บทที่ 4

เทคนิคการคำนวณ

หน้า

4.1 การหาผลเฉลยของระบบสมการสมมาตร

(System of Symmetric Equations)

4.1.1 วิธีดูลิตเติล

4.1.2 การประยุกต์ใช้วิธีดูลิตเติลกับปัญหาของการวิเคราะห์ความแปรปรวนสำหรับแบบจำลองที่ 1

4.1.3 การแสดงตาราง ANOVA ในอีกรูปแบบหนึ่ง

4.2 การหาเมตริกซ์ผกผันของเมตริกซ์สมมาตร

4.2.1 เมตริกซ์ผกผัน

4.2.2 กรณีทั่ว ๆ ไป

4.2.3 ตัวอย่างการใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อ

แบบฝึกหัดบทที่ 4

บทที่ 4

เทคนิคการคำนวณ

จากแบบจำลอง $Y = X\beta + e$ นั้น ในการหา $\hat{\beta}$ เราอาจหาได้โดยตรงจากการหาผลเฉลยของ Normal equations $(X'X)\hat{\beta} = X'Y$ โดยไม่ต้องหาค่า $(X'X)^{-1}$ ได้ แต่เรายังต้องการหา Var-Cov เมตริกซ์ของ $\hat{\beta}$ ซึ่งคือ $(X'X)^{-1}\sigma^2$ ในบทนี้จะแสดงวิธีหาผลเฉลยของ Normal equations โดยไม่ต้องหา $(X'X)^{-1}$ และจะแสดงการหา $(X'X)^{-1}$ ด้วย

4.1 <u>การหาผลเฉลยของระบบสมการสมมาตร (System of Symmetric Equations)</u>

4.1.1 <u>วิธีดูลิตเติล</u>

ในการหาผลเฉลยของ Normal equations $X'X\hat{\beta} = X'Y$

โดยที่ $X'X$ คือเมตริกซ์สมมาตรที่ทราบค่า

และ $X'Y$ คือเวคเตอร์ที่ทราบค่า

เราจะใช้วิธีการที่เรียกว่า **<u>Forward Solution ของวิธีดูลิตเติล</u>** โดยศึกษาจากตัวอย่างต่อไปนี้

ต้องการหาผลเฉลยของระบบ:

$$\begin{aligned} 2\hat{\beta}_1 + 4\hat{\beta}_2 + 2\hat{\beta}_3 &= 6 \\ 4\hat{\beta}_1 + 10\hat{\beta}_2 + 2\hat{\beta}_3 &= 18 \qquad \ldots(1) \\ 2\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + 12\hat{\beta}_3 &= -16 \end{aligned}$$

หรือเขียนในรูปเมตริกซ์:

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 10 & 2 \\ 2 & 2 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 18 \\ -16 \end{bmatrix}$$

และเขียนเมตริกซ์แต่งเติมแล้ว (augmented matrix)

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 4 & 2 & 6 \\ 4 & 10 & 2 & 18 \\ 2 & 2 & 12 & -16 \end{array}\right]$$

<u>วิธีการ</u> คือพยายามลดรูปเมตริกซ์ทางซ้ายของเมตริกซ์แต่งเติมแล้วให้เป็นเมตริกซ์ชนิด unit upper triangular โดยใช้ row operations ผลจากการทำดังกล่าวแสดงในตารางที่ 4.1 โดยที่คอลัมน์ชื่อ Check นั้นคือผลบวกของสมาชิกในแถวนั้น ๆ ซึ่งใช้เพื่อการตรวจสอบ Instruction นั้นทำกับสมาชิกในแถวทุกตัว รวมทั้งกับคอลัมน์ Check ด้วย

จากแถว R_{10}, R_{11} และ R_{12} เราหา $\hat{\beta}_i$ ได้ดังนี้

จาก R_{12} ได้ $\hat{\beta}_3 = -2$ แทนค่าใน R_{11} เราได้ $\hat{\beta}_2 = 1$

และจาก R_{10} เราได้ $\hat{\beta}_1 = 3$

ตารางที่ 4.1

การลดรูปของระบบสมการ (1) ให้เป็นระบบสามเหลี่ยม

Instruction	Row	C_1	C_2	C_3	C_0	Check(sum)
	R_1	2	4	2	6	14
	R_2	4	10	2	18	34
	R_3	2	2	12	-16	0
$R_1/2$	R_4	1	2	1	3	7
$R_2 - 2R_1$	R_5	0	2	-2	6	6
$R_3 - R_1$	R_6	0	-2	10	-22	-14
R_4	R_7	1	2	1	3	7
$R_5/2$	R_8	0	1	-1	3	3
$R_6 + R_5$	R_9	0	0	8	-16	-8
R_7	R_{10}	1	2	1	3	7
R_8	R_{11}	0	1	-1	3	3
$R_9/8$	R_{12}	0	0	1	-2	-1

จาก R_{12}: $\hat{\beta}_3 = -2$

จาก R_{11}: $\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3 = 3$

และ R_{10}: $\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 = 3$

เราอาจย่อขั้นตอนในตารางที่ 4.1 โดยเทคนิคที่เรียกว่า **วิธีดูลิตเติลอย่างย่อ (Abbreviated Doolittle Method)** วิธีดังกล่าวซึ่งทำกับระบบ (1) ได้แสดงไว้ในตารางที่ 4.2

ตารางที่ 4.2

วิธีดูลิตเติลอย่างย่อสำหรับการหาผลเฉลยของระบบสมการ (1)

Instruction	Row	C_1	C_2	C_3	C_0	Check(sum)
	R_1'	2	4	2	6	14
	R_2'	(4)	10	2	18	34
	R_3'	(2)	(2)	12	-16	0
R_1'	R_1	2	$\boxed{4}$	2	6	14
$R_1/2$	r_1	1	2	1	3	7
$R_{2j}' - \boxed{R_{12}} r_{1j}$	R_2	*	2	-2	6	6
$R_2/2$	r_2	*	1	-1	3	3
$R_{3j}' - R_{13} r_{1j} - R_{23} r_{2j}$	R_3	*	*	8	-16	-8
$R_3/8$	r_3	*	*	1	-2	-1

เราหา $\hat{\beta}_i$ จาก r_1, r_2 และ r_3

เราเรียก $\boxed{R_{12}}$, R_{13} และ R_{23} ว่า "pivot"

ตัวอย่างการคำนวณตาม Instruction

จากตารางที่ 4.2

$$R_{22} = R_{22}' - \boxed{R_{12}}\, r_{12} = 10 - 4(2) = 2$$

$$R_{23} = R_{23}' - \boxed{R_{12}}\, r_{13} = 2 - 4(1) = -2$$

$$R_{20} = R_{20}' - \boxed{R_{12}}\, r_{10} = 18 - 4(3) = 18 - 12 = 6$$

$$R_{2c} = R_{2c}' - \boxed{R_{12}}\, r_{1c} = 34 - 4(7) = 34 - 28 = 6$$

$R_{33} = R_{33}' - R_{13}\, r_{13} - R_{23}\, r_{23} = 12 - (2)(1) - (-2)(-1) = 8$

$R_{30} = R_{30}' - R_{13}\, r_{10} - R_{23}\, r_{20} = -16 - (2)(3) - (-2)(3) = -16$

$R_{3c} = R_{3c}' - R_{13}\, r_{1c} - R_{23}\, r_{2c} = 0 - (2)(7) - (-2)(3) = -8$

จาก r_3: $\hat{\beta}_3 = -2$

จาก r_2: $\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3 = 3$ ดังนั้น $\hat{\beta}_2 = 1$

จาก r_1: $\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 = 3$ ดังนั้น $\hat{\beta}_1 = 3$

นั่นคือ $\hat{\beta}' = [3 \quad 1 \quad -2]$

4.1.2 การประยุกต์ใช้วิธีดูลิตเติลกับปัญหาของการวิเคราะห์ความแปรปรวน สำหรับแบบจำลองที่ 1

ถ้าระบบ (1) เป็นเซตของ Normal equations ให้ใช้ X'Y เป็นคอลัมน์ C_o

$$R(\beta) = \hat{\beta}'X'Y = [3 \quad 1 \quad -2]\begin{bmatrix} 6 \\ 18 \\ -16 \end{bmatrix} = 3(6) + 1(18) + (-2)(-16)$$

$$= 68$$

จากตารางที่ 4.2 เราหา $R(\beta)$ ได้ง่าย ๆ จากสูตร

$$R(\beta) = \hat{\beta}'X'Y = R_{10}r_{10} + R_{20}r_{20} + R_{30}r_{30}$$

$$= 6(3) + 6(3) + (-16)(-2) = 68$$

1) สมมุติว่าเราต้องการทดสอบ H_o: $\beta_3 = 0$

เราจะต้องทราบ 1. $R(\beta) = \hat{\beta}'X'Y$

2. $R(\gamma_1) = \tilde{\gamma}_1'X_1'Y$ โดยที่ $\tilde{\gamma}_1 = \begin{bmatrix} \tilde{\beta}_1 \\ \tilde{\beta}_2 \end{bmatrix}$ ซึ่งคือผลเฉลยของ

Normal equations ใน (1) ซึ่ง $\hat{\beta}_3 = 0$ และสมการที่ 3 ใน (1) ไม่มี

นั่นคือเราหาผลเฉลยของ 2 สมการ $2\tilde{\beta}_1 + 4\tilde{\beta}_2 = 6$

$4\tilde{\beta}_1 + 10\tilde{\beta}_2 = 18$ ...(2)

และหา $R(ข_1) = \tilde{ข}_1{}'X_1{}'Y = \tilde{\beta}_1(6) + \tilde{\beta}_2(18)$

ดังนั้น $R(ข_2 | ข_1) = R(\beta) - R(ข_1) = \hat{\beta}'X'Y - \tilde{ข}_1{}'X_1{}'Y$

จากตารางที่ 4.2 ระบบสมการซึ่งถูกลดรูปแล้วใน (2) คือ แถว $R_1{}'$ และ $R_2{}'$ โดยที่ตัดคอลัมน์ C_3 ออกเสีย

ดังนั้นผลเฉลยจะได้จากแถว r_1 และ r_2 ถ้าไม่เอาคอลัมน์ C_3 และคอลัมน์ Check

จาก r_2: $\tilde{\beta}_2 = 3$

จาก r_1: $\tilde{\beta}_1 + 2\tilde{\beta}_2 = 3$ ดังนั้น $\tilde{\beta}_1 = -3$

และเพราะว่า $X_1{}'Y = \begin{bmatrix} 6 \\ 18 \end{bmatrix}$

ดังนั้น $R(ข_1) = \tilde{ข}_1{}'X_1{}'Y = [-3 \quad 3]\begin{bmatrix} 6 \\ 18 \end{bmatrix} = (-3)(6) + (3)(18) = 36$

ซึ่งอาจหาได้จากตารางที่ 4.2 ตามสูตร $R(ข_1) = R_{10}r_{10} + R_{20}r_{20}$

$$R(\beta_1, \beta_2) = 6(3) + 6(3) = 36$$

ดังนั้น

$$\begin{aligned} R(ข_2 | ข_1) &= R(\beta) - R(ข_1) \\ &= \hat{\beta}'X'Y - \tilde{ข}_1{}'X_1{}'Y \\ &= 68 - 36 = 32 \\ &= R_{30}r_{30} \quad = (-16)(-2) \end{aligned}$$

พิสูจน์ $R(ข_2 | ข_1) = R(\beta) - R(ข_1)$

$$= (R_{10}r_{10} + R_{20}r_{20} + R_{30}r_{30}) - (R_{10}r_{10} + R_{20}r_{20})$$

$$= R_{30}r_{30}$$

2) ถ้าเราต้องการทดสอบ $H_0: \beta_2 = \beta_3 = 0$

เราต้องหา $R(\beta_2, \beta_3 | \beta_1)$ โดยที่

$$\begin{aligned} R(\beta_2, \beta_3 | \beta_1) &= R_{20}r_{20} + R_{30}r_{30} \\ &= 3(6) + (-2)(-16) = 50 \end{aligned}$$

3) ถ้าเราต้องการทดสอบ $H_o: \beta_1 = 0$

เราต้องหา $R(\beta_1 | \beta_2, \beta_3)$ ซึ่งไม่สามารถหาได้ทันทีจากตารางที่ 4.2 วิธีการหาคือเปลี่ยนระบบ (1) ให้ $\hat{\beta}' = [\hat{\beta}_3 \quad \hat{\beta}_2 \quad \hat{\beta}_1]$ แล้วสร้างตารางแบบเดียวกับตารางที่ 4.2 เสียใหม่ เมื่อได้ระบบเป็นรูปสามเหลี่ยมแล้ว แถวที่ 3 จะให้ผลเฉลยของ β_1

ดังนั้น ถ้าให้ $\hat{\beta}' = [\hat{\beta}_3 \quad \hat{\beta}_2 \quad \hat{\beta}_1]$
จะได้ระบบซึ่ง equivalent กับระบบใน (1) ดังนี้

$$E_1: \ 12\hat{\beta}_3 + 2\hat{\beta}_2 + 2\hat{\beta}_1 = -16$$
$$E_2: \ 2\hat{\beta}_3 + 10\hat{\beta}_2 + 4\hat{\beta}_1 = 18$$
$$E_3: \ 2\hat{\beta}_3 + 4\hat{\beta}_2 + 2\hat{\beta}_1 = 6$$

ดังนั้นเมตริกซ์แต่งเติมแล้วคือ
$$\left[\begin{array}{ccc|c} 12 & 2 & 2 & -16 \\ 2 & 10 & 4 & 18 \\ 2 & 4 & 2 & 6 \end{array}\right]$$

ผลเฉลยของระบบใน (3) คือ $\hat{\beta}' = [-2 \quad 1 \quad 3]$
นั่นคือ $\hat{\beta}_3 = -2, \ \hat{\beta}_2 = 1, \ \hat{\beta}_1 = 3$

<u>**ทฤษฎีที่ 4.1**</u> ในการทดสอบ $H_o: \gamma_2 = 0$
ในแบบจำลองที่ 1 ซึ่งอยู่ในรูป $Y = X_1\gamma_1 + X_2\gamma_2 + e$
โดยที่ γ_1 คือเวคเตอร์ขนาด (k x 1) และ Normal equations
คือ $X'X\hat{\beta} = X'Y$ ให้จัด Normal equations ในรูปของตารางที่ 4.2
โดยให้สัมประสิทธิ์ของพารามิเตอร์ใน γ_2 อยู่ในคอลัมน์ทางขวาของเมตริกซ์
และจะถูกลดรูปเป็นเมตริกซ์สามเหลี่ยมโดยการใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อ
แล้วผลบวกกำลังสองของความคลาดเคลื่อน (error sum of squares)
คือ

$$Y'Y - \sum_{i=1}^{p} R_{io} r_{io}$$

และ reduction due to γ_2 adjusted for γ_1 คือ

$$R(\gamma_2 | \gamma_1) = \sum_{i=k+1}^{p} R_{io} r_{io}$$

4.1.3 การแสดงตาราง ANOVA ในอีกรูปแบบหนึ่ง

เราอาจพบเมตริกซ์ X ในแบบจำลองที่ 1 ซึ่งมีคอลัมน์ที่ 1 เป็น 1 หมด ซึ่งทำให้แบบจำลองที่ 1 อยู่ในรูป

$$y_j = \beta_o + \sum_{i=1}^{p-1} x_{ji}\beta_i + e_j, \; j = 1, \ldots, n \qquad \ldots(4)$$

บวกและลบด้านขวาของ (4) ด้วย $\sum_{i=1}^{p-1} \beta_i \bar{x}_i$ เราจะได้ $[\, \bar{x}_i = (\sum_{j=1}^{n} x_{ij})/n]$

$$y_j = \beta_o + \sum_{i=1}^{p-1} x_{ji}\beta_i + \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i\bar{x}_i - \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i\bar{x}_i + e_j$$

$$y_j = (\beta_o + \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i\bar{x}_i) + \sum_{i=1}^{p-1} (x_{ji} - \bar{x}_i)\beta_i + e_j$$ ซึ่งเรียกว่า

<u>**"Reparametized model"**</u>

ให้ $z_{ji} = (x_{ji} - \bar{x}_i)$, $z_{jo} = 1$ และ $\beta_o + \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i\bar{x}_i = \mu$

เราจะได้แบบจำลอง

$$y_j = \mu z_{jo} + \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i z_{ji} + e_j \; , \; j = 1, \ldots, n$$

หรือเขียนในรูปเมตริกซ์: $Y = Z\beta + e$

โดยที่ $\beta' = [\mu \quad \beta_1 \ \ldots \ \beta_{p-1}]$ และ $\mu = \beta_o + \sum_{i=1}^{p-1} \beta_i \bar{X}_i$

ถ้าให้ $\gamma_1 = \mu$ และ Z_1 คือคอลัมน์เวคเตอร์ขนาด $(n \times 1)$ ซึ่งมีสมาชิกเป็น 1 หมด เราอาจเขียนแบบจำลองเป็น

$$Y = Z_1\gamma_1 + Z_2\gamma_2 + e$$

และจะเห็นว่า γ_1 และ γ_2 ออร์ธอโกนอลกันเพราะ $Z_1'Z_2 = 0$

ดังนั้นเมื่อใดก็ตามที่เราเขียนแบบจำลองได้ในรูป (4) และใช้ส่วนเบี่ยงเบนของ x_{ji} ซึ่งคือ $(x_{ji} - \bar{x}_i)$ เราจะได้ว่า μ นั้นออร์ธอโกนอลกับ β_i's อื่น ๆ และ

$$R(\mu, \beta_1, \ldots, \beta_{p-1}) = R(\mu) + R(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_{p-1})$$

เราเรียก $R(\mu)$ ว่า "Reduction due to the mean" และ

$$R(\mu) = (\Sigma y_i)^2/n = n\bar{y}^2$$

ถ้าเราต้องการทดสอบ $H_o: \beta_{p-k} = \beta_{p-k+1} = \ldots = \beta_{p-1} = 0$ เราจะสร้างตาราง ANOVA ตามตารางที่ 4.3

ตารางที่ 4.3

ANOVA สำหรับการทดสอบ $H_0: \beta_{p-k} = \beta_{p-k+1} = \ldots = \beta_{p-1} = 0$

SV	df	MS
$R(\beta)=R(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_{p-1})$	p-1	$R(\beta) = \sum_{i=1}^{p-1} R_{i0}^* r_{i0}^*$
$R(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_{p-k-1})$	p-k-1	$\sum_{i=1}^{p-k-1} R_{i0}^* r_{i0}^*$
$R(\beta_{p-k},\ldots,\beta_{p-1} \mid \beta_1,\ldots,\beta_{p-k-1})$	k	$\sum_{i=p-k}^{p-1} R_{i0}^* r_{i0}^*$
Error	n-p	SST - $R(\beta)$
Total(corrected)	n-1	$SST = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2$

ค่า r_{i0}^* และ R_{i0}^* ได้จากตารางทำนองเดียวกับตารางที่ 4.2 ยกเว้นเมตริกซ์ที่จะใช้มีขนาด $(p-1) \times (p-1)$ และสมาชิกเป็นแบบ corrected (diviations from the mean! sum of squares และ cross products แถวและคอลัมน์ที่สมนัยกับ μ จะไม่มี สมาชิกในคอลัมน์ C_0 คือ corrected cross products ของค่า x และ y

<u>**ตัวอย่างที่ 4 . 1**</u> แบบจำลอง: $y_j = \alpha + \beta x_j + e_j$, $j = 1,\ldots, n$ ...(5)

ถ้า $\bar{x} = (\sum_{j=1}^{n} x_j)/n$

$y_j = \mu + \beta(x_j - \bar{x}) + e_j$ (reparametized model)

$y_j = \mu + \beta x_j - \beta\bar{x} + e_j$

ดังนั้น $y_j = (\mu - \beta\bar{x}) + \beta x_j + e_j$ ...(6)

(5) และ (6) เหมือนกัน โดยที่ $a = \mu - \beta\bar{x}$

Reparametized model ในรูปเมตริกซ์คือ $Y = Z\beta + e$

โดยที่

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & x_1 - \bar{x} \\ 1 & x_2 - \bar{x} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n - \bar{x} \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \mu \\ \beta \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad e = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}$$

$$Z'Z = \begin{bmatrix} n & 0 \\ 0 & \sum_{j=1}^{n} (x_j - \bar{x})^2 \end{bmatrix}, \quad Z'Y = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n} y_j \\ \sum_{j=1}^{n} y_j(x_j - \bar{x}) \end{bmatrix}$$

"corrected sum of squares"

"corrected cross products ของค่า x และ y"

Normal equations : $Z'Z\beta = Z'Y$

$$\begin{bmatrix} n & 0 \\ 0 & \sum_{j=1}^{n} (x_j - \bar{x})^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mu} \\ \hat{\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n} y_j \\ \sum_{j=1}^{n} y_j(x_j - \bar{x}) \end{bmatrix}$$

$$n\hat{\mu} = \Sigma\, y_j \qquad \ldots(7)$$

$$\hat{\beta}\,\Sigma(x_j - \bar{x})^2 = \Sigma\, y_j(x_j - \bar{x}) \qquad \ldots(8)$$

จาก (7): $\hat{\mu} = (\Sigma\, y_j)/n$

จาก (8): $\hat{\beta} = \Sigma\, y_j(x_j - \bar{x}) / \Sigma(x_j - \bar{x})^2$

ดังนั้น $\hat{\alpha} = \hat{\mu} - \hat{\beta}\bar{x}$

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}) = (Z'Z)^{-1}\sigma^2$$

$$= \begin{bmatrix} 1/n & 0 \\ 0 & 1/[\sum_{j=1}^{n} (x_j - \bar{x})^2] \end{bmatrix} \sigma^2$$

ดังนั้น

$$\mathrm{Var}(\hat{\mu}) = \sigma^2/n$$

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}) = \sigma^2/\Sigma(x_j - \bar{x})^2$$

$$\mathrm{Cov}(\hat{\mu},\hat{\beta}) = 0$$

เนื่องจากว่า $\hat{\alpha} = \hat{\mu} - \hat{\beta}\bar{x}$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\hat{\alpha}) &= \mathrm{Var}(\hat{\mu}) + \bar{x}^2\mathrm{Var}(\hat{\beta}) - 2\bar{x}\mathrm{Cov}(\hat{\mu},\hat{\beta}) \\ &= \sigma^2/n + \bar{x}^2\sigma^2/\Sigma(x_j - \bar{x})^2 \\ &= \sigma^2[\ (1/n) + \bar{x}^2/\Sigma(x_j - \bar{x})^2\ ] \\ &= \sigma^2[\Sigma(x_j - \bar{x})^2 - n\bar{x}^2]/n\Sigma(x_j - \bar{x})^2 \\ &= \sigma^2[\Sigma x_j^2/n\Sigma(x_j - \bar{x})^2] \\ &= \sigma^2\Sigma x_j^2/[n\Sigma x_j^2 - (\Sigma x_j)^2]\end{aligned}$$

<u>ตัวอย่างที่ 4.2</u> แบบจำลอง: $y_j = \beta_0 + \beta_1 x_{j1} + \beta_2 x_{j2} + \beta_3 x_{j3} + e_j,$

$$j = 1,\ldots,n \qquad \ldots(9)$$

โดยที่ $\bar{x}_i = (\sum_{j=1}^{n} x_{ji})/n$

$$y_j = \mu + \beta_1(x_{j1} - \bar{x}_1) + \beta_2(x_{j2} - \bar{x}_2) + \beta_3(x_{j3} - \bar{x}_3) + e_j$$

ซึ่งคือ "reparametized model"

$$y_j = (\mu - \beta_1\bar{x}_1 - \beta_2\bar{x}_2 - \beta_3\bar{x}_3) + \beta_1 x_{j1} + \beta_2 x_{j2} + \beta_3 x_{j3} + e_j \qquad \ldots(10)$$

(9) และ (10) เหมือนกัน โดยที่ $\beta_0 = \mu - \beta_1\bar{x}_1 - \beta_2\bar{x}_2 - \beta_3\bar{x}_3$

Reparametized model ในรูปเมตริกซ์คือ $Y = Z\beta + e$

โดยที่

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} - \bar{x}_1 & x_{12} - \bar{x}_2 & x_{13} - \bar{x}_3 \\ 1 & x_{21} - \bar{x}_1 & x_{22} - \bar{x}_2 & x_{23} - \bar{x}_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} - \bar{x}_1 & x_{n2} - \bar{x}_2 & x_{n3} - \bar{x}_3 \end{bmatrix}_{n\times 4}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \mu \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix}_{4\times 1}$$

$Z'Z =$

$$\begin{bmatrix} n & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1) & \Sigma(x_{j2}-\bar{x}_2) & \Sigma(x_{j3}-\bar{x}_3) \\ \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1) & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1)^2 & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{j2}-\bar{x}_2) & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{j3}-\bar{x}_3) \\ \Sigma(x_{j2}-\bar{x}_2) & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{j2}-\bar{x}_2) & \Sigma(x_{j2}-\bar{x}_2)^2 & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{j2}-\bar{x}_2) \\ \Sigma(x_{j3}-\bar{x}_3) & \Sigma(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{j3}-\bar{x}_3) & \Sigma(x_{j2}-\bar{x}_2)(x_{j3}-\bar{x}_3) & \Sigma(x_{j3}-\bar{x}_3)^2 \end{bmatrix}_{4\times 4}$$

$$= \left[\begin{array}{c|ccc} n & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ 0 & S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ 0 & S_{31} & S_{23} & S_{33} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|ccc} n & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & \\ 0 & & S_{3\times 3} & \\ 0 & & & \end{array}\right]_{4\times 4}$$

โดยที่ $S_{kl} = \sum_{j=1}^{n}(x_{jk} - \bar{x}_k)(x_{jl} - \bar{x}_l) = \sum_{j=1}^{n} x_{jk}x_{jl} - (\sum_{j=1}^{n} x_{jk})(\sum_{j=1}^{n} x_{jl})/n$

$$Z'Y = \begin{bmatrix} \Sigma\ y_j \\ \Sigma\ y_j(x_{j1} - \bar{x}_1) \\ \Sigma\ y_j(x_{j2} - \bar{x}_2) \\ \Sigma\ y_j(x_{j3} - \bar{x}_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma y_j \\ S_{1y} \\ S_{2y} \\ S_{3y} \end{bmatrix}$$

โดยที่ $S_{iy} = \sum_{j=1}^{n} y_j(x_{ji} - \bar{x}_i)$

$$= \sum_{j=1}^{n} x_{ji}y_j - (\sum_{j=1}^{n} x_{ji})(\sum_{j=1}^{n} y_j)/n$$

Normal equations: $Z'Z\,\hat{\beta} = Z'Y$

ดังนั้น $n\hat{\mu} = \sum_{j=1}^{n} y_j$ นั่นคือ $\hat{\mu} = (\sum_{j=1}^{n} y_j)/n$

$$S \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{1y} \\ S_{2y} \\ S_{3y} \end{bmatrix}$$

แล้วใช้วิธีตามตารางที่ 4.2 เพื่อหา $\hat{\beta}_1$, $\hat{\beta}_2$ และ $\hat{\beta}_3$

ดังนั้น $\hat{\beta}_0 = \hat{\mu} - \hat{\beta}_1\bar{X}_1 - \hat{\beta}_2\bar{X}_2 - \hat{\beta}_3\bar{X}_3$

4.2 <u>การหาเมตริกซ์ผกผันของเมตริกซ์สมมาตร</u>

4.2.1 <u>เมตริกซ์ผกผัน</u>

ในการหา $(X'X)^{-1}$ นั้นเราใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อ

<u>ตัวอย่างที่ 4.3</u> จากระบบใน (1) $X'X = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 10 & 2 \\ 2 & 2 & 12 \end{bmatrix}$ ต้องการหา $(X'X)^{-1}$

ตารางที่ 4.4

เมตริกซ์ผกผันของ (X'X) ใน (1)

Instruction	Row	C_1	C_2	C_3	C_0	E_1	E_2	E_3	Check(sum)
	R_1'	2	4	2	6	1	0	0	15
	R_2'	(4)	10	2	18	0	1	0	35
	R_3'	(2)	(2)	12	-16	0	0	1	1
R_1'	R_1	2	4	$\boxed{2}$	6	1	0	0	15
$R_1/2$	r_1	1	2	1	3	1/2	0	0	15/2
$R_{2j}'-R_{12}r_{1j}$	R_2	*	2	$\boxed{-2}$	6	-2	1	0	5
$R_2/2$	r_2	*	1	-1	3	-1	1/2	0	5/2
$R_{3j}'-\boxed{R_{13}}r_{1j}$ $-\boxed{R_{23}}r_{2j}$	R_3	*	*	8	-16	-3	1	1	-9
$R_3/8$	r_3	*	*	1	-2	-3/8	1/8	1/8	-9/8
$R_{15}r_{1j}+R_{25}r_{2j}$ $+R_{35}r_{3j}$	B_1					29/8	-11/8	-3/8	
$R_{26}r_{2j}+R_{36}r_{3j}$	B_2						5/8	1/8	
$R_{37}r_{37}$	B_3							1/8	

<u>แสดงการหาค่าในแถว B_1, B_2, และ B_3</u>

$b_{11} = R_{15}r_{15} + R_{25}r_{25} + R_{35}r_{35} = 1(1/2)+(-2)(-1)+(-3)(-3/8)=29/8$

$b_{12} = R_{15}r_{16} + R_{25}r_{26} + R_{35}r_{36} = 1(0)+(-2)(1/2)+(-3))(1/8)=-11/8$

$b_{13} = R_{15}r_{17} + R_{25}r_{27} + R_{35}r_{37} = 1(0)+(-2)(0)+(-3)(1/8) = -3/8$

$b_{22} = R_{26}r_{26} + R_{36}r_{36} = 1(1/2) + 1(1/8)= 5/8$

$b_{23} = R_{26}r_{27} + R_{36}r_{37} = 1(0) + 1(1/8) = 1/8$

$b_{33} = R_{37}r_{37} = 1(1/8)= 1/8$

$$\text{ดังนั้น } B = \begin{bmatrix} 29/8 & -11/8 & -3/8 \\ -11/8 & 5/8 & 1/8 \\ -3/8 & 1/8 & 1/8 \end{bmatrix} = (1/8)\begin{bmatrix} 29 & -11 & -3 \\ -11 & 5 & 1 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix} = (X'X)^{-1}$$

นอกจากนั้นตารางที่ 4.4 เราสามารถหา $\det(X'X) = |X'X| = R_{11}R_{22}R_{33}$

$= 2(2)(8) = 32$

<u>หมายเหตุ</u> ให้ตรวจสอบว่า $(X'X)(X'X)^{-1} = I$

โดยที่

$$X'X = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 10 & 2 \\ 2 & 2 & 12 \end{bmatrix}, \quad (X'X)^{-1} = (1/8)\begin{bmatrix} 29 & -11 & -3 \\ -11 & 5 & 1 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

4.2.2 กรณีทั่ว ๆ ไป

การหาเมตริกซ์ผกผันสำหรับเมตริกซ์สมมาตรขนาด (p x p) นั้นทำทำนองเดียวกับตารางที่ 4.4 เพียงแต่ว่าเราจะมีแถวและคอลัมน์เพิ่มขึ้น สูตรในการหาเมตริกซ์ผกผันสำหรับเมตริกซ์สมมาตรขนาด (p x p) ดังแสดงในตารางที่ 4.5

ในตารางที่ 4.5

Instruction A_t หมายความว่า ให้หารสมาชิกในแถวนั้นด้วยสมาชิกที่ไม่เป็นศูนย์ตัวแรกของแถว R_t

ตารางที่ 4.5

รูปแบบของวิธีดูลิตเติลอย่างย่อสำหรับเมตริกซ์สมมาตรขนาด (p x p)

Instruction	Row	C_1 C_2 C_3 ... C_p C_o E_1 E_2 ... E_p
	R_1' : R_p'	
R_1' A_1	R_1 r_1	
$R_{2j}' - R_{12}r_{1j}$ A_2	R_2 r_2	
	:	
$R_{tj}' - \sum_{q=1}^{t-1} R_{qt}r_{qj}$ A_t	R_t r_t	
	:	
$R_{pj}' - \sum_{q=1}^{p-1} R_{qp}r_{qj}$ A_p	R_p r_p	
$\sum_{i=1}^{p} R_{i,p+2}r_{ij}$	B_1	
$\sum_{i=2}^{p} R_{i,p+3}r_{ij}$	B_2	
	:	
$\sum_{i=t}^{p} R_{i,p+t+1}r_{ij}$	B_t	
	:	
$R_{p,2p+1}r_{p,2p+1}$	B_p	

4.2.3 ตัวอย่างการใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อ

จากการวัดปริมาณสารต่าง ๆ ในน้ำนมวัว เราต้องการหาฟังก์ชันที่แสดงความสัมพันธ์ของสารอาหารเหล่านี้คือ solids nonfat ไขมัน และ โปรตีน

สมมุติว่าเราต้องการประมาณปริมาณโปรตีน (y) โดยใช้ความรู้เกี่ยวกับปริมาณไขมัน (x_1) และปริมาณ solids nonfat (x_2) ในน้ำนมวัว ด้วยสมการ

$$y_j = \alpha + \beta_1 x_{j1} + \beta_2 x_{j2} + e_j \ , \ j = 1, \ldots, 16$$

จากวัว 16 ตัว ได้ค่าต่าง ๆ ในตารางที่ 4.6

ตารางที่ 4.6

ข้อมูลสำหรับตัวอย่างในหัวข้อ 4.2.3

โปรตีน y	ไขมัน x_1	Solids nonfat x_2	โปรตีน y	ไขมัน x_1	Solids nonfat x_2
3.75	4.74	9.50	3.16	3.36	8.86
3.19	3.66	8.56	3.65	3.64	9.21
2.99	4.27	8.54	3.36	3.92	8.93
3.46	4.03	8.62	3.60	2.99	9.16
3.27	3.51	9.35	3.87	3.28	8.45
3.27	3.97	8.39	3.14	3.23	9.09
2.78	3.23	7.87	3.00	3.65	8.36
3.59	3.79	9.33	3.18	4.23	9.28

ต้องการทดสอบ H_0: $\beta_1 = \beta_2 = 0$ ในที่นี้จะใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อสำหรับหา uncorrected sum of squares และ corrected sum of squares (ใน reparametized model) และจะหา $(X'X)^{-1}$ และ $(Z'Z)^{-1}$ ด้วย

1) Normal equations

สำหรับแบบจำลอง: $y_i = \alpha + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + e_i$ คือ $X'X\hat{\beta} = X'Y$

$$\begin{bmatrix} 16.00 & 59.50 & 141.50 \\ 59.50 & 224.47 & 527.01 \\ 141.50 & 527.01 & 1254.57 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 53.26 \\ 198.28 \\ 472.10 \end{bmatrix}$$

ตารางที่ 4.7 ในหน้าถัดไป แสดงการใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อเพื่อหาสิ่งต่าง ๆ ที่ต้องการ

จากตารางที่ 4.7

จาก r_3: $\hat{\beta}_2 = 0.342566$

จาก r_2: $\hat{\beta}_1 + 0.2518041\hat{\beta}_2 = 0.068461$

ดังนั้น $\hat{\beta}_1 = 0.068461 - 0.0862595 = -0.0177985$

จาก r_1: $\hat{\alpha} + 3.71875\hat{\beta}_1 + 8.84375\hat{\beta}_2 = 3.32875$

ดังนั้น $\hat{\alpha} = 3.32875 - 2.9633799$

$= 0.3653701$

ตารางที่ 4.7

วิธีดูลิตเติลอย่างย่อสำหรับข้อมูลในตารางที่ 4.6

Row	C_1	C_2	C_3	C_0	E_1	E_2	E_3	Check(sum)
R_1'	16.0	59.50	141.50	53.26	1	0	0	271.26
R_2'	(59.5)	224.47	527.01	198.28	0	1	0	1010.26
R_3'	(141.5)	(527.01)	1254.57	472.10	0	0	1	2396.18
R_1	16.0	59.50	141.50	53.26	1	0	0	271.26
r_1	1.0	3.71875	8.84375	3.32875	0.0625	0	0	16.95375
R_2	*	3.204375	0.806875	0.219375	-3.718750	1.0	0	1.511875
r_2	*	1.0	.2518041	0.068461	-1.160523	0.3120733	0	0.471816
R_3	*	*	2.976170	1.019534	-7.907353	-.2518335	1	-3.163395
r_3	*	*	1.0	0.342566	-2.656892	-0.846170	.3360027	-1.062909
B_1					25.387143	-0.419390	-2.656892	
B_2						0.334380	-0.084162	
B_3							0.336003	

จากทฤษฎีที่ 4.1 $R(\beta) = \sum_{i=1}^{3} R_{i0}r_{i0}$

$= (53.26)(3.32875) + (0.219375)(0.068461)$

$+ (1.019534)(0.342566)$

$= 177.65348$

$R(\alpha) = R_{10}r_{10} = n\bar{y}^2$

$= (53.26)(3.32875)$

$= 177.28922$

ดังนั้น $R(\beta_1,\beta_2|\alpha) = 177.65348 - 177.28922$

$= 0.36426$

$Y'Y = \sum_{i=1}^{16} y_i^2 = 178.6592$

ตารางที่ 4.8

ANOVA สำหรับทดสอบ H_0: $\beta_1 = \beta_2 = 0$

SV	df	SS	MS	f
$R(\alpha,\beta_1,\beta_2)$	3	177.65348		
$R(\alpha)$	1	177.28922		
$R(\beta_1,\beta_2\|\alpha)$	2	0.36426	0.18213	2.35(n.s.)
Error	13	1.00572	0.077363	
Total(uncorrected)	16	178.6592		

จากตารางการแจกแจงแบบ F: $f_{(2,13),.05} = 3.81$ และ $f_{(2,13),.01} = 6.70$

จากตารางที่ 4.7 เราได้

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 25.387143 & -0.419390 & -2.656892 \\ -0.419390 & 0.334380 & -0.084162 \\ -2.656892 & -0.084162 & 0.336003 \end{bmatrix}$$

2) พิจารณา Normal equations สำหรับ Reparametized model

$$y_j = \mu + (x_{j1} - \bar{x}_1)\beta_1 + (x_{j2} - \bar{x}_2)\beta_2 + e_j \;, \; j = 1,\ldots,16$$

$$S_{11} = \Sigma\ (x_{j1} - \bar{x}_1)^2 = \Sigma\ x_{j1}^2 - (\ \Sigma\ x_{j1})^2/16 = 3.2018$$

$$S_{12} = \Sigma\ (x_{j1} - \bar{x}_1)(x_{j2} - \bar{x}_2)$$
$$= \Sigma\ x_{j1}x_{j2} - (\ \Sigma\ x_{j1})(\ \Sigma\ x_{j2})/16 = 0.80158$$

$$S_{22} = \Sigma\ (x_{j2} - \bar{x}_2)^2 = \Sigma\ x_{j2}^2 - (\ \Sigma\ x_{j2})^2/16 = 3.1822$$

$$S_{1y} = \Sigma\ y_j(x_{j1} - \bar{x}_1)$$
$$= \Sigma\ y_j x_{j1} - (\ \Sigma\ y_j)(\ \Sigma\ x_{j1})/16 = 0.22198$$

$$S_{2y} = \Sigma\ y_j(x_{j2} - \bar{x}_2)$$
$$= \Sigma\ y_j x_{j2} - (\ \Sigma\ y_j)(\ \Sigma\ x_{j2})/16 = 1.08558$$

Normal equations คือ $Z'Z\ \hat{\beta} = Z'Y$

$$\left[\begin{array}{c|cc} 16 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 3.2018 & 0.80158 \\ 0 & 0.80158 & 3.1822 \end{array}\right] \begin{bmatrix} \hat{\mu} \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 53.26 \\ 0.22198 \\ 1.08558 \end{bmatrix}$$

ตารางที่ 4.9

วิธีดูลิตเติลอย่างย่อสำหรับข้อมูลในตารางที่ 4.6

(Corrected Sum of Squares)

Row	C_1	C_2	C_0	E_1	E_2	Check(sum)
R_1'	3.2018	0.80158	0.22198	1	0	5.22536
R_2'		3.1822	1.08558	0	1	6.06936
R_1	3.2018	0.80158	0.22198	1	0	5.22536
r_1	1.0	0.25035	0.06933	0.31234	0	1.63200
R_2	*	2.98152	1.03001	-0.25035	1.0	4.76118
r_2	*	1.0	0.34546	-0.08397	0.33540	1.59689
B_1				0.33334	-0.08397	
B_2					0.33540	

จาก r_2: $\hat{\beta}_2 = 0.34546$

จาก r_1: $\hat{\beta}_1 + 0.25035\ \hat{\beta}_2 = 0.06933$

ดังนั้น $\hat{\beta}_1 = -0.0171559$

ค่า $\hat{\beta}_1$ และ $\hat{\beta}_2$ จากตารางที่ 4.9 แตกต่างไปจากค่าที่ได้จากตารางที่ 4.7 ($\hat{\beta}_1 = -0.0177985$, $\hat{\beta}_2 = 0.342566$) ซึ่งจริง ๆ แล้วต้องเท่ากัน ทั้งนี้เพราะเกิดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากการปัดเศษในการคำนวณหลาย ๆ ขั้นตอน

จากตารางที่ 4.9

$$R(\beta_1,\beta_2|\alpha) = R_{10}r_{10} + R_{20}r_{20}$$

$$= (0.22198)(0.06933) + (1.03001)(0.34546)$$

$$= 0.371217$$

$$R(\alpha) = n\bar{y}^2 = 177.28922$$

$$\begin{aligned}
SST(corrected) &= Y'Y - n\bar{y}^2 \\
&= 178.6592 - 177.28922 \\
&= 1.36998 \\
SSE &= SST(corrected) - R(\beta_1, \beta_2 | \alpha) \\
&= 0.998763
\end{aligned}$$

ตารางที่ 4.10

ANOVA ของ Corrected Sums of Squares และ Cross Products

SV	df	SS	MS	f
$R(\beta_1, \beta_2 \| \alpha)$	2	0.371217	0.1856085	2.42(n.s.)
Error	13	0.998763	0.0768279	
Total(corrected)	15	1.36998		

<u>หมายเหตุ</u> ในการใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อสำหรับ 1) และ 2) นั้น ควรให้คำตอบที่เท่ากัน ในการคำนวณด้วยเครื่องคิดเลขนั้น ถ้าเป็นไปได้ทุกขั้นตอนให้เก็บทศนิยมทุกตำแหน่งเท่าที่เครื่องแสดงออกมา

ในการหาเมตริกซ์ผกผันของเมตริกซ์ใด ๆ นั้น มีทฤษฎีของ Hotelling ซึ่งจะช่วยปรับปรุงเมตริกซ์ผกผันที่หาได้จากวิธีข้างต้น

<u>ทฤษฎีที่ 4.2</u> ถ้า B คือเมตริกซ์ผกผันที่เหมาะสมของเมตริกซ์ A แล้วเมตริกซ์ซึ่งถูกปรับปรุงแล้วของ B คือ B^* โดยที่

$$B^* = B(2I - AB)$$

สมมุติว่าเราต้องการหา A^{-1} เมื่อ $A = \begin{bmatrix} 2 & -3 \\ -3 & 5 \end{bmatrix}$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \quad (\text{exact } A^{-1})$$

สมมุติเรามี B ซึ่งเป็นเมตริกซ์ผกผันที่เหมาะสมของเมตริกซ์ A

$$B = \begin{bmatrix} 4.989 & 3.011 \\ 3.012 & 1.001 \end{bmatrix} \text{ แล้ว } 2I - AB = \begin{bmatrix} 1.058 & -0.049 \\ -0.093 & 1.078 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น $B^{*} = B(2I - AB) = \begin{bmatrix} 4.908 & 3.001 \\ 3.002 & 1.999 \end{bmatrix}$

ถ้าต้องการความแม่นยำเพิ่มขึ้น ก็สามารถปรับปรุง B^{*} ต่อได้อีก

แบบฝึกหัดบทที่ 4

4.1 จงใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อเพื่อหาผลเฉลยของระบบสมการ

$$3\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 = 7$$

$$2\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 = 5$$

$$\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 + 4\hat{\beta}_3 = -1$$

และจงหาเมตริกซ์ผกผันของเมตริกซ์สัมประสิทธิ์

4.2 ทำซ้ำข้อ 4.1 สำหรับระบบสมการ

$$2\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 + 3\hat{\beta}_3 - \hat{\beta}_4 = 8$$

$$\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_4 = -1$$

$$3\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2 + 3\hat{\beta}_3 - 2\hat{\beta}_4 = 2$$

$$-\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 - 2\hat{\beta}_3 + 4\hat{\beta}_4 = 1$$

4.3 จงทำตัวอย่างที่ 3.4 โดยการใช้วิธีดูลิตเติลอย่างย่อ