

บทที่ 5

แบบจำลองพหุนามหรือแบบจำลองเส้นโค้ง (Polynomial or Curvilinear Models)

หน้า

- 5.1 การประมาณค่าและการทดสอบสมมติฐานในแบบจำลองพหุนาม
- 5.2 การหา Degree ของพหุนามซึ่ง Fit กับข้อมูลที่กำหนดให้
- 5.3 ออร์โธโกนอลพหุนาม (Orthogonal Polynomials)
 - 5.3.1 บทนำ
 - 5.3.2 ออร์โธโกนอลพหุนามสำหรับแบบจำลองชนิดเส้นตรง
 - 5.3.3 การ Fit แบบจำลองกำลังสองโดยออร์โธโกนอลพหุนาม
 - 5.3.4 รูปทั่วไปของออร์โธโกนอลพหุนาม
- 5.4 การทดสอบ Lack of Fit

แบบฝึกหัดบทที่ 5

บทที่ 5

แบบจำลองโพลีโนเมียลหรือแบบจำลองเส้นโค้ง (Polynomial or Curvilinear Models)

แบบจำลองโพลีโนเมียลหรือแบบจำลองเส้นโค้งเป็นการพิเศษของแบบจำลองที่ 1 ซึ่งอยู่ในรูป

$$y_j = \beta_0 + \beta_1 X_j + \beta_2 X_j^2 + \dots + \beta_p X_j^p + e_j$$

สถานการณ์ 2 ชนิดที่อาจใช้แบบจำลองโพลีโนเมียลคือ

1) เมื่อทราบโดยทางทฤษฎีหรือด้วยวิธีอื่นว่าข้อมูลที่มีอยู่ fit กับโพลีโนเมียล degree p หรือน้อยกว่า และต้องการหา maximum likelihood หรือ least-squares estimate ของ β_1 ทหาช่วงความเชื่อมั่น (confidence interval) ของ β_1 และทดสอบสมมติฐานเกี่ยวกับ β_1

2) เมื่อไม่ทราบว่าฟังก์ชันใดที่ fit กับข้อมูล ดังนั้นจึงต้องการที่จะหาว่าโพลีโนเมียล degree ต่ำสุดเท่าใดที่พอที่จะอธิบายลักษณะของข้อมูลได้ (adequately describes the data)

5.1 การประมาณค่าและการทดสอบสมมติฐานในแบบจำลองโพลีโนเมียล

พิจารณาแบบจำลอง

$$y_j = \beta_0 + \beta_1 X_{j1} + \beta_2 X_{j2} + \beta_3 X_{j3} + e_j, \quad j = 1, \dots, n$$

ถ้าให้ $X_{j1} = X_j$, $X_{j2} = X_j^2$, $X_{j3} = X_j^3$ เราจะได้แบบจำลองซึ่งเรียกว่าแบบจำลองโพลีโนเมียล degree 3 นั่นคือ

$$y_j = \beta_0 + \beta_1 X_j + \beta_2 X_j^2 + \beta_3 X_j^3 + e_j$$

ซึ่งที่จริงแล้วคือแบบจำลองที่ 1 นั่นเอง ดังนั้นทฤษฎีในบทที่ 3 จึงใช้กับบทนี้ได้ด้วย

แบบจำลองในรูปเมทริกซ์คือ $Y = X\beta + e$

โดยที่

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, e = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}$$

ดังนั้น

$$X'X = \begin{bmatrix} n & \sum x_j & \sum x_j^2 & \sum x_j^3 \\ \sum x_j & \sum x_j^2 & \sum x_j^3 & \sum x_j^4 \\ \sum x_j^2 & \sum x_j^3 & \sum x_j^4 & \sum x_j^5 \\ \sum x_j^3 & \sum x_j^4 & \sum x_j^5 & \sum x_j^6 \end{bmatrix}, X'Y = \begin{bmatrix} \sum y_j \\ \sum x_j y_j \\ \sum x_j^2 y_j \\ \sum x_j^3 y_j \end{bmatrix}$$

5.2 การหา Degree ของโพลีโนเมียลซึ่ง Fit กับข้อมูลที่กำหนดให้

เท่าที่ผ่านมา จากรูปความสัมพันธ์ $y = f(x)$ นั้น เราทราบรูปแบบของ $f(x)$ ซึ่งประกอบด้วยตัวพารามิเตอร์ที่เราไม่ทราบค่า วิธีการที่เราทำคือรวบรวมข้อมูล (ค่าต่าง ๆ ของ y และ x) แล้วประมาณค่าหรือทดสอบสมมติฐานเกี่ยวกับพารามิเตอร์ใน $f(x)$

ในที่นี้เราจะพิจารณาปัญหาที่ต่างออกไปจากเดิม นั่นคือ "การหารูปแบบฟังก์ชันของ $f(x)$ โดยการใช้ข้อมูลที่มีอยู่เป็นจำนวนน้อย" โดยทั่ว ๆ ไปแล้วปัญหานี้ซับซ้อนมากในหลาย ๆ กรณีคำตอบที่ต้องการอาจไม่มี

มีวิธีหรือหนทางมากมายที่นักวิทยาศาสตร์จะกำหนดรูปแบบของ $f(x)$ ซึ่งอาจกำหนดจากความรู้ซึ่งเกินความจริงพื้นฐาน เช่นการใช้สมการอนุพันธ์ อาจกำหนดโดยให้เหตุผลและโดยอาศัยกฎพื้นฐานที่ทราบอยู่แล้ว อาจรวบรวมข้อมูลจำนวนมาก ๆ ซึ่งมากพอที่จะบอกแนวโน้มที่แท้จริงได้ (certain trends) หรืออาจจะกำหนดฟังก์ชันตามความรู้สึกหรือตามความคิดของเขาเอง

เราจะได้พิจารณาปัญหาที่เมื่อนักวิทยาศาสตร์มีข้อมูลจำนวนไม่มากและไม่มีรูปฟังก์ชันที่ต้องการ และต้องการวิธีที่จะกำหนดฟังก์ชันที่ fit กับข้อมูลที่มีอยู่ และพยายามที่จะหาฟังก์ชันที่ fit กับข้อมูลเป็นอย่างดี (fit the data well)

สมมติว่าเราสามารถกระจาย $f(x)$ ให้อยู่ในรูปอนุกรมของเทย์เลอร์ (Taylor's Series) นั่นคือ

$$y = f(x) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \dots + \theta_k x^k + \dots$$

เราอาจเขียน $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + e_1$ (linear equation)

โดยที่ e_1 คือ remainder ในอนุกรมของเทย์เลอร์ ซึ่งเราเรียกว่า random error ถ้า linear equation ไม่เป็นที่พอใจ เราจะสมมติแบบจำลองใหม่ คือ $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + e_2$ (quadratic equation) โดยที่ e_2 คือ remainder หลังจาก fit quadratic แล้ว เราอาจ fit โพลีโนเมียล degree สูงขึ้น ๆ ตามที่ต้องการ เราจะเห็นได้ชัดว่า ถ้ารูปความสัมพันธ์ที่แท้จริงคือ $y = f(x)$ และ $f(x)$ ไม่อยู่ในรูปโพลีโนเมียล วิธีที่อธิบายมาข้างต้นก็จะไม่สามารถกำหนดรูปแบบที่แท้จริงของ $f(x)$ ได้ แต่เพียงจะช่วยนักทดลองในการหาโพลีโนเมียล ซึ่งมี degree ต่ำ ๆ ที่จะช่วยอธิบายข้อมูลที่มีอยู่ ดังที่ได้กล่าวไว้แล้วว่า แบบจำลองชนิดนี้เป็นไปตามคำจำกัดความ 3.1 (ซึ่งเราสมมติว่า x 's ถูกกำหนดค่าไว้ก่อน และ Y เป็นตัวแปรเชิงสุ่ม)

วิธีการเริ่มต้นด้วยการใช้

linear polynomial : $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + e_1$

แล้วใช้ quadratic polynomial : $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + e_2$

แล้วใช้ cubic polynomial : $y = \gamma_0 + \gamma_1 x + \gamma_2 x^2 + \gamma_3 x^3 + e_3$

เรื่อย ๆ ไป จนกว่าจะได้โพลีโนเมียลที่ fit กับข้อมูลที่ดีที่สุด (best fit)

(โปรดสังเกตว่า สัมประสิทธิ์ของ x ในแต่ละแบบจำลองนั้นแตกต่างกัน และทำนองเดียวกับของ x^2, x^3, \dots) เราทราบว่าโพลีโนเมียล degree $(n-1)$ จะผ่านจุดทั้ง n จุด นั่นคือ fit กับข้อมูลอย่างสมบูรณ์ แต่อย่างไรก็ดีเราไม่ต้องการเช่นนั้น เราต้องการ "โพลีโนเมียลที่มี degree ต่ำ" ที่จะ "แทน (represents)" ข้อมูลของเรา

วิธีหาค่าการถดถอย fit 1-st degree polynomial (linear polynomial)

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x + e_1$$

แล้วทดสอบ $H_0: \alpha_1 = 0$

Normal equations คือ
$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_0 \\ \hat{\alpha}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

หรือ

$$X'K\hat{\alpha} = X'Y$$

และ $R(\alpha_0, \alpha_1) = \hat{\alpha}_0 \sum y_i + \hat{\alpha}_1 \sum x_i y_i = \hat{\alpha}' X' Y$

เทอม $R(\alpha_0) = \hat{\alpha}_0 \sum y_i$ โดยที่ $\hat{\alpha}_0$ คือผลเฉลยของ $n\hat{\alpha}_0 = \sum y_i$

นั่นคือ $\hat{\alpha}_0 = \bar{y}$

ตารางที่ 5.1 ANOVA สำหรับ Linear Polynomial

SV	df	SS	MS	f_c
Due to α_0, α_1	2	$R(\alpha_0, \alpha_1)$		A_1/E_1
Due to α_0	1	$R(\alpha_0)$		
Due to α_1 (adj.)	1	$R(\alpha_1 \alpha_0)$	A_1	
Error	$n-2$	$Y'Y - R(\alpha_0, \alpha_1)$	E_1	
Total	n	$Y'Y$		

จากการทดสอบ $H_0: \alpha_1 = 0$ ถ้าเรายอมรับว่า $\alpha_1 = 0$ เราสรุปว่าสมการ $y = \alpha_0 + e_1$ fit กับข้อมูลพอดี ในทางตรงกันข้าม ถ้าเราไม่ยอมรับสมมติฐาน คือ $\alpha_1 \neq 0$ เราจะ fit 2nd-degree polynomial (quadratic polynomial)

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + e_2$$

$$\text{Normal equations คือ } \begin{bmatrix} n & \sum x_1 & \sum x_1^2 \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1^3 \\ \sum x_1^2 & \sum x_1^3 & \sum x_1^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_1 \\ \sum x_1 y_1 \\ \sum x_1^2 y_1 \end{bmatrix}$$

หรือ

$$X'X\hat{\beta} = X'Y$$

$$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) = \hat{\beta}_0 \sum y_1 + \hat{\beta}_1 \sum x_1 y_1 + \hat{\beta}_2 \sum x_1^2 y_1 = \hat{\beta}' X' Y$$

$$R(\beta_0, \beta_1) = \hat{\beta}_0 \sum y_1 + \hat{\beta}_1 \sum x_1 y_1$$

โดยที่ $\hat{\beta}_0$ และ $\hat{\beta}_1$ เป็นผลเฉลยของ Normal equations

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_1 \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_1 \\ \sum x_1 y_1 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น $R(\beta_0, \beta_1) = R(\alpha_0, \alpha_1)$ นั่นเอง

$$R(\beta_2 | \beta_0, \beta_1) = R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) - R(\alpha_0, \alpha_1)$$

ตารางที่ 5.2 ANOVA สำหรับ Quadratic Polynomial

SV	df	SS	MS	f_c
Due to $\beta_0, \beta_1, \beta_2$	3	$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2)$		
Due to β_0, β_1 (unadj.)	2	$R(\beta_0, \beta_1)$		
Due to β_2 (adj.)	1	$R(\beta_2 \beta_0, \beta_1)$	B_2	B_2/E_2
Error	$n-3$	$Y'Y - R(\beta_0, \beta_1, \beta_2)$	E_2	
Total	n	$Y'Y$		

ทำการทดสอบ $H_0: \beta_2 = 0$

ถ้าจากตารางที่ 5.1 เราสรุปว่า $\alpha_1 \neq 0$ และจากตารางที่ 5.2 เราสรุปว่า $\beta_2 = 0$ แล้ว เราจะสรุปว่าแบบจำลอง $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + e_1$ fit กับข้อมูล แต่ถ้าจากตารางที่ 5.2 เราสรุปว่า $\beta_2 \neq 0$ เราจะ fit 3rd-degree polynomial (cubic polynomial) ต่อไป นั่นคือ fit

$$y = \gamma_0 + \gamma_1 x + \gamma_2 x^2 + \gamma_3 x^3 + e_3$$

Normal equations คือ

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1^3 \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1^3 & \sum x_1^4 \\ \sum x_1^2 & \sum x_1^3 & \sum x_1^4 & \sum x_1^5 \\ \sum x_1^3 & \sum x_1^4 & \sum x_1^5 & \sum x_1^6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\gamma}_0 \\ \hat{\gamma}_1 \\ \hat{\gamma}_2 \\ \hat{\gamma}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_1 \\ \sum x_1 y_1 \\ \sum x_1^2 y_1 \\ \sum x_1^3 y_1 \end{bmatrix}$$

หรือ

$$X'X\hat{\gamma} = X'Y$$

$$R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) = \hat{\gamma}_0 \sum y_1 + \hat{\gamma}_1 \sum x_1 y_1 + \hat{\gamma}_2 \sum x_1^2 y_1 + \hat{\gamma}_3 \sum x_1^3 y_1 \\ = \hat{\gamma}' X'Y$$

$$R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = \hat{\gamma}_0 \sum y_1 + \hat{\gamma}_1 \sum x_1 y_1 + \hat{\gamma}_2 \sum x_1^2 y_1 \\ = R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) \text{ นั่นเอง}$$

$$R(\gamma_3 | \gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) - R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2)$$

ตารางที่ 5.3 ANOVA สำหรับ Cubic Polynomial

SV	df	SS	MS	f_c
Due to $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$	4	$R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$		
Due to $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$ (unadj.)	3	$R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2) = R(\beta_0, \beta_1, \beta_2)$		
Due to γ_3 (adj.)	1	$R(\gamma_3 \gamma_0, \gamma_1, \gamma_2)$	C_3	C_3/E_3
Error	$n-4$	$Y'Y - R(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$	E_3	
Total	n	$Y'Y$		

ในการทดสอบ $H_0: \gamma_3 = 0$ การสรุปผลทำในลักษณะเดียวกับที่กล่าวมาข้างต้น ถ้า $\gamma_3 = 0$ เราก็ตัดสินใจ แล้วสรุปว่าโพลีโนเมียล degree 2 fit กับข้อมูล ถ้า $\gamma_3 \neq 0$ เราก็ตัดสินใจ นั่นคือถ้าทำต่อไปจนถึงโพลีโนเมียล degree k แล้วได้ผลสรุปการทดสอบ สมมติฐานว่าสัมประสิทธิ์ของ x^k มีค่าเท่ากับศูนย์ เราจะสรุปว่าโพลีโนเมียล degree (k-1) fit กับข้อมูล จากนั้นเราก็ประมาณค่าสัมประสิทธิ์ และกำหนดเส้นโค้งกำลังสองต่ำสุด (least square curve)

สิ่ง 2 สิ่งที่ควรพิจารณาเพิ่มเติมในวิธีการข้างต้นคือ

1. การที่เราสรุปผลการทดสอบว่าสัมประสิทธิ์ของ x^k มีค่าเท่ากับศูนย์อย่างมีนัยสำคัญนั้น ไม่ได้หมายความว่าข้อมูล fit กับโพลีโนเมียล degree (k-1) จริง ๆ แต่เป็นเพียงเงื่อนไขของวิธีการเพื่อจะบอกว่า โพลีโนเมียล degree เท่าใดจึงจะพอเพียง (adequate) กับข้อมูล

สมมติว่าเราสรุปว่า quadratic model $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + e_2$ นั้นพอที่จะใช้กับข้อมูล เมื่อเราสำรวจ linear model $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + e_1$ เทอม e_1 ซึ่งเราก็เป็นตัวแปรเชิงสุ่มนั้นรวมเทอม x^2 ไว้ด้วย ดังนั้นจึงทำให้เกิดความเอียงเงาในผลบวกกำลังสองของความคลาดเคลื่อน (error sum of squares) สำหรับ linear model สิ่งเดียวกันเกิดเมื่อเราตัดสินใจว่าโพลีโนเมียล degree p fit กับข้อมูล ผลบวกกำลังสองของความคลาดเคลื่อนของแบบจำลองที่มี degree ต่ำกว่าจะมีความเอียงเงา วิธีการประมาณค่าความแปรปรวนของตัวแปรเชิงสุ่ม e จะถูกกล่าวในหัวข้อหลัง ซึ่งจะ เป็นวิธีที่ดีกว่า

นักสถิติบางคนแนะนำว่า ถ้ายอมรับสมมติฐานติดต่อกันสองครั้ง จึงจะตัดสินใจว่า ควรจะใช้โพลีโนเมียล degree เท่าใด เช่นถ้าเรายอมรับ $H_0: \beta_2 = 0$ และ $H_0: \gamma_3 = 0$ เราจึงจะสรุปว่า linear polynomial fit กับข้อมูล

2. การคำนวณในโพลีโนเมียล degree ต่ำ ๆ มักไม่มีปัญหา แต่เมื่อ fit กับโพลีโนเมียล degree ≥ 3 อาจเกิดปัญหาได้มาก

ถ้าค่าของ x 's อยู่ในอนุกรมก้าวหน้าเลขคณิต (arithmetic progression) เราสามารถลดการคำนวณลงได้มาก โดยการใช้ออร์ทอกอนัลโพลีโนเมียล ซึ่งจะ ได้กล่าวในหัวข้อ 5.3

ตัวอย่างที่ 5.1 จากข้อมูลที่กำหนดให้ เราต้องการหา degree ของโพลีโนเมียลที่จะ fit กับข้อมูลชุดนี้ได้อย่างเพียงพอ

y	24.0	20.0	10.0	13.0	12.0	6.0	5.0	1.0	1.0	0.0
x	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0	2.2	2.4	2.6

เริ่มต้นด้วยการ fit linear model: $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + e_1$

$$X'X = \begin{bmatrix} 10.0 & 17.0 \\ 17.0 & 32.2 \end{bmatrix}, \quad X'Y = \begin{bmatrix} 92.0 \\ 114.0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\alpha} = \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_0 \\ \hat{\alpha}_1 \end{bmatrix} = (X'X)^{-1} X'Y = \begin{bmatrix} 31.0424 \\ -12.8480 \end{bmatrix}, \quad Y'Y = 1452.0$$

$$R(\alpha_0, \alpha_1) = \hat{\alpha}' X' Y = 1391.16$$

$$R(\alpha_0) = n\bar{y}^2 = 10(92.0/10)^2 = 846.0$$

$$R(\alpha_1 | \alpha_0) = R(\alpha_0, \alpha_1) - R(\alpha_0) = 544.76$$

ตารางที่ 5.4 ANOVA สำหรับ Linear Polynomial Model

SV	df	SS	MS	f_c	Pr
Due to α_0, α_1	2	1391.16			
Due to α_0	1	846.40			
Due to α_1 (adj.)	1	544.76	544.76	71.58	< 5%
Error	8	60.84	7.61		
Total	10	1452.0			

หมายเหตุ Pr = Pr[F > f_c]

เราไม่ยอมรับ $H_0: \alpha_1 = 0$ ที่ $\alpha = .05$ นั่นคือ $\alpha_1 \neq 0$

ต่อไปเรา fit quadratic model: $y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + e_2$

$$X'X = \begin{bmatrix} 10.00 & 17.00 & 32.20 \\ 17.00 & 32.20 & 65.96 \\ 32.20 & 65.96 & 142.68 \end{bmatrix}, \quad X'Y = \begin{bmatrix} 92.0 \\ 114.0 \\ 156.0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\beta}' = [42.96 \quad -28.68 \quad 4.66]$$

$$R(\beta_0, \beta_1, \beta_2) = \hat{\beta}'X'Y = 1409.35$$

$$R(\beta_0, \beta_1) = R(\alpha_0, \alpha_1) = 1391.16$$

ดังนั้น $R(\beta_2 | \beta_0, \beta_1) = 18.19$

ตารางที่ 5.5 ANOVA สำหรับ Quadratic Polynomial Model

SV	df	SS	MS	f_c	Pr
Due to $\beta_0, \beta_1, \beta_2$	3	1409.35			
Due to β_0, β_1 (unadj.)	2	1391.16			
Due to β_2 (adj.)	1	18.19	18.19	2.99	> 5%
Error	7	42.65	6.09		
Total	10	1452.0			

เรายอมรับ $H_0: \beta_2 = 0$ ที่ $\alpha = .05$ นั่นคือ $\beta_2 = 0$ และ

linear polynomial fit กับข้อมูลพอเพียง

เราอาจใช้ตารางที่ 5.4 และตารางที่ 5.5 เป็นตารางเดี่ยวดังแสดงใน
ตารางที่ 5.6

ตารางที่ 5.6 ANOVA สำหรับ Linear และ Quadratic Models

SV	df	SS	MS	f_c	Pr
Total(corrected)	10	1452.00			
Mean	1	846.40			
Linear term	1	544.76	544.76	71.58	< 5%
Error for linear	8	60.84	7.61		
Quadratic term	1	18.19	18.19	2.99	> 5%
Error for quadratic	7	42.65	6.09		

5.3 ลอร์ธอกอนัลโพลีโนเมียล (Orthogonal Polynomials)

5.3.1 บทนำ

เหตุผลของการใช้ลอร์ธอกอนัลโพลีโนเมียลในแบบจำลองเส้นโค้งนั้นคือ เพื่อช่วยให้การคำนวณง่ายยิ่งขึ้นกว่าเดิม โดยทำการแปลงค่า x เพื่อให้ $X'X$ กลายเป็น diagonal เมตริกซ์ เมื่อ $X'X$ เป็น diagonal ทำให้พารามิเตอร์ลอร์ธอกอนัลกันด้วย (ตามหัวข้อ 3.3.4)

เราอาจใช้ลอร์ธอกอนัลโพลีโนเมียลได้ไม่ว่าค่าของ x จะอยู่ห่างเท่า ๆ กัน (equally spaced) หรือห่างไม่เท่ากัน (unequally spaced) ก็ได้

5.3.2 ลอร์ธอกอนัลโพลีโนเมียลสำหรับแบบจำลองชนิดเส้นตรง

ในที่นี้จะกล่าวถึงกรณีที่ใช้กับ linear model ก่อน แล้วจึงจะกล่าวถึงกรณีทั่วไป

สมมติว่า ค่าของ x เพิ่มขึ้นหรือลดลงครั้งละเท่า ๆ กัน ดังนี้

$$x_1 = a + h, x_2 = a + 2h, \dots, x_i = a + ih, \dots, x_n = a + nh$$

เช่น $x_i: 4.3, 4.5, 4.7, 4.9, 5.1$ นั่นคือ $a = 4.1, h = 0.2, n = 5$

เราต้องการ fit แบบจำลอง: $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i$

เราอาจเขียน แบบจำลอง: $y = \alpha_0 + \alpha_1 P_1(i - \bar{i}) + e_i$

โดยที่ $P_1(i - \bar{i})$ คือ 1st-degree polynomial ใน $(i - \bar{i})$ โดยที่ i เป็นค่าเฉลี่ยของค่า i 's นั่นคือถ้า $i = 1, 2, \dots, n$ แล้ว $\bar{i} = (\sum i)/n = (n+1)/2$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } P_1(i - \bar{i}) &= P_1(i - (n+1)/2) \\ &= c_0 + c_1(i - (n+1)/2) \end{aligned}$$

ซึ่งคือ 1st-degree polynomial ใน $(i - \bar{i})$ โดยที่ c_0 และ c_1 เป็นค่าคงที่ ถ้าเราให้พหุนามเมียร์ใน x_i เท่ากับพหุนามเมียร์ใน $(i - \bar{i})$ เราได้

$$\begin{aligned} \beta_0 + \beta_1 x_i &= \alpha_0 + \alpha_1 [c_0 + c_1(i - (n+1)/2)] \\ &= \alpha_0 + [\alpha_1 c_0 - \alpha_1 c_1(n+1)/2] + \alpha_1 c_1 i \quad \dots(1) \end{aligned}$$

เพราะว่า $x_i = a + ih$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } \beta_0 + \beta_1 x_i &= \beta_0 + \beta_1(a + ih) \\ &= (\beta_0 + \beta_1 a) + \beta_1 h i \quad \dots(2) \end{aligned}$$

เทียบสัมประสิทธิ์ใน (1) และ (2)

$$\text{สัมประสิทธิ์ของ } i^0 : \alpha_0 + [c_0 - c_1(n+1)/2]\alpha_1 = \beta_0 + \beta_1 a \quad \dots(3)$$

$$\text{สัมประสิทธิ์ของ } i : c_1 \alpha_1 = h \beta_1 \quad \dots(4)$$

ถ้า $h \neq 0$ ไม่ว่า c_0, c_1 จะมีค่าเท่าใด เราสามารถหา β_1 's จาก (3) และ (4) ถ้าทราบค่า α_1 's

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้นเราอาจใช้แบบจำลอง: } y_i &= \alpha_0 + \alpha_1 [c_0 + c_1(i - (n+1)/2)] + e_i \\ i &= 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

ซึ่งเราจะเขียนในรูปเมตริกซ์: $Y = X\alpha + e$

แล้วเราจะประมาณค่า α_0 และ α_1 แล้วจึงเขียนแทนใน (3) และ (4) เพื่อหาค่าประมาณของ β_0 และ β_1

พิจารณาเมตริกซ์ X และ $X'X$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & c_0 + [(1-n)/2]c_1 \\ 1 & c_0 + [(3-n)/2]c_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & c_0 + [(n-1)/2]c_1 \end{bmatrix}, X'X = \begin{bmatrix} n & nc_0 \\ nc_0 & \Sigma c_0^2 + c_1^2 \Sigma i[i-(n+1)/2] \end{bmatrix}$$

$n \times 2$ 2×2

เราอาจใช้ c_0 และ c_1 (ซึ่งเป็นค่าคงที่) ซึ่งมีค่าเท่าใดก็ได้เพื่อทำให้ $X'X$ เป็น diagonal เมตริกซ์ นั่นคือให้ $c_0 = 0$ และเลือก c_1 เพื่อทำให้สมาชิกของ $X'X$ ไม่เป็นเศษส่วน นั่นคือ ถ้า n เป็นเลขคู่ ให้ $c_1 = 2$ และถ้า n เป็นเลขคี่ ให้ $c_1 = 1$

แบบจำลองกลายเป็น

$$y_i = \alpha_0 + \alpha_1 P_1(i - (n+1)/2) + e_i$$

$$= \alpha_0 + \alpha_1 c_1 (2i-n-1)/2 + e_i$$

โดยที่ $P_1(i - (n+1)/2) = (2i-n-1)/2$ ถ้า n เป็นเลขจำนวนเต็มคี่

$P_1(i - (n+1)/2) = 2i-n-1$ ถ้า n เป็นเลขจำนวนเต็มคู่

$$X'X = \begin{bmatrix} n & 0 \\ 0 & c_1^2 [n(n+1)(n-1)/12] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & 0 \\ 0 & \Sigma [P_1(i - (n+1)/2)]^2 \end{bmatrix}$$

$$X'Y = \begin{bmatrix} \Sigma y_i \\ \Sigma y_i P_1(i - (n+1)/2) \end{bmatrix}, \hat{\alpha} = \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_0 \\ \hat{\alpha}_1 \end{bmatrix}$$

Normal equations: $X'X \hat{\alpha} = X'Y$

ดังนั้น

$$\hat{\alpha} = \begin{bmatrix} (\sum y_1)/n \\ \frac{\sum y_1 P_1(i - (n+1)/2)}{\sum [P_1(i - (n+1)/2)]^2} \end{bmatrix}$$

แทนค่า $\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1$ ลงใน (3) และ (4) จะได้ $\hat{\beta}_0$ และ $\hat{\beta}_1$

ถ้าเราต้องการทดสอบ $H_0: \alpha_1 = 0$ เราต้องหาค่า $R(\alpha_1 | \alpha_0)$ และ $R(\alpha_0, \alpha_1)$ เพราะว่า α_0 และ α_1 ออโต้คอโกลกัน เราได้

$$R(\alpha_1 | \alpha_0) = R(\alpha_1) = \hat{\alpha}_1' X_1' Y = \frac{(\sum y_1 P_1 [i - (n+1)/2])^2}{\sum \{P_1 [i - (n+1)/2]\}^2}$$

$$\begin{aligned} \text{และ } R(\alpha_0, \alpha_1) &= R(\alpha_0) + R(\alpha_1) = \hat{\alpha}_0' X_0' Y + \hat{\alpha}_1' X_1' Y \\ &= (\sum y_1)^2 / n + R(\alpha_1) \end{aligned}$$

จะเห็นได้ว่าการวิเคราะห์ทำได้ง่ายขึ้นถ้าเรามีค่า $P_1(i - (n+1)/2) = c_1(2i - n - 1)/2$ อยู่ในตารางที่ 5.7 แสดงค่า $P_1(i - (n+1)/2)$ สำหรับบางค่าของ n โดยใช้สูตร

$$\begin{aligned} P_1(i - (n+1)/2) &= (2i - n - 1)/2 \quad \text{เมื่อ } n \text{ เป็นเลขจำนวนเต็มคู่} \\ P_1(i - (n+1)/2) &= 2i - n - 1 \quad \text{เมื่อ } n \text{ เป็นเลขจำนวนเต็มคี่} \end{aligned}$$

ตารางที่ 5.7 ค่าของ $P_1(i - (n+1)/2)$, $i = 1, \dots, n$

n \ i	P_1						$\sum P_1^2$
	1	2	3	4	5	6	
3	-1	0	1				2
4	-3	-1	1	3			20
5	-2	-1	0	1	2		10
6	-5	-3	-1	1	3	5	70

ตัวอย่างที่ 5.2 กำหนดข้อมูลดังนี้

y_i	1.0	2.0	4.0	3.0	5.0
x_i	5.1	5.4	5.7	6.0	6.3

x_i 's อยู่ห่างเท่า ๆ กัน: $a = 4.8$, $h = 0.3$, $n = 5$

จากตารางที่ 5.7 เมื่อ $n = 5$ เราได้

y_i	1.0	2.0	4.0	3.0	5.0
$P_1(i - (n+1)/2)$	-2	-1	0	1	2

$$\sum y_i = 15, \quad \sum y_i^2 = 55$$

$$\sum y_i P_1(i - (n+1)/2) = 9, \quad \sum P_1^2 = 10$$

ดังนั้น

$$\hat{\alpha} = \begin{bmatrix} 15/5 \\ 9/10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ .9 \end{bmatrix}, \quad X'X = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \quad X'Y = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

$$c_0 = 0, c_1 = 1 \text{ (n เป็นเลขคี่)}$$

$$\text{จาก (3); } \hat{\alpha}_0 - 3\hat{\alpha}_1 = \hat{\beta}_0 + 4.8\hat{\beta}_1 \quad \dots (5)$$

$$\text{จาก (4); } \hat{\alpha}_1 = 0.3\hat{\beta}_1 \quad \dots (6)$$

$$\text{จาก (5) และ (6); } \hat{\beta}_1 = 3.33\hat{\alpha}_1 = 3.33(0.9) = 2.997$$

$$\hat{\beta}_0 = \hat{\alpha}_0 - 19\hat{\alpha}_1 = 3 - 19(0.9) = -14.1$$

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} -14.1 \\ 3.0 \end{bmatrix}, Y'Y = 55.0, R(\alpha_0) = (\sum y_i)^2/n = 45.0$$

$$R(\alpha_0, \alpha_1) = \hat{\alpha}'X'Y$$

$$= [3 \quad 0.9] \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \end{bmatrix} = 53.1$$

$$\begin{aligned} R(\alpha_1 | \alpha_0) &= R(\alpha_0, \alpha_1) - R(\alpha_0) \\ &= 53.1 - 45.0 = 8.1 = R(\alpha_1) \end{aligned}$$

ตารางที่ 5.8 ANOVA สำหรับ Linear Polynomial

SV	df	SS	MS	f_c	Pr
Due to α_0, α_1	2	53.10			
Due to α_0	1	45.00			
Due to α_1 (adj.)	1	8.10	8.10	13.50	< 5%
Error	3	1.90	0.6		
Total	5	55.00			

ข้อสังเกตในการใช้ออร์ทอกอนัลโพลีโนเมียลเพื่อ fit 1st-degree polynomial เมื่อ x_i 's อยู่ห่างเท่า ๆ กันคือ

1) จาก (4) จะเห็นว่า $\beta_1 = 0 \iff \alpha_1 = 0$ ดังนั้นเมื่อเราต้องการทดสอบ $H_0: \beta_1 = 0$ เราจึงทดสอบ $H_0: \alpha_1 = 0$ แทนได้

2) เราหาค่าประมาณแบบจุดและแบบช่วงของ β_0 และ β_1 ได้ จาก (3) และ (4)

3) ANOVA สำหรับ α_1 คำนวณได้ง่ายมาก เพราะ $X'X$, $X'Y$ และ $\hat{\alpha}$ หาได้ง่าย ถ้า x_i 's อยู่ห่างเท่า ๆ กัน เราจะ fit โพลีโนเมียล degree สูงขึ้น ๆ โดยวิธีการของออร์ทอกอนัลโพลีโนเมียล ในการ fit โพลีโนเมียล degree สูงขึ้น ๆ จะแสดงให้เห็นว่าออร์ทอกอนัลโพลีโนเมียลนั้นมีประโยชน์มาก

5.3.3 การ Fit แบบจำลองกำลังสองโดยออร์ทอกอนัลโพลีโนเมียล

$$\text{แบบจำลอง: } y_i = \gamma_0 + \gamma_1 x_i + \gamma_2 x_i^2 + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\text{หรือ: } y_i = \delta_0 + \delta_1 P_1(i-(n+1)/2) + \delta_2 P_2(i-(n+1)/2) + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

โดยที่ $P_1(i-(n+1)/2) = d_0 + d_1(i-(n+1)/2)$, $d_1 \neq 0$

และ $P_2(i-(n+1)/2) = f_0 + f_1(i-(n+1)/2) + f_2(i-(n+1)/2)^2$, $f_2 \neq 0$

d_0 , d_1 , f_0 , f_1 , และ f_2 เป็นค่าคงที่ที่เรากำหนดได้เองตามความต้องการ จาก $x_i = a + ih$

$$y_i = \gamma_0 + \gamma_1(a + ih) + \gamma_2(a + ih)^2 + e_i \quad \dots (1)$$

$$y_i = \delta_0 + \delta_1[d_0 + d_1(i-(n+1)/2)] + \delta_2[f_0 + f_1(i-(n+1)/2) + f_2(i-(n+1)/2)^2] + e_i \quad \dots (2)$$

ใน (1) และ (2)

จากการเทียบสัมประสิทธิ์ของ i^p ($p = 0, 1, 2$) เราได้

สัมประสิทธิ์ของ i^0 :

$$\delta_0 + [d_0 - d_1(n+1)/2]\delta_1 + [f_0 - f_1(n+1)/2 + f_2((n+1)/2)^2]\delta_2 = \gamma_0 + a\gamma_1 + a^2\gamma_2 \quad \dots (3)$$

สัมประสิทธิ์ของ i^1 :
$$d_1 \delta_1 + [f_1 - (n+1)f_2] \delta_2 = \chi_1 h + 2ah \chi_2 \quad \dots (4)$$

สัมประสิทธิ์ของ i^2 :
$$f_2 \delta_2 = \chi_2 h^2 \quad \dots (5)$$

ถ้าเราหา $\hat{\delta}$ ได้ เราสามารถใช้สมการ (3)-(5) หา $\hat{\chi}$ ได้ ปริมาณ d_0, d_1, f_0, f_1 และ f_2 นั้นเราสามารถกำหนดเอาเพื่อทำให้ $X'X$ เป็น diagonal เมตริกซ์ จากแบบจำลอง:
$$y_i = \delta_0 + \delta_1 P_1(i-(n+1)/2) + \delta_2 P_2(i-(n+1)/2) + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

แบบจำลองในรูปเมตริกซ์คือ $Y = X\delta + e$

โดยที่

$$X = \begin{bmatrix} 1 & P_1(1-(n+1)/2) & P_2(1-(n+1)/2) \\ 1 & P_1(2-(n+1)/2) & P_2(2-(n+1)/2) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & P_1(n-(n+1)/2) & P_2(n-(n+1)/2) \end{bmatrix}_{n \times 3}$$

และ $X'X =$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_i P_1(i-(n+1)/2) & \sum_i P_2(i-(n+1)/2) \\ \sum_i P_1(i-(n+1)/2) & \sum_i P_1(i-(n+1)/2)^2 & \sum_i P_1(i-(n+1)/2)P_2(i-(n+1)/2) \\ \sum_i P_2(i-(n+1)/2) & \sum_i P_1(i-(n+1)/2)P_2(i-(n+1)/2) & \sum_i P_2(i-(n+1)/2)^2 \end{bmatrix}_{3 \times 3}$$

ถ้าต้องการให้ $X'X$ เป็น diagonal เมตริกซ์ เราต้องทำให้

$$\sum_i P_1 = \sum_i P_2 = \sum_i P_1 P_2 = 0 \quad \text{นั่นคือเราจะได้ } d_0 = 0 ;$$

$$f_0 = -f_2(n+1)(n-1)/12 \quad \text{และ } f_1 = 0 \quad \text{ทั้งนี้เพราะ } d_1 \neq 0$$

$$\text{ดังนั้น } P_1(i-(n+1)/2) = d_1(i-(n+1)/2) \quad \dots (6)$$

$$P_2(i-(n+1)/2) = f_2[-(n-1)(n+1)/12 + (i-(n+1)/2)^2] \quad \dots (7)$$

เราจะเลือก d_1 และ f_2 เพื่อทำให้แต่ละโพลีโนเมียล (P_1 , P_2) เป็นเลขจำนวนเต็ม เราเขียน (2) ใหม่นี้เป็น

$$y_i = \delta_0 + \delta_1 d_1(i-(n+1)/2) + \delta_2 f_2[-(n-1)(n+1)/12 + (i-(n+1)/2)^2] + e_i$$

ดังนั้น

$$X'Y = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i P_1(i-(n+1)/2) \\ \sum y_i P_2(i-(n+1)/2) \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} n & 0 & 0 \\ 0 & \sum [P_1(i-(n+1)/2)]^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sum [P_2(i-(n+1)/2)]^2 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\delta} = (X'X)^{-1} X'Y = \begin{bmatrix} (\sum y_i)/n \\ \hline \sum y_i P_1(i-(n+1)/2) \\ \hline \sum [P_1(i-(n+1)/2)]^2 \\ \hline \sum y_i P_2(i-(n+1)/2) \\ \hline \sum [P_2(i-(n+1)/2)]^2 \end{bmatrix}$$

สิ่งสำคัญที่ควรสังเกตในที่นี้คือสัมประสิทธิ์ $\hat{\delta}_0$ และ $\hat{\delta}_1$ นั้นคือตัวเดียวกับเมื่อทำการ fit กับ linear polynomial นั่นคือ $\hat{\delta}_0 = \hat{\alpha}_0$ และ $\hat{\delta}_1 = \hat{\alpha}_1$ (ในหัวข้อ 5.3.2) นั่นคือสรุปว่า ในการ fit quadratic polynomial นั้นมีสัมประสิทธิ์เพียงหนึ่งตัวเท่านั้นที่เราต้องคำนวณ คือ $\hat{\delta}_2$ ส่วนตัวอื่น ๆ มีค่าเท่าเดิม และ

$$R(\hat{\delta}_2, \hat{\delta}_0, \hat{\delta}_1) = R(\hat{\delta}_2) = \frac{[\sum y_i P_2(i-(n+1)/2)]^2}{\sum [P_2(i-(n+1)/2)]^2}$$

ตารางที่ 5.9 แสดงค่าของ P_1 และ P_2 สำหรับบางค่าของ n (คำนวณจาก (6) และ (7))

ตารางที่ 5.9 ค่าของ $P_1(i-(n+1)/2)$ และ $P_2(i-(n+1)/2)$,
 $i=1, 2, \dots, n$

n	P_1					P_2					$\sum P_2^2$
	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	
3	-1	0	1			1	-2	1			6
4	-3	-1	1	3		1	-1	-1	1		4
5	-2	-1	0	1	2	2	-1	-2	-1	2	14

หมายเหตุ ค่าของ P_1 นั้นเหมือนกับในตารางที่ 5.7

ตัวอย่างที่ 5.3 ต้องการ fit quadratic polynomial กับข้อมูลในตัวอย่างที่ 5.2

y_i	1	2	4	3	5	$\Sigma y_i = 15, \quad \Sigma y_i^2 = 55 = Y'Y$ $\Sigma P_1^2 = 10, \quad \Sigma P_1 y_i = 9$ $\Sigma P_2^2 = 14, \quad \Sigma P_2 y_i = -1$
P_1	-2	-1	0	1	2	
P_2	2	-1	-2	-1	2	

$$X'X = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 14 \end{bmatrix}, \quad X'Y = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\delta}_0 = \hat{\alpha}_0 = 3, \quad \hat{\delta}_1 = \hat{\alpha}_1 = 0.9, \quad \hat{\delta}_2 = -1/14 = -0.07$$

$$R(\delta_0, \delta_1, \delta_2) = \hat{\delta}'X'Y = [3 \quad 0.9 \quad -0.07] \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$= 3(15) + 0.9(9) + (-0.07)(-1)$$

$$= 45 + 8.1 + 0.07 = 53.17$$

$$R(\delta_2 | \delta_0, \delta_1) = R(\delta_2) = (-1)^2/14 = 0.07$$

$$R(\delta_0 | \delta_1, \delta_2) = R(\delta_0) = 45 = R(\alpha_0)$$

$$R(\delta_1 | \delta_0, \delta_2) = R(\delta_1) = 8.1 = R(\alpha_1)$$

$$SSE = Y'Y - R(\delta_0, \delta_1, \delta_2) = 55 - 53.17 = 1.83$$

ตารางที่ 5.10 ANOVA สำหรับ Quadratic Orthogonal Polynomial

SV	df	SS	MS	f_e	Pr
Mean	1	$R(\delta_0) = 45.0$			
Linear	1	$R(\delta_1) = 8.1$	8.1		
Quadratic	1	$R(\delta_2) = 0.07$	0.07	< 1	> 5%
Error	2	SSE = 1.83	0.92		
Total	5	SST = 55.00			

ถ้าเราต้องการหา $\hat{\gamma}_0$, $\hat{\gamma}_1$ และ $\hat{\gamma}_2$ เราแทนค่า $\hat{\delta}_0$, $\hat{\delta}_1$ และ $\hat{\delta}_2$

ใน (3)-(5) แล้วแก้สมการหา $\hat{\gamma}_0$, $\hat{\gamma}_1$ และ $\hat{\gamma}_2$

$$\hat{\gamma}_2 = \hat{\delta}_2 / 0.09 = -0.07 / 0.09 = -0.78$$

$$\hat{\gamma}_1 = 11.888, \hat{\gamma}_0 = -39.2812$$

$$\hat{\gamma}' = [-39.2812 \quad 11.888 \quad -0.78]$$

หมายเหตุ การหาค่า $\hat{\gamma}$ นั้นให้ทำเป็นแบบฝึกหัดข้อ 5.2

(โดยใช้ $d_0 = 0, d_1 = 1, f_0 = -2, f_1 = 0, f_2 = 1$)

5.3.4 รูปทั่ว ๆ ไปของออร์โธโกนัลโพลีโนเมียล

p-th-degree polynomial:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \dots + \beta_p x_i^p + e_i \quad \dots (1)$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

โดยที่ x_i 's อยู่ห่างกันเท่า ๆ กัน

เราอาจเขียนแบบจำลองได้ใหม่ดังนี้

$$y_i = \alpha_0 + \alpha_1 P_1(i - \bar{i}) + \alpha_2 P_2(i - \bar{i}) + \dots + \alpha_p P_p(i - \bar{i}) + e_i$$

$$i = 1, 2, \dots, n \quad \dots (2)$$

$P_n(i - \bar{i})$ แทน t th-degree polynomial ใน $(i - \bar{i})$
โดยที่ $\bar{i} = (n+1)/2$

$$P_n = P_n(i - \bar{i}) = P_n(i - (n+1)/2) \\ = a_0 t a_{1t} (i - (n+1)/2) t a_{2t} (i - (n+1)/2)^2 t \dots t a_{nt} (i - (n+1)/2)^t \dots (3)$$

โดยที่ $a_{0t}, a_{1t}, a_{2t}, \dots, a_{nt}$ เป็นค่าคงที่ ซึ่งเรากำหนดเอาเองเพื่อทำให้ $X^T X$ เป็น diagonal เมตริกซ์ และทำให้ P_n เป็นเลขจำนวนเต็ม

ถ้าเราแทน $x_i = a + ih$ ใน (1) แล้วเปรียบเทียบกับสัมประสิทธิ์ของ i^t ใน (1) และ (2) เราจะได้ชุดของสมการซึ่งเราจะได้สูตรสำหรับหา α_i ในเทอมของ β_i สมการที่ได้คือ

สัมประสิทธิ์ของ i^0 :

$$A_{00}\alpha_0 + A_{01}\alpha_1 + \dots + A_{0p}\alpha_p = B_{00}\beta_0 + B_{01}\beta_1 + \dots + B_{0p}\beta_p$$

สัมประสิทธิ์ของ i^1 : $A_{11}\alpha_1 + \dots + A_{1p}\alpha_p = B_{11}\beta_1 + \dots + B_{1p}\beta_p$

...

สัมประสิทธิ์ของ i^p : $A_{pp}\alpha_p = B_{pp}\beta_p$... (4)

จากสมการสุดท้ายของ (4) เราจะได้ว่า $[\alpha_p = 0 \leftrightarrow \beta_p = 0]$

โดยที่ A_{nt} คือสัมประสิทธิ์ของ i^t ในพหุนาม $P_n(i - (n+1)/2)$

และ B_{nt} คือสัมประสิทธิ์ของ i^t ใน $(a + ih)^t$

เราอาจเขียน (4) ในรูปเมตริกซ์

$$A\alpha = B\beta$$

โดยที่ $\alpha' = [\alpha_1 \ \alpha_2 \ \dots \ \alpha_p]$, $\beta' = [\beta_1 \ \beta_2 \ \dots \ \beta_p]$ และ A และ B คือเมตริกซ์ขนาด $(p+1) \times (p+1)$ ซึ่งมี A_{ij} และ B_{ij} เป็นสมาชิกตัวที่ ij เพราะว่า $A_{i,i} \neq 0$ ($i = 0, 1, \dots, p$) และ $B_{i,i} \neq 0$ ($i = 0, 1, \dots, p$) และเพราะ A และ B เป็นเมตริกซ์สามเหลี่ยม ดังนั้นหา A^{-1} และ B^{-1} ได้

จาก $B\beta = A\alpha$

ดังนั้น $\beta = B^{-1}A\alpha = C\alpha$

จากทฤษฎีบทที่ 3: $\hat{\beta} = C\hat{\alpha}$

นอกจากนั้นเรายังทราบว่าเราสามารถทดสอบสมมติฐานเกี่ยวกับสมาชิกของ β หรือหาช่วงความเชื่อมั่นของสมาชิกของ β โดยการให้ความจริงที่ว่า β_p คือผลบวกเชิงเส้น (linear combination) ของ α_i ในการใช้ออร์ธอกอนัลโพลีโนเมียล เราจะประมาณค่าและทดสอบสมมติฐานเกี่ยวกับ α_i เท่านั้น และถ้าต้องการ β_p เราก็ใช้ (4) ได้

สิ่งที่สำคัญมากสิ่งหนึ่งที่ควรสนใจคือ $\alpha_p = 0 \iff \beta_p = 0$ โดยที่ p คือ degree ของแบบจำลองชนิดโพลีโนเมียลที่ fit ถ้าเรา fit สมการ linear ใน x สัมประสิทธิ์ของเทอม linear ใน x จะเป็น 0 ถ้า $\alpha_1 = 0$ ถ้าเรา fit สมการ quadratic สัมประสิทธิ์ของเทอม quadratic เป็น 0 ถ้า $\alpha_2 = 0$ และเรื่อย ๆ ไป เราต้องจำว่าแต่ละครั้งที่เปลี่ยน degree ของสมการใน x เราเปลี่ยนสัมประสิทธิ์ทุกตัว แต่สิ่งนี้ไม่จริงสำหรับ α_1 สัมประสิทธิ์ของ 1st-degree ออร์ธอกอนัลโพลีโนเมียล คือ α_1 ไม่ว่าเราจะเพิ่มเทอมเข้าในแบบจำลองอีกกี่เทอมก็ตาม และสำหรับสัมประสิทธิ์ของ degree ใด ๆ ของออร์ธอกอนัลโพลีโนเมียลก็เป็นไปเช่นเดียวกัน

ดังนั้นการที่เราใช้ออร์ธอกอนัลโพลีโนเมียลนั้นเพียงเพื่อทำให้การเพิ่มเทอมที่มี degree สูงขึ้นนั้นเป็นไปได้ง่าย จนกระทั่งเราพบว่าโพลีโนเมียล degree เท่าใดจึงจะเพียงพอกับการแทนข้อมูล และถ้าเราต้องการเพียงทราบว่า degree ของโพลีโนเมียลเป็นเท่าใด เราก็หยุดทำได้

เราอาจเขียนแบบจำลองใน (2) ในรูปเมตริกซ์: $Y = X\alpha + e$

โดยที่

$$X = \begin{bmatrix} 1 & P_1(1-(n+1)/2) & \dots & P_p(1-(n+1)/2) \\ 1 & P_1(2-(n+1)/2) & \dots & P_p(2-(n+1)/2) \\ \vdots & & \dots & \vdots \\ 1 & P_1(n-(n+1)/2) & \dots & P_p(n-(n+1)/2) \end{bmatrix}$$

$n \times (p+1)$

ถ้าเราใช้สัญลักษณ์ $\sum P_i P_j$ แทน $\sum P_i(i-(n+1)/2)P_j(i-(n+1)/2)$ เราจะได้

$$X'X = \begin{bmatrix} n & \Sigma P_1 & \Sigma P_2 & \dots & \Sigma P_p \\ \Sigma P_1 & \Sigma P_1^2 & \Sigma P_1 P_2 & \dots & \Sigma P_1 P_p \\ & & \dots & & \\ \Sigma P_p & \Sigma P_p P_1 & \Sigma P_p P_2 & \dots & \Sigma P_p^2 \end{bmatrix}$$

(p+1) x (p+1)

ดังนั้นเราต้องเลือกสัมประสิทธิ์ a_{ij} ใน (3) เพื่อให้ $X'X$ เป็น diagonal เมตริกซ์ สัมประสิทธิ์เหล่านี้มีผู้คำนวณไว้สำหรับ n ที่มีค่าสูงถึง $104^{(*)}$ ถ้าเราใช้ค่าจาก ตารางดังกล่าว การคำนวณของเราก็จะง่ายมาก เนื่องจาก

$$X'Y = \begin{bmatrix} \Sigma y_1 \\ \Sigma y_1 P_1 \\ \vdots \\ \Sigma y_1 P_p \end{bmatrix}$$

จาก $X'X\hat{\alpha} = X'Y$

ดังนั้น $\hat{\alpha} = (X'X)^{-1} X'Y = \begin{bmatrix} (\Sigma y_1)/n \\ \Sigma y_1 P_1 / \Sigma P_1^2 \\ \Sigma y_1 P_2 / \Sigma P_2^2 \\ \vdots \\ \Sigma y_1 P_p / \Sigma P_p^2 \end{bmatrix}$

(*) Anderson, R.L. and E.E. Houseman: Table of Orthogonal Polynomials Values Extended to N = 104 , Iowa State Coll. Agri., Exp. Sta. Bul. No. 297, April, 1942.

$$R(\alpha_q | \alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{q-1}, \alpha_{q+1}, \dots, \alpha_p) = R(\alpha_q) = (\sum y_i P_q)^2 / \sum P_q^2$$

$$\text{Var}(\alpha_q) = \sigma^2 / \sum P_q^2$$

ค่า $\sum P_q^2$ จะให้ไว้ในตารางที่ให้ค่า P_q ตัวอย่าง (*)
 ปริมาณต่างๆ ที่เราต้องคำนวณคือ $\sum y_i$, $\sum y_i^2$ และ $\sum y_i P_q$ ($q = 1, 2, \dots, p$)

ตัวอย่างที่ 5.4 จากข้อมูลเกี่ยวกับปริมาณน้ำฝนในปีต่าง ๆ ที่ระบุไว้ สมมติว่าเราต้องการหาโพลีโนเมียลที่ fit กับข้อมูลดังกล่าวคือ

Year	1944	1945	1946	1947	1948	1949
Rainfall	30.2	32.2	35.1	34.2	39.1	41.3
Year	1950	1951	1952	1953	1954	1955
Rainfall	36.1	30.1	30.5	26.1	24.8	28.2

จาก Table of Orthogonal Polynomial Values (*) เราได้ Linear, Quadratic, Cubic และ Quartic polynomial สำหรับ $n = 12$ การทดสอบในตัวอย่างนี้ใช้ $\alpha = .02$

ตารางที่ 5.11 Polynomial สำหรับ Rainfall Data

year coded	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
y: Rainfall	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8	y_9	y_{10}	y_{11}	y_{12}	$\sum P^2$
P_1	-11	-9	-7	-5	-3	-1	1	3	5	7	9	11	572
P_2	55	25	1	-17	-29	-35	-35	-29	-17	1	25	55	12012
P_3	-33	3	21	25	19	7	-7	-19	-25	-21	-3	33	5148
P_4	33	-27	-33	-13	12	28	28	12	-13	-33	-27	33	8008

$$\bar{y} = 32.325, \quad \Sigma P_1 y_i = -202.30, \quad \Sigma P_2 y_i = -1117.5, \quad \Sigma P_3 y_i = 445.1$$

$$\Sigma y_i = 387.9, \quad \Sigma y_i^2 = 12815.99, \quad \Sigma P_4 y_i = 525.1$$

เริ่มด้วย fit linear equation: $Y = X\alpha + e$, $p = 2$

$$\hat{\alpha} = (X'X)^{-1}X'Y$$

$$= \begin{bmatrix} 12 & 0 \\ 0 & 572 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 387.9 \\ -202.3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32.325 \\ -0.3537 \end{bmatrix}$$

$$R(\alpha) = \hat{\alpha}'X'Y$$

$$= [32.325 \quad -0.3537] \begin{bmatrix} 387.9 \\ -202.3 \end{bmatrix}$$

$$= 12538.867 + 71.5535 = 12610.42$$

$$SSE(\text{linear}) = Y'Y - R(\alpha) = 12815.99 - 12610.99 = 205.57$$

$$df = 12 - 2 = 10$$

$$R(\alpha_0) = (\Sigma y_i)^2/n = (387.9)^2/12 = 12538.867$$

$$R(\alpha_1 | \alpha_0) = R(\alpha_1) = 71.5535$$

ต่อไป fit quadratic equation: $Y = X\delta + e$, $p = 3$

$$X'X = \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 572 & 0 \\ 0 & 0 & 12012 \end{bmatrix}, \quad X'Y = \begin{bmatrix} 387.9 \\ -202.3 \\ -1117.5 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\delta}_0 = \hat{\alpha}_0 = 32.325$$

$$\hat{\delta}_1 = \hat{\alpha}_1 = -0.3537$$

$$\hat{\delta}_2 = -1117.5/12012 = -0.0930319$$

$$\hat{\delta} = \begin{bmatrix} 32.325 \\ -0.354 \\ -0.093 \end{bmatrix}$$

$$R(\delta_2 | \delta_0, \delta_1) = R(\delta_2) = (-0.0930319)(-1117.5) = 103.963$$

$$= (-1117.5)^2 / 12012$$

$$R(\delta) = \hat{\delta}'X'Y$$

$$= (32.325)(387.9) + (-0.3537)(-202.30) + (-0.0930319)(-1117.5)$$

$$= 12714.383$$

$$SSE(\text{quadratic}) = Y'Y - R(\delta) = 101.607, \text{ df} = 12 - 3 = 9$$

ต่อไป fit cubic equation แล้ว fit quartic equation (ให้ทำเป็นแบบฝึกหัด
ในข้อ 5.1) ได้ผลสรุปในตารางที่ 5.12

ตารางที่ 5.12 ANOVA สำหรับ Rainfall Data

SV	df	SS	MS	f _c	Pr
Total	12	12815.99			
Reduction for Mean	1	12538.867			
Linear	1	71.554	71.554	3.48	> 2%
Error for linear	10	205.57	20.557	(n.s.)	
Quadratic	1	103.963	103.963	9.21*	< 2%
Error for quadratic	9	101.607	11.290		
Cubic	1	38.484	38.484	4.88	> 2%
Error for cubic	8	63.123	7.890	(n.s.)	
Quartic	1	34.432	34.432	8.40	> 2%
Error for quartic	7	28.691	4.099	(n.s.)	

$$SST(\text{corrected}) = 12815.99 - 12538.867 = 277.123$$

ถ้าทดสอบที่ $\alpha = 0.02$ ตารางที่ 5.12 บอกเราว่า quadratic polynomial: $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + e$ นั้น fit กับข้อมูลเบื้องต้น และอาจหา $\hat{\beta}$ และ s.e. ของ $\hat{\beta}_1$ ได้ ตามวิธีที่ได้กล่าวมาแล้ว

5.3.5 สรุป

ถ้า x 's อยู่ห่างเท่า ๆ กัน และเราต้องการจะหา degree ของโพลีโนเมียลซึ่ง fit กับข้อมูลที่มียุ่ เราจะกำหนดระดับนัยสำคัญ และใช้วิธีของออร์ทอกอนัลโพลีโนเมียลที่อธิบายในหัวข้อ 5.3 นี้ ทั้งนี้ข้อแนะนำว่าควรจะมีการไม่ปฏิเสธสมมติฐานติดต่อกันสองครั้ง แล้วเราจึงจะตัดสินใจว่า degree ควรเป็นเท่าใด ทั้งนี้เพราะถ้า cubic fit กับข้อมูล เทอม linear ก็มักจะมีนัยสำคัญ แต่เทอม quadratic อาจไม่มีนัยสำคัญเลยจริง ๆ แล้ว ถ้าโพลีโนเมียล degree k fit กับข้อมูลแล้ว degree k นี้มักจะไม่มีนัยสำคัญเลย ดังนั้นถ้าเราหยุดเมื่อมีการยอมรับสมมติฐานครั้งแรก เราก็จะพลาดผลที่สำคัญไป

5.4 การทดสอบ Lack of Fit

สมมติว่า ตัวแปรเชิงสุ่ม y มีลักษณะดังนี้

$$y_{ij} = f(x_i) + e_{ij}, \quad i = 1, \dots, k; \quad j = 1, \dots, m; \quad m > 1$$

ต้องการหาแบบจำลองชนิดโพลีโนเมียลที่ fit กับข้อมูล

ถ้าแต่ละค่าของ x_i เราสังเกตค่า y_{ij} มา m ค่า ($m > 1$)

เราจะได้ค่าประมาณแบบไม่เอนียงเฉของ σ^2 โดยการใช้

$$\begin{aligned} MS(\text{pure error}) &= \hat{\sigma}^2 = \left[\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^m (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2 \right] / [k(m-1)] \\ &= SS(\text{pure error}) / [k(m-1)] \\ &= \left[\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^m (e_{ij} - \bar{e}_{i.})^2 \right] / [k(m-1)] \end{aligned}$$

หมายเหตุ SS(pure error) มีค่าคงที่ตลอดไม่ว่าจะ fit แบบจำลองใด ๆ
ส่วน SSE จะเปลี่ยนไปตามแบบจำลองที่ fit

$$\begin{aligned} \{[k(m-1)]\hat{\sigma}^2\}/\sigma^2 &\sim \chi^2_{k(m-1)} \quad \text{ไม่ว่า } f(x) \text{ จะเป็นรูปใด} \\ \text{จาก } \text{SSE} &= Y'Y - \hat{\beta}'X'Y \\ &= \text{SS(pure error)} + \text{SS(lack of fit)} \\ &= \text{SS(p.e.)} + \text{SS(lof)} \\ &= k(m-1)\hat{\sigma}^2 + \text{SS(lof)} \\ \text{SS(lof)} &= \text{SSE} - \text{SS(p.e.)}, \quad \text{df} = (n-p) - k(m-1) \end{aligned}$$

หมายเหตุ การหา SS(p.e.) ในกรณีที่ $i = 1, \dots, k$

$$j = 1, \dots, n_i; \quad n_i \text{ บางตัวต้อง } > 1$$

$$\begin{aligned} \text{SS(p.e.)} &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2, \quad \text{df} = \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \\ &= n - k \end{aligned}$$

$$\text{โดยที่ } \sum_{i=1}^k n_i = n$$

ในการ fit linear model

ถ้าแบบจำลองจริง ๆ เป็น linear MS(lof) เป็นค่าประมาณแบบไม่เอนเอียงของ σ^2
ถ้าแบบจำลองไม่เป็น linear MS(lof) จะประมาณ σ^2 เกินจริง (over estimate)
และถ้าแบบจำลองเป็น linear จริง ๆ

$$\text{MS(lof)}/\hat{\sigma}^2 = \text{MS(lof)}/\text{MS(p.e.)} \sim F \text{ distribution}$$

ถ้าเราปฏิเสธสมมติฐาน เราจะใช้ MS(lof) ของ quadratic ทารด้วย $\hat{\sigma}^2$ เป็นค่า f_c ในการทดสอบว่าแบบจำลองเป็น quadratic หรือไม่ ทำเช่นนี้ไปจนกว่าจะได้แบบจำลองที่เหมาะสม

ตัวอย่างที่ 5.5 การทดสอบ Lack of fit ของแบบจำลองโพลีโนเมียล

x y			x y		
1	6	0.029	10	12	0.425
2	6	0.032	11	12	0.384
3	6	0.027	12	12	0.472
4	8	0.079	13	14	1.130
5	8	0.072	14	14	1.020
6	8	0.088	15	14	1.249
7	10	0.181	16	16	2.812
8	10	0.165	17	16	2.465
9	10	0.201	18	16	3.099

$$m = 3, k = 6$$

$$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^m y_{ij} = 13.93, \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^m y_{ij}^2 = 28.137686 = SST(\text{uncorrected})$$

$$SS(\alpha_0) = n\bar{y}^2 = 10.780272$$

$$SS(\text{p.e.}) = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^m (y_{ij} - \bar{y}_i)^2$$

$$= \sum_{i=1}^3 [\sum_{j=1}^3 y_{ij}^2 - (\sum_{j=1}^3 y_{ij})^2 / 3]$$

$$i=1; \sum_{j=1}^3 y_{1j}^2 - (\sum_{j=1}^3 y_{1j})^2 / 3 = (.029^2 + .032^2 + .027^2) - (.029 + .032 + .027)^2 / 3$$

$$= .002594 - .0025813 = .0000127 \text{ เป็นต้น}$$

$$SS(p.e.) = 0.23248, df = k(m-1) = 6(3-1) = 12$$

ค่านี้คงที่ตลอด
ไม่ว่าจะ fit
แบบจำลองใด

เริ่ม fit แบบจำลองชนิด linear: $y_i = \alpha_0 + \alpha_1 x_i + e_i$,
 $i = 1, \dots, 18$

$$\hat{\alpha}' = [-1.9318 \quad 0.24597]$$

ตารางที่ 5.13 ANOVA $H_0: \alpha_1 = 0$ และ H_0 : แบบจำลองเป็นแบบ linear

SV	df	SS	MS	f_c
Due to α_1 α_0	1	12.705	12.705	$f_1 = 12.705 / .29075$
Error	16	4.652	.29075	$= 43.70^{**}$
Lack of fit	4	4.41952	1.10489	$f_2 = 1.10489 / .0193733$
Pure error	12	.23248	.0193733	$= 57.03^{**}$
Total(corrected)	17	17.357		

$$f_{(1,16),.01} = 8.53 \text{ และ } f_{(4,12),.01} = 5.41$$

$f_2 > f_{(4,12),.01}$ เราปฏิเสธสมมติฐาน สรุปว่าแบบจำลองไม่เป็น linear

ต่อไป fit แบบจำลองชนิด quadratic: $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + e_i$,
 $i = 1, \dots, 18$

$$\hat{\beta}' = [3.1721 \quad -0.78102 \quad 0.046682]$$

ตารางที่ 5.14 ANOVA $H_0: \beta_2 = 0$ และ H_a : แบบจำลองเป็น quadratic

SV	df	SS	MS	f_c
Due to β_2 β_0, β_1	1	3.9051	3.9051	$f_1 = 78.43^{**}$
Error	15	.7469	.049793	
Lack of fit	3	.51446	.17149	$f_2 = 8.85^{**}$
Pure error	12	.23248	.0193733	
Total(corrected)	17	17.357		

$$f_{(1,15),.01} = 8.68 \text{ และ } f_{(3,12),.01} = 5.95$$

$f_2 > f_{(3,12),.01}$ เราปฏิเสธสมมติฐาน สรุปว่าแบบจำลองไม่เป็น quadratic

จากตัวอย่างนี้แบบจำลองที่ fit กับข้อมูลจะไม่เป็นแบบจำลองชนิดพหุนามเมื่อ
ถ้าทำการตรวจสอบความแปรปรวนของ k ($= 6$) กลุ่มของค่า y จะไม่เท่ากันหมด
ซึ่งทำให้ข้อสมมติเรื่องความแปรปรวนของทุกกลุ่มต้องไม่แตกต่างกัน (variance
homogeneity) ไม่จริง วิธีแก้ทำได้โดยการหา $\ln y_i$ แล้ว fit แบบจำลองเชิงเส้นตรง
ของ $\ln y$ บน x และเมื่อทำการทดสอบ lack of fit ผลปรากฏว่า
แบบจำลองเชิงเส้นตรงของ $\ln y$ บน x ใช้ได้ การวิเคราะห์ได้แสดงไว้ต่อไปนี้

$$\text{แบบจำลอง: } \ln y = \beta_0 + \beta_1 x + e$$

หมายเหตุ $\ln y_i, i = 1, \dots, 18$ คือ

-3.540, -3.442, -3.612, -2.538, -2.631, -2.430, -1.709, -1.802, -1.604,

-0.856, -0.957, -0.751, 0.122, 0.020, 0.222, 1.034, 0.902, 1.131

$$\hat{\beta}_0 = -6.2096, \hat{\beta}_1 = 0.45117$$

ดังนั้น
$$\widehat{\ln y} = -6.2096 + 0.45117 x$$

ตารางที่ 5.15 ANOVA

SV	df	SS	MS	f_e
Due to β_1 β_0	1	42.7460	42.7460	$f_1 = 4559.57^{**}$
Error	16	.1500	.009375	
Lack of fit	4	.02753	.0068825	$f_2 = 0.6744$ (n.s.)
Pure error	12	.12247	.010206	
Total(corrected)	17	42.896		

SPSS/PC Commands สำหรับตัวอย่างที่ 5.5

```

DATA LIST FREE/X Y.
BEGIN DATA.
6 .029 6 .032 6 .027 8 .079 8 .072 8 .088
10 .181 10 .165 10 .201 12 .425 12 .384 12 .472
14 1.13 14 1.02 14 1.249 16 2.812 16 2.465 16 3.099
END DATA.
COMPUTE X2=X*X.
COMPUTE X3=X2*X.
COMPUTE X4=X2*X2.
COMPUTE LNY=LN(Y).
PLOT PLOT=Y LNY WITH X.
REGRESSION VARIABLES=X X2 X3 X4 Y
/DEPENDENT=Y
/METHOD=ENTER X
/METHOD=ENTER X2
/METHOD=ENTER X3
/METHOD=ENTER X4.
REGRESSION VARIABLES=X LNY
/DEPENDENT=LNY
/METHOD=ENTER.
    
```

Output สำหรับตัวอย่างที่ 5.5

18 cases are written to the uncompressed active file.

This procedure was completed at 16:53:07

The raw data or transformation pass is proceeding

18 cases are written to the uncompressed active file.

PLOT requires 3976 BYTES of workspace for execution.

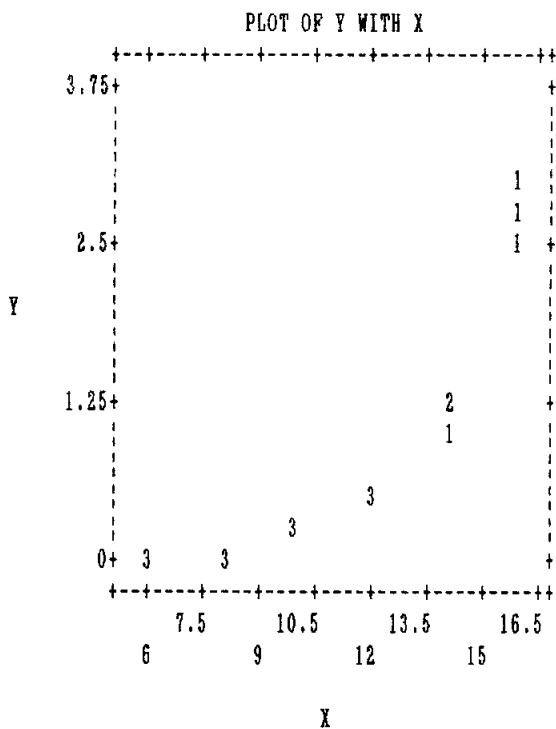
Page 2 SPSS/PC+ 1/30/81

***** P L O T *****

Data Information

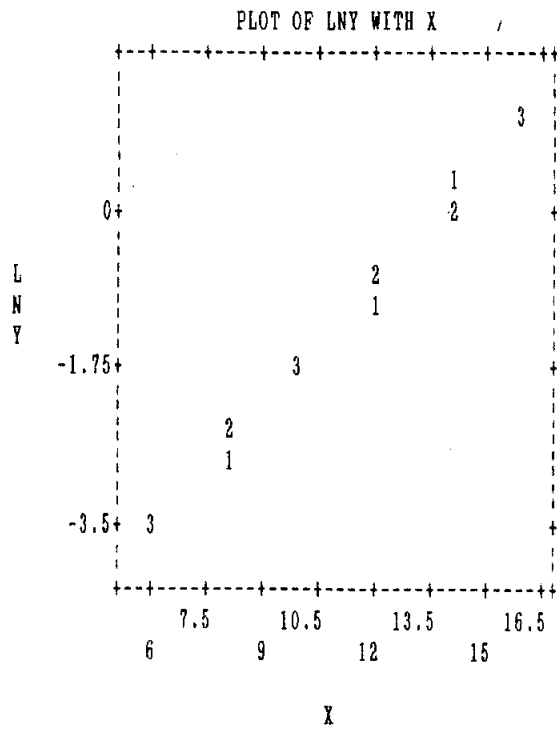
18 unweighted cases accepted.

Page 3 SPSS/PC+ 1/30/81



Page 4 SPSS/PC+ 1/30/81

18 cases plotted.



18 cases plotted.

This procedure was completed at 16:53:20

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Listwise Deletion of Missing Data

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

Beginning Block Number 1. Method: Enter X

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

Variable(s) Entered on Step Number

1.. X

Multiple R .85556
 R Square .73199
 Adjusted R Square .71524
 Standard Error .53921

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	12.70541	12.70541
Residual	16	4.65201	.29075

F = 43.69869 Signif F = .0000

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	Beta	T	Sig T
X	.24597	.03721	.85556	6.610	.0000
(Constant)	-1.93180	.42858		-4.507	.0004

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
X2	3.60355	.91621	.01733	8.856	.0000
X3	1.98733	.93932	.05987	10.605	.0000
X4	1.46686	.95572	.11377	12.579	.0000

End Block Number 1 All requested variables entered.

Page 11 SPSS/PC+ 1/30/81

***** MULTIPLE REGRESSION *****

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

Beginning Block Number 2. Method: Enter X2

Variable(s) Entered on Step Number
2.. X2

Multiple R .97825
R Square .95697
Adjusted R Square .95123
Standard Error .22315

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	16.61048	8.30524
Residual	15	.74694	.04980

F = 166.78556 Signif F = 0.0

Page 12 SPSS/PC+ 1/30/81

***** MULTIPLE REGRESSION *****

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	Beta	T	Sig T
X	-.78102	.11699	-2.71663	-6.676	.0000
X2	.04668	5.27142E-03	3.60355	8.856	.0000
(Constant)	3.17205	.60302		5.260	.0001

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
X3	8.68930	.81579	1.0976E-04	5.278	.0001
X4	3.32054	.82251	4.0208E-04	5.411	.0001

End Block Number 2 All requested variables entered.

Page 13 SPSS/PC+ 1/30/81

**** MULTIPLE REGRESSION ****

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

Beginning Block Number 3. Method: Enter X3

End Block Number 3 Tolerance = .010 Limits reached.
No variables entered for this block.

Page 14 SPSS/PC+ 1/30/81

**** MULTIPLE REGRESSION ****

Equation Number 1 Dependent Variable.. Y

Beginning Block Number 4. Method: Enter X4

End Block Number 4 Tolerance = .010 Limits reached.
No variables entered for this block.

Page 15 SPSS/PC+ 1/30/81

This procedure was completed at 16:53:40

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Listwise Deletion of Missing Data

Equation Number 1 Dependent Variable.. LNY

Beginning Block Number 1. Method: Enter

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Equation Number 1 Dependent Variable.. LNY

Variable(s) Entered on Step Number

1.. X

Multiple R .99825
 R Square .99650
 Adjusted R Square .99628
 Standard Error .09697

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	42.75239	42.75239
Residual	16	.15014	.00938

F = 4555.99341 Signif F = 0.0

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Equation Number 1 Dependent Variable.. LNY

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	Beta	T	Sig T
X	.45120	6.68466E-03	.99825	67.498	0.0
(Constant)	-6.20998	.07699		-80.655	0.0

End Block Number 1 All requested variables entered.

แบบฝึกหัดบทที่ 5

5.1 จากตัวอย่างที่ 5.4 จง fit cubic และ quartic model กับ Rainfall data เพื่อหาค่าที่แสดงไว้ในตารางที่ 5.12 ซึ่งยังไม่ได้แสดงการหาไว้

5.2 จงแสดงการหาค่า $\hat{\chi}$ ในตัวอย่างที่ 5.3

5.3 เรทราบว่า cubic model นั้น fit กับข้อมูลต่อไปนี้
 จงหา 95 % ช่วงความเชื่อมั่นของสัมประสิทธิ์แต่ละตัว คือ χ_0 , χ_1 , χ_2 และ χ_3

y	0.5	3.0	1.6	1.3	0.2	0.5	-.1	1.2
x	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5

5.4 ในการทดลองเกี่ยวกับการสีกร่อนของโลหะ ได้ข้อมูลดังต่อไปนี้ (กำหนด $\alpha = .05$)

ความดันไฟฟ้าที่ใช้	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
เปอร์เซ็นต์การสีกร่อน	1.10	1.43	2.11	3.12	2.50	2.21	2.50	5.90

- (a) จงหา degree ของพหุนามเส้นโค้งที่เหมาะสมกับข้อมูล
- (b) จงประมาณค่าของสัมประสิทธิ์ของพหุนามเส้นโค้งในข้อ (a) โดยการใช้วิธีคูณคูณเฉลยอย่างย่อ (วิธีที่อธิบายในบทที่ 4)

หมายเหตุ สำหรับแบบฝึกหัดข้อ 5.3 และ 5.4 ถ้าต้องการใช้วิธีออร์ธอกอนัลพหุนามเส้นโค้ง ได้กำหนดตารางแสดงค่าของ $P_1 - P_5$ สำหรับ $n = 8$ และอีกตารางหนึ่งคือค่า $P_1 - P_5$ สำหรับ $n = 10$

n=8

i	P ₁	P ₂	P ₃	P ₄	P ₅
1	-7	7	-7	7	-7
2	-5	1	5	-13	23
3	-3	-3	7	-3	-17
4	-1	-5	3	9	-15
5	1	-5	-3	9	15
6	3	-3	-7	-3	17
7	5	1	-5	-13	-23
8	7	7	7	7	7
ΣP^2	168	168	264	616	2184

n=10

i	P ₁	P ₂	P ₃	P ₄	P ₅
1	1	-4	-12	18	6
2	3	-3	-31	3	11
3	5	-1	-35	-17	1
4	7	2	-14	-22	-14
5	9	6	42	18	6
6	-9	6	-42	18	-6
7	-7	2	14	-22	14
8	-5	-1	35	-17	-1
9	-3	-3	31	3	-11
10	-1	-4	12	18	-6
ΣP^2	330	132	8580	2860	780