory of Numbers*, Philosophical Magazine, Volume 34 (1867), 461-475

[25] Szabó, T.: *Extremal Combinatorics*, elektronické študijné materiály, Institute of Theoretical Computer Sciences ETH, Zurich, 2007, dostupné na internete (6.5.2012): http://www.ti.inf.ethz.ch/ew/courses/extremal07/recitation2.pdf

[26] Weisberg, S.: *Applied Linear Regression*, John Wiley & Sons, New Jersey, 3rd Edition, 2005

[27] Zhang, F.: *Matrix Theory: Basic Results and Techniques*, Springer-Verlag, New York, 2010