ROCZNIKI POLSKIEGO TOWARZYSTWA MATEMATYCZNEGO
Seria III: MATEMATYKA STOSOWANA XI (1977)

BRONISŁAW CERANKA (Poznań)

Układy blokowe całkowicie zrównoważone o niejednakowej wielkości bloków

(*Praca przyjęta do druku 14.11.1975*)

Przez *układ blokowy* rozumiemy układ (plan) doświadczenia, którego jednostki przed przydzieleniem do obiektów są zgrupowane w bloki. W pewnych przypadkach grupowanie to dokonywane jest sztucznie, w innych wynika z natury materiału doświadczalnego. Układ blokowy można jednoznacznie przedstawić za pomocą macierzy incydencji $\boldsymbol{N} = [N_{ij}]$, której element N_{ij} określa liczbę jednostek j-tego bloku przydzielonych do i-tego obiektu. Niech macierz ta ma t wierszy i b kolumn. Sumy elementów w wierszach macierzy $\boldsymbol{N}$ określają liczby jednostek przydzielonych do poszczególnych obiektów, a sumy elementów w kolumnach określają liczby jednostek w blokach. Zapisujemy to równościami $\boldsymbol{N1} = \boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{N'1} = \boldsymbol{k}$, gdzie t-wymiarowy wektor $\boldsymbol{r}$ nazywamy *wektorem replikacji obiektów*, a b-wymiarowy wektor $\boldsymbol{k}$ nazywamy *wektorem wielkości bloków*; $\boldsymbol{1}$ oznacza tu wektor o odpowiedniej liczbie składowych, każda równa jedności. Przez $\boldsymbol{r}^{\delta}$ oznaczać będziemy macierz diagonalną o elementach diagonalnych równych składowym wektora $\boldsymbol{r}$, a przez $\boldsymbol{k}^{\delta}$ — macierz diagonalną utworzoną w analogiczny sposób z wektora $\boldsymbol{k}$. Odpowiednie macierze odwrotne oznaczać będziemy przez $\boldsymbol{r}^{-\delta}$ i $\boldsymbol{k}^{-\delta}$. Oznaczając przez n liczbę wszystkich jednostek możemy także zapisać $\boldsymbol{1}'\boldsymbol{k} = n = \boldsymbol{1}'\boldsymbol{r}$.

Dla obserwacji otrzymanych z układu blokowego przyjmuje się zwykle model liniowy

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{1}\alpha + \boldsymbol{D}'\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\Delta}'\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

w którym $\boldsymbol{y}$ jest n-wymiarowym wektorem obserwacji z poszczególnych n jednostek, α jest parametrem ogólnym, $\boldsymbol{\beta}$ jest b-wymiarowym wektorem parametrów blokowych, $\boldsymbol{\gamma}$ jest t-wymiarowym wektorem parametrów obiektowych, a $\boldsymbol{\varepsilon}$ jest n-wymiarowym wektorem błędów losowych, którego rozkład łączny charakteryzuje się własnościami $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{0}$, $E(\boldsymbol{\varepsilon\varepsilon}') = \sigma^2\boldsymbol{I}$, gdzie $\boldsymbol{I}$ jest macierzą jednostkową odpowiedniego stopnia; $\boldsymbol{D}'$ i $\boldsymbol{\Delta}'$ są macierzami układu dla bloków i obiektów. Zauważmy, że między wcześniej określonymi wielkościami zachodzą między innymi następujące związki: $\boldsymbol{N} = \boldsymbol{\Delta D}'$, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{\Delta 1}$, $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{D1}$.

Estymatorem metodą najmniejszych kwadratów wektora γ jest, przy warunkach ograniczających $\boldsymbol{k}'\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{0} = \boldsymbol{r}'\gamma$, wektor $\hat{\gamma} = \boldsymbol{\Omega Q}$, gdzie $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{T}-\boldsymbol{N}\boldsymbol{k}^{-\delta}\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{\Delta y}$ (wektor sum obiektowych), $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{y}$ (wektor sum blokowych),

$$\boldsymbol{\Omega}^{-1} = \boldsymbol{r}^{\delta}-\boldsymbol{N}\boldsymbol{k}^{-\delta}\boldsymbol{N}'+\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}'/n,$$

(macierz tę wprowadził Tocher, [6]). Natomiast estymatorem wektora średnich obiektowych, to znaczy wektora $\alpha\boldsymbol{1}+\gamma$, jest wektor $\boldsymbol{a} = \hat{\alpha}\boldsymbol{1}+\hat{\gamma}$, gdzie $\hat{\alpha} = G/n$, $G = \boldsymbol{1}'\boldsymbol{y}$ $(= \boldsymbol{1}'\boldsymbol{B} = \boldsymbol{1}'\boldsymbol{T})$. Macierzą kowariancji estymatora $\boldsymbol{a}$ jest $\sigma^2\boldsymbol{\Omega}$, co wskazuje na szczególną rolę macierzy $\boldsymbol{\Omega}$ w analizie układu blokowego.

Mianowicie, ze struktury macierzy $\boldsymbol{\Omega}$ wynikają własności układu blokowego, które jednak wygodniej jest badać za pomocą spokrewnionej z $\boldsymbol{\Omega}$ macierzy $\boldsymbol{M}_0$ wprowadzonej przez Calińskiego [1]:

$$\boldsymbol{M}_0 = \boldsymbol{r}^{-\delta}\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{k}^{-\delta}\boldsymbol{N}_0', \tag{1}$$

gdzie $\boldsymbol{N}_0 = \boldsymbol{N}-\boldsymbol{r}\boldsymbol{k}'/n$, przy czym $\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{1} = 0 = \boldsymbol{N}_0'\boldsymbol{1}$. Macierz $\boldsymbol{M}_0$ jest spokrewniona z macierzą $\boldsymbol{\Omega}^{-1}$ równością $\boldsymbol{\Omega}^{-1} = \boldsymbol{r}^{\delta}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{M}_0)$. Ponieważ $\|\boldsymbol{M}_0\| < 1$ (Caliński [1]), więc

$$\boldsymbol{\Omega} = \Big(\boldsymbol{I}+\sum_{h=1}^{\infty}\boldsymbol{M}_0^h\Big)\boldsymbol{r}^{-\delta}. \tag{2}$$

Pożądaną własnością układu blokowego jest jego całkowite zrównoważenie. Własność tę można wyrażać w dwojaki sposób:

(I) Układ blokowy nazywamy *całkowicie zrównoważonym*, gdy dla dowolnego wektora $\boldsymbol{c}$ takiego, że $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{1} = 0$, wyznaczającego kontrast średnich obiektowych $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{a}$, wariancja jego estymatora jest równa $\sigma^2\boldsymbol{c}'\boldsymbol{r}^{-\delta}\boldsymbol{c}/E$, przy czym E nazywamy *współczynnikiem efektywności* danego układu blokowego.

(II) Układ blokowy nazywamy *całkowicie zrównoważonym*, gdy dla dowolnego wektora $\boldsymbol{c}$ takiego, że $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{1} = 0$, wyznaczającego kontrast średnich obiektowych $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{a}$ zachodzi równość $\boldsymbol{M}_0'\boldsymbol{c} = \nu\boldsymbol{c}$, to znaczy wtedy, gdy każdy wektor wyznaczający kontrast średnich obiektowych jest wektorem charakterystycznym macierzy $\boldsymbol{M}_0'$ ze stałym pierwiastkiem charakterystycznym ν.

Między wielkościami E a ν zachodzi związek $E = 1-\nu$. Stąd ν nazywamy *współczynnikiem straty* (Caliński [1]).

Definicję (II) można także wyrazić za pomocą wektora $\boldsymbol{s}$ wyznaczającego kontrast $\boldsymbol{s}'\boldsymbol{T}$, gdzie $\boldsymbol{s}'\boldsymbol{r} = 0$ (kontrast ten nazywa się *kontrastem obiektowym*).

Układ blokowy nazywamy *całkowicie zrównoważonym*, gdy dla dowolnego wektora $\boldsymbol{s}$, określonego jak wyżej, zachodzi równość $\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{s} = \nu\boldsymbol{s}$. Zauważmy, że między wektorami $\boldsymbol{c}$ a $\boldsymbol{s}$ zachodzi związek $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{r}^{-\delta}\boldsymbol{c}$.

Wiadomo (Jones [4], Caliński [1], Ceranka [2]), że na to, aby układ blokowy był całkowicie zrównoważony, potrzeba i wystarcza, by macierz $\boldsymbol{M}_0$ była postaci

$$\boldsymbol{M}_0 = \nu(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{1}\boldsymbol{r}'/n), \tag{3}$$

gdzie ν jest niezerowym pierwiastkiem charakterystycznym (o krotności $t-1$) macierzy $\boldsymbol{M}_0$.

Z warunku (3) i wzoru (2) wynika, że macierz $\boldsymbol{\Omega}$ dla układu całkowicie zrównoważonego przyjmuje postać

(4) $$\boldsymbol{\Omega} = \left(\boldsymbol{I}+\frac{1}{1-\nu}\boldsymbol{M}_0\right)\boldsymbol{r}^{-\delta} = \frac{1}{1-\nu}(\boldsymbol{r}^{-\delta}-\nu\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}'/n).$$

Oczywiście postać (4) macierzy $\boldsymbol{\Omega}$ spełnia warunek definicji (I), tak jak równość (3) spełnia warunek definicji (II). Zatem (3) i (4) są warunkami równoważnymi całkowitego zrównoważenia układu blokowego.

Układami blokowymi całkowicie zrównoważonymi są klasyczne układy zrównoważone o blokach niekompletnych, znane w literaturze jako „BIB design". Układ taki określa się parametrami t, b, r, k i λ. Jest to rozmieszczenie t obiektów w b blokach o stałej wielkości k ($< t$) w taki sposób, że każdy obiekt jest replikowany r razy, a każda para obiektów występuje wspólnie dokładnie w $\lambda = r(k-1)/(t-1) = r(n-b)/b(t-1)$ blokach. Zachodzi przy tym związek $tr = bk = n$. Elementy N_{ij} macierzy incydencji tego układu blokowego są równe jedności, gdy i-ty obiekt występuje w j-tym bloku, i zeru w przeciwnym przypadku. Dla układów zrównoważonych o blokach niekompletnych wzór (4) przyjmuje szczególną postać

(5) $$\boldsymbol{\Omega} = \frac{t-1}{n-b}\left[\boldsymbol{I}-\frac{b-r}{n(t-1)}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}'\right]$$

(zobacz np. Kendall i Stuart [5]; Caliński [1]; Ceranka [2]), natomiast macierz $\boldsymbol{M}_0$ ze wzoru (3) jest wtedy równa

(6) $$\boldsymbol{M}_0 = \nu[\boldsymbol{I}-t^{-1}\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}'],$$

przy czym

(7) $$\nu = \frac{b-r}{r(t-1)}$$

jest niezerowym pierwiastkiem charakterystycznym macierzy $\boldsymbol{M}_0$ o krotności $t-1$.

Wzór (6) jest prawdziwy dla każdego układu blokowego całkowicie zrównoważonego o jednakowej liczbie replikacji wszystkich obiektów. Macierz $\boldsymbol{\Omega}$ dana wzorem (5) może być zapisana za pomocą pierwiastka charakterystycznego ν macierzy $\boldsymbol{M}_0$ w postaci

(8) $$\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{(1-\nu)r}[\boldsymbol{I}-\nu\boldsymbol{1}\boldsymbol{1}'/t].$$

Chociaż warunki całkowitego zrównoważenia układu blokowego dopuszczają niejednakowe replikacje poszczególnych obiektów i bloki niejednakowej wielkości, to jednak ogólna konstrukcja takich układów nie jest znana.

W niniejszej pracy przedstawimy konstrukcję układów całkowicie zrównoważonych z jednakowymi replikacjami i niejednakowymi wielkościami bloków. Konstrukcja ta opiera się na łączeniu macierzy incydencji różnych układów zrównoważonych o blokach niekompletnych. Konstrukcję opierającą się na powtarzaniu macierzy incydencji tego samego układu blokowego przedstawił Gnot [3].

Niech $N_1, N_2, \ldots, N_u$ będą macierzami incydencji różnych co do wielkości bloków układów zrównoważonych o blokach niekompletnych dla tej samej liczby obiektów t. Wówczas układ o macierzy incydencji

$$N = [N_1 N_2 \ldots N_u] \tag{9}$$

jest układem blokowym całkowicie zrównoważonym o niejednakowej wielkości bloków.

Aby udowodnić powyższe twierdzenie, należy wykazać, że macierz M_0 tak zbudowanego układu blokowego może być zapisana w postaci (6). Dla h-tego ($h = 1, 2, \ldots, u$) układu zrównoważonego o blokach niekompletnych macierz M_0 może być zapisana następująco:

$$M_{0h} = \frac{1}{r_h k_h} N_h N_h' - \frac{1}{t} 11', \tag{10}$$

gdzie r_h i k_h są odpowiednio liczbą replikacji i wielkości bloków w h-tym układzie.

Niech ponadto r oznacza liczbę replikacji dla całego układu o macierzy incydencji N postaci (9); wtedy

$$M_0 = \frac{1}{r} N k^{-\delta} N' - \frac{1}{t} 11' = \frac{1}{r} \sum_{h=1}^{u} \frac{1}{k_h} N_h N_h' - \frac{1}{t} 11'. \tag{11}$$

Podstawiając (10) do (11) otrzymujemy

$$M_0 = \frac{1}{r} \sum_{h=1}^{u} r_h \left(M_{0h} + \frac{1}{t} 11' \right) - \frac{1}{t} 11'$$

i dal j po przekształceniach

$$M_0 = \frac{1}{r} \sum_{h=1}^{u} r_h \nu_h \left[I - \frac{1}{t} 11' \right],$$

gdzie ν_h jest niezerowym pierwiastkiem charakterystycznym macierzy M_{0h} dla h-tego układu, postaci analogicznej do (7). Ostatecznie

$$M_0 = \nu \left[I - \frac{1}{t} 11' \right],$$

gdzie

$$\nu = \frac{1}{r} \sum_{h=1}^{u} r_h \nu_h, \tag{12}$$

co kończy dowód twierdzenia.

Pokazaliśmy zatem, że układ blokowy o macierzy incydencji (9) jest układem zrównoważonym. Co więcej: pierwiastek charakterystyczny (12) macierzy M_0 całego układu wyraża się za pomocą pierwiastków charakterystycznych ν_h macierzy M_{0h}. Zatem jeżeli znamy współczynniki straty układów składowych, to w łatwy sposób znajdujemy współczynnik straty całego układu doświadczalnego. W łatwy sposób znajdujemy również macierz $\boldsymbol{\Omega}$. Wystarczy bowiem do (8) podstawić za ν (12).

Na podstawie powyższych rozważań zauważmy, że jeżeli h-ty układ blokowy ma parametry t, b_h, r_h, k_h i λ_h, to łączny układ blokowy o macierzy incydencji (9) ma parametry t, $b = \sum b_h$, $r = \sum r_h$, $\{k_1, k_2, \ldots, k_u\}$, $\lambda = \sum \lambda_h$.

Jako przykład powyższej konstrukcji rozważmy połączenie trzech układów zrównoważonych o blokach niekompletnych. Niech pierwszy układ blokowy ma parametry: $t = 5$, $b_1 = 10$, $r_1 = 4$, $k_1 = 2$, $\lambda_1 = 1$. Macierz incydencji N_1 tego układu jest postaci:

$$N_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Macierz $\boldsymbol{M}_{01}$ z pierwiastkami charakterystycznymi 0 oraz $\nu_1 = 3/8$ o krotności 4 jest równa

$$\boldsymbol{M}_{01} = \frac{3}{40} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Niech drugi układ blokowy ma parametry: $t = 5$, $b_2 = 10$, $r_2 = 6$, $k_2 = 3$, $\lambda_2 = 3$. Macierz incydencji N_2 tego układu jest postaci:

$$N_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Macierz $\boldsymbol{M}_{02}$ z pierwiastkami charakterystycznymi 0 oraz $\nu_2 = 1/6$ o krotności 4 jest równa

$$\boldsymbol{M}_{02} = \frac{1}{30} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Niech trzeci układ blokowy ma parametry: $t = 5$, $b_3 = 5$, $r_3 = 4$, $k_3 = 4$, $\lambda_3 = 3$. Macierz incydencji N_3 tego układu jest postaci:

$$N_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix};$$

Macierz M_{03} z pierwiastkami charakterystycznymi 0 oraz $\nu_3 = 1/16$ o krotności 4 jest równa

$$M_{03} = \frac{1}{80}\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Połączmy ze sobą te trzy układy zapisując macierze incydencji jedną obok drugiej. Otrzymujemy wówczas układ o macierzy incydencji $N = [N_1 N_2 N_3]$ z parametrami: $t = 5$, $b = b_1+b_2+b_3 = 25$, $r = r_1+r_2+r_3 = 14$, $k_1 = 2$, $k_2 = 3$, $k_3 = 4$, $\lambda = \lambda_1+\lambda_2+\lambda_3 = 7$. Macierz M_0 dla całego układu z pierwiastkami charakterystycznymi 0 i $\nu = (r_1\nu_1+r_2\nu_2+r_3\nu_3)/r = 11/56$ o krotności 4 jest równa:

$$M_0 = \frac{11}{280}\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Macierz $\boldsymbol{\Omega}$ potrzebna do obliczenia sumy kwadratów dla obiektów i błędu oraz do estymacji wektora parametrów γ jest postaci:

$$\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{3150}\begin{bmatrix} 269 & -11 & -11 & -11 & -11 \\ -11 & 269 & -11 & -11 & -11 \\ -11 & -11 & 269 & -11 & -11 \\ -11 & -11 & -11 & 269 & -11 \\ -11 & -11 & -11 & -11 & 269 \end{bmatrix}.$$

Prace cytowane

[1] T. Caliński, *On some desirable patterns in block designs*, Biometrics 27 (1971), str. 275–292.

[2] B. Ceranka, *Układy doświadczalne o blokach niekompletnych. Teoria i zastosowanie*, Trzecie Colloquium Metodologiczne z Agro-Biometrii, Warszawa 1973, PAN, str. 143–212.

[3] S. Gnot, *Średnia efektywność układów blokowych*, Mat. Stos. 5 (1975), str. 89–102.

[4] R. M. Jones, *On a property of incomplete block*, J. Royal Stat. Soc. B 21 (1959), str. 172–179.

[5] M. G. Kendall and A. Stuart, *The advanced theory of statistics*, vol. 3. Griffin, London 1966.

[6] K. D. Tocher, *The design and analysis of block experiments*, J. Royal Stat. Soc. B 14 (1952), str. 45–91.