

บทที่ 8

Multicollinearity

8.1 สรุปความรู้เกี่ยวกับ Characteristic Value

เนื่องจากการศึกษาเรื่อง Characteristic Value และ Characteristic Vector ในวิชา Linear Algebra เป็นเรื่องที่น่าไปสู่ความรู้เรื่องความเป็นอิสระต่อกันของเวกเตอร์ (Independent หรือ Orthogonal) ขณะเดียวกันกับที่ปัญหา Multicollinearity ก็คือ ปัญหาที่เกิดจากเวกเตอร์ต่าง ๆ ในเมตริกซ์ X ของสมการ $Y = X\beta + U$ มีความข้องเกี่ยวกันอยู่ในบางระดับ การวินิจฉัยปัญหา Multicollinearity จึงต้องอาศัยความรู้เกี่ยวกับ Characteristic Value และ Characteristic Vector เป็นพื้นฐานอยู่ตลอดเวลา และเพื่อให้เกิดความเข้าใจโดยตลอดโดยที่ความรู้พื้นฐานทางพีชคณิตเชิงเส้นจักไม่เป็นอุปสรรคต่อความรู้ความเข้าใจในการศึกษาเรื่องราวของ Multicollinearity ผู้เขียนขอถือโอกาสนี้สรุปความรู้เกี่ยวกับ Characteristic Value ไว้ในที่นี้เสียก่อน โดยจะกล่าวถึงเฉพาะ Characteristic Value ของ Symmetric Matrix เท่านั้น ทั้งนี้เพราะเมตริกซ์ที่เราจะเกี่ยวข้องต่อไปในปัญหา Multicollinearity คือ เมตริกซ์ $X'X$ ซึ่งเป็น Symmetric Matrix

ให้ $Y'AY$ เป็น Quadratic Form โดยเราต้องการ Maximize $Y'AY$ ภายใต้ข้อจำกัดว่า Y เป็น Orthogonal Vector กล่าวคือ $Y'Y = 1$ เมื่อ A เป็น Matrix of Quadratic Form ขนาด $n \times n$

ดังนั้นโดยอาศัย Lagrangian Multiplier จะพบว่า

$$F = Y'AY - \lambda(Y'Y - 1)$$

$$\frac{\partial F}{\partial Y} = 0 = 2AY - 2\lambda Y = 0$$

$$\text{หรือ} \quad (A - \lambda I_n)Y = 0 \quad \text{หรือ} \quad AY = \lambda Y$$

นั่นคือเวกเตอร์ Y ที่จะมีผลให้ Quadratic Form $Y'AY$ มีค่าสูงสุดภายใต้ข้อจำกัดว่า เวกเตอร์ Y ต้องเป็น Orthogonal Vector คือ เวกเตอร์ Y ที่สอดคล้องกับระบบสมการ $AY = \lambda Y$

และเนื่องจากสมการ $(A - \lambda I_n)Y = 0$ เป็น Linear Homogeneous System ซึ่งจะมี Non-Trivial (Nonnull หรือ Nonzero) ได้ก็เฉพาะเมื่อ $(A - \lambda I_n)$ ไม่มี Full Rank (คือ $r(A - \lambda I_n) < n$) ดังนั้นจึงมีผลให้ $|A - \lambda I_n| = 0$

สมการ $|A-\lambda I_n| = 0$ เรียกว่า Characteristic Polynomial, $f(\lambda)$ รากของสมการ $f(\lambda)$ คือ λ_i , $i = 1, 2, \dots, n$ เรียกว่า Characteristic Root เวกเตอร์ที่สอดคล้องกับรากแต่ละค่าของ $f(\lambda)$ เรียกว่า Characteristic Vector, Y_i ; $i = 1, 2, \dots, n$

ตัวอย่างเช่นเมื่อกำหนดให้

$$B = \begin{bmatrix} 2 & 2 & -7 \\ 2 & 1 & -2 \\ 0 & 1 & -3 \end{bmatrix}$$

เราสามารถคำนวณหา Characteristic Value ของ B และ Characteristic Vector ที่สอดคล้องกันได้ดังนี้ (B ไม่เป็น Symmetric Matrix)

จาก $f(\lambda) = |A-\lambda I_3| = 0$ แสดงว่า

$$f(\lambda) = \begin{vmatrix} 2-\lambda & 2 & -7 \\ 2 & 1-\lambda & -2 \\ 0 & 1 & -3-\lambda \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= -(2-\lambda)(1-\lambda)(3+\lambda) - 14 + 4(3+\lambda) + 2(2-\lambda) \\ &= -\lambda^3 + 13\lambda - 12 \end{aligned}$$

เมื่อกำหนดให้ $f(\lambda) = 0$ คือให้

$$-\lambda^3 + 13\lambda - 12 = 0$$

จะได้ $(\lambda-1)(\lambda-3)(\lambda+4) = 0$ หรือ $\lambda = 1, 3, -4$

เมื่อ $\lambda_1 = 1$ จะได้ Characteristic Vector จากสมการ $(B-\lambda_1 I_3) Y = 0$ ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 2-1 & 2 & -7 \\ 2 & 1-1 & -2 \\ 0 & 1 & -3-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

หรือ $y_1 + 2y_2 - 7y_3 = 0 \quad \dots (1)$

$$2y_1 - 2y_3 = 0 \quad \dots (2)$$

$$y_2 - 4y_3 = 0 \quad \dots (3)$$

ข้อสังเกต ขอให้สังเกตว่าสมการทั้ง 3 นี้ไม่เป็นอิสระต่อกัน การหาคำตอบจึงต้องใช้

Parametric Equation

จาก (2) พบว่า $y_1 = y_3$

จาก (3) พบว่า $y_2 = 4y_3$

ถ้าให้ $y_3 = k_1$ จะได้ Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ $\lambda_1 = 1$ จำนวนมากมาย
หลายชุดดังนี้

$$Y_1 = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = k_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$Y_1 = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{คือ Characteristic Vector ชุดหนึ่งที่สอดคล้องกับ } \lambda_1 = 1$$

สำหรับ $\lambda_2 = 3$, $\lambda_3 = -4$ ก็สามารถหาเวกเตอร์ที่สอดคล้องได้ในทำนองเดียวกัน

คือ

$$Y_2 = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad Y_3 = \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

และเราสามารถพิสูจน์ได้โดยง่ายว่า Y_1, Y_2 และ Y_3 เป็นอิสระเชิงเส้นต่อกันเสมอ ดังทฤษฎีต่อไปนี้

ทฤษฎี 1 เมื่อ $\lambda_i ; i = 1, 2, \dots, n$ เป็น Characteristic Value ที่มีค่าแตกต่างกันของ แมตริกซ์ B Characteristic Vector $Y_i ; i = 1, 2, \dots, n$ ที่สอดคล้องกับ λ_i จะเป็นอิสระเชิงเส้นต่อกันเสมอ และเมื่อ B เป็น Symmetric Matrix เวกเตอร์ Y_i ใดๆ จะตั้งฉาก (Orthogonal) กันเสมอ

นอกจากนี้ยังมีทฤษฎีเกี่ยวกับ Similar Matrix และ Diagonal Matrix ซึ่งล้วนสืบเนื่องจาก ปัญหา Characteristic Value ทั้งสิ้น ดังนี้

ทฤษฎี 2 Similar Matrix จะมีดีเทอร์มิแนนท์เท่ากันทั้งให้ค่า Characteristic Value เดียวกัน และมีผลให้มี Characteristic Vector เดียวกัน

หมายเหตุ แมตริกซ์ B จะ Similar กับแมตริกซ์ A ได้ถ้าหากว่าเราสามารถเสาะหา แมตริกซ์ C ที่เป็น Nonsingular มาได้ และมีผลให้ $B = C^{-1}AC$

ทฤษฎี 3 ถ้า λ คือ Characteristic Value ของ A แล้ว λ^k จะเป็น Characteristic Value ของ A^k (โดยที่ k เป็นจำนวนเต็มใด ๆ) ในขณะที่เดียวกันถ้า Y คือ Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ λ เวกเตอร์ Y ก็จะเป็น Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ λ^k ด้วย

ทฤษฎี 4 ถ้าแมตริกซ์ A Similar กับ Diagonal Matrix D แล้ว D จะสามารถจัดรูปได้ดังนี้

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$

เมื่อ $\lambda_i ; i = 1, 2, \dots, n$ คือ Characteristic Value ของ A

ทฤษฎี 6 ถ้า λ_i คือ Characteristic Value ที่สอดคล้องกับ Characteristic Vector ของ B เมื่อ $B = C^{-1}AC$ แล้ว $X_i = CY_i$ จะเป็น Characteristic Vector ของ A ที่สอดคล้องกับ Characteristic Value λ_i ของ B ดังกล่าว

ทฤษฎี 6 A จะ Similar กับ Diagonal Matrix D ก็ต่อเมื่อ Characteristic Vector ของ A เป็นอิสระเชิงเส้นต่อกัน

ทฤษฎี 7 ถ้า Characteristic Value ของ A มีค่าแตกต่างกันแล้ว Characteristic Vector ของ A จะต่างกันและ A จะ Similar กับ B

ทฤษฎี 8 Real Symmetric Matrix ทุกรูปจะ Orthogonally Similar กับ D

ประโยชน์จากทฤษฎีเหล่านี้สามารถสรุปได้ดังนี้

สมมติว่า Y คือเมตริกซ์ที่สดมภ์ของ Y คือ Characteristic Vector Y_1, Y_2, \dots, Y_n กล่าวคือ $Y = [Y_1, Y_2, \dots, Y_n]$ และถ้าหากว่า $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ มีค่าต่างกันทั้งหมด สดมภ์ของ Y จะตั้งฉากกัน (Orthogonal) กัน คือ $Y_i^T Y_j = 1$ เมื่อ $i=j$ และมีผลให้ Y เป็น Orthogonal matrix ($Y^T = Y^{-1}$ หรือ $Y^T Y = I$) และเราสามารถเสนอระบบสมการ

$AY_i = \lambda_i Y_i ; i = 1, 2, \dots, n$ รวมกันในรูปเมตริกซ์ได้ดังนี้

$$A[Y_1, Y_2, \dots, Y_n] = [\lambda_1 Y_1, \lambda_2 Y_2, \dots, \lambda_n Y_n] \quad \text{หรือ} \quad AY = YD$$

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix} = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]$$

พิจารณาสมการ $AY = YD$ (ขอให้สังเกตว่าเมตริกซ์ Y ในที่นี้คือเมตริกซ์ C ในทฤษฎี

2) จะพบว่า Y เป็น Orthogonal Matrix เมื่อนำ Y^{-1} คูณด้านหน้าสมการ $AY = YD$ จะได้

$$Y^{-1}AY = Y^{-1}YD = D$$

หรือ $Y^{-1}AY = D$

แสดงว่าเมื่อ A มี Characteristic Value ที่แตกต่างกัน เราย่อมสามารถหา Orthogonal Matrix Y ซึ่งประกอบไปด้วย Characteristic Vector y_1, y_2, \dots, y_n ที่มีผลให้ $Y'AY$ Similar กับ D เมื่อ $D = \text{diag} (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$

หมายเหตุ ความรู้ในส่วนนี้ผู้เขียนได้เคยอ้างอิงไปครั้งหนึ่งแล้วในตอนที่ว่าด้วย GLS เกี่ยวกับการหาเมตริกซ์ P ที่มีผลให้ $V(PU) = \sigma^2 I_n$ ความรู้เหล่านี้จะถูกนำไปใช้อีกครั้งหนึ่งในการวิเคราะห์ปัญหา Multicollinearity และ Ridge Regression

นอกเหนือจากที่กล่าวมาแล้วหากพิจารณาถึง Rank และ Trace เราจะพบรายละเอียดเพิ่มเติมดังนี้

$$\begin{aligned} \text{จาก } Y'AY &= D & \text{จะพบว่า} \\ |Y'AY| &= |D| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n \end{aligned}$$

เมื่อพิจารณา Orthogonal Matrix Y เราทราบว่า $|Y| = |Y'| = \pm 1$ และทราบว่า $|Y'AY| = |Y'| |A| |Y|$ ดังนั้น $|A| = |D| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n$ หรือเราสามารถกล่าวได้ว่า ดีเทอร์มิแนนต์ของเมตริกซ์ใด ๆ มีค่าเท่ากับผลคูณของ Characteristic Vector

และจาก $Y'AY = D$ จะพบว่า $\text{tr}(Y'AY) = \text{tr} D$ แต่ $\text{tr}(Y'AY) = \text{tr}(A Y Y') = \text{tr} A$ ขณะที่ $\text{tr} D = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n$ นั่นคือ $\text{tr} A = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n$ หรือกล่าวได้ว่า trace ของเมตริกซ์ใด ๆ มีค่าเท่ากับผลรวมของ Characteristic Value

นอกจากนี้เรายังสามารถพิสูจน์ได้ว่า $r(A) = r(D)$ ขณะเดียวกัน จากสมการ $AY = YD$ ถ้านำ Y^{-1} คูณด้านหลังจะได้ $A Y Y^{-1} = Y D Y^{-1}$ หรือ $A = Y D Y'$ หรือ

$$A = \lambda_1 Y_1 Y_1' + \lambda_2 Y_2 Y_2' + \dots + \lambda_n Y_n Y_n'$$

$$\begin{aligned} \text{และ } A^2 &= AA = (YDY') (YDY') = YD(Y'Y)DY' = YDI_nDY' = YD^2Y' \\ &= \lambda_1^2 Y_1 Y_1' + \lambda_2^2 Y_2 Y_2' + \dots + \lambda_n^2 Y_n Y_n' \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A^r &= AA \dots A = YD^r Y' \\ &= \lambda_1^r Y_1 Y_1' + \lambda_2^r Y_2 Y_2' + \dots + \lambda_n^r Y_n Y_n' \end{aligned}$$

ซึ่งแสดงว่า Characteristic Value ของ A^r ก็คือกำลังที่ r ของ Characteristic Value ของ A นั้นเอง

8.2 ปัญหา Multicollinearity และผลกระทบทางสถิติ

ปัญหา Multicollinearity¹ หมายถึงสถานการณ์ที่ตัวแปรต่าง ๆ มีความสัมพันธ์กันอย่างน้อย 2 ครั้งคือ

ครั้งแรก ตัวแปรสัมพันธ์กันในรูป Linear Model $Y = X\beta + U$

ครั้งที่สอง ตัวแปรอิสระ X 's มีความสัมพันธ์เชิงเส้นต่อกัน (Linearly Dependent) คือ $c_1 X_1 + c_2 X_2 + c_3 X_3 + \dots + c_k X_k = 0$ เมื่อ c_i เป็นค่าคงที่ที่ไม่ใช่ 0 ทั้งหมด

จากความสัมพันธ์ทั้งสองระดับนี้ เมื่อพิจารณาให้ดีแล้วพบว่าความสัมพันธ์ครั้งที่สองคือความสัมพันธ์ที่นำไปสู่ปัญหา Multicollinearity หรือถ้าจะกล่าวให้เฉพาะเจาะจงเราอาจกล่าวได้ว่า ปัญหา Multicollinearity คือ ปัญหาที่เกิดขึ้นจากการที่ตัวแปรอิสระมีความสัมพันธ์ภายในต่อกันในอัตราค่อนข้างสูง ซึ่งความสัมพันธ์ลักษณะดังกล่าวจะมีผลให้แมตริกซ์ $X'X$ เป็น Singular Matrix หรือมีลักษณะของ Near Singularity²

¹ Multicollinearity = Multi + Colinearity คำว่า Colinear ในทางพีชคณิตเชิงเส้นหมายถึง สถานการณ์ที่เวกเตอร์หนึ่งต้องพึ่งพิงเวกเตอร์อื่น หรือเวกเตอร์หนึ่งทับไปบนเวกเตอร์อื่น ซึ่งแสดงให้เห็นว่าได้เกิด Linearly Dependent ระหว่างเวกเตอร์ขึ้น คำว่า Multicollinearity ถูกนำมาใช้ในงานวิเคราะห์สมการถดถอยเป็นครั้งแรกในปี ค.ศ. 1934 โดย Ragnar Frisch

² ถ้า Column Vector ที่ประกอบกันขึ้นเป็นแมตริกซ์ X มีลักษณะของ Linearly Dependent แมตริกซ์ X จะไม่มี Full Rank ย่อมหมายความว่า $X'X$ เป็น Singular Matrix คือ $|X'X| = 0$ อันจะมีผลให้ $(X'X)^{-1}$ ไม่ปรากฏค่า แต่ถ้า Column Vector ไม่ถึงกับมี Linearly Dependent แต่มีลักษณะที่ผันแปรร่วมทิศทางกัน $X'X$ จะเป็นเพียง Near Singularity ที่ $|X'X|$ มีค่าใกล้ 0 ซึ่งเรายังคงหา $(X'X)^{-1}$ ได้ แต่สมาชิกของ $(X'X)^{-1}$ จะมีค่าสูง

ในทางปฏิบัติเรามักจะพบว่าตัวแปรอิสระมีความสัมพันธ์กันในลักษณะของการผันแปร
 ร่วมไปในทิศทางเดียวกันเท่านั้น คือไม่มีความสัมพันธ์สูงถึงระดับที่ตัวแปรอิสระบางส่วนมีค่าเท่า
 กันหรือเป็นตัวแปรเดียวกัน ปัญหาที่ปรากฏพบจึงปรากฏในลักษณะที่ $X'X$ มีธรรมชาติของ
 Near Singularity เท่านั้น ไม่ถึงกับเป็น Singular Matrix แต่ถึงแม้ว่า $X'X$ มีธรรมชาติของ
 Near Singularity ที่มีผลให้เรายังคงประมาณค่า β ได้จากสูตรเดิมคือ $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$ แต่สิ่งที่เป็น
 ปัญหาก็ยังคงปรากฏอยู่ซึ่งจะได้สรุปเป็นข้อ ๆ ดังนี้

1. เมื่อเกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้น นักวิจัยจะประสบความยุ่งยากในการจำแนก
 อิทธิพลของตัวแปรอิสระ ออกมาให้เห็นอย่างชัดเจนว่า ตัวแปรอิสระหนึ่ง ๆ มีอิทธิพลต่อ Y มากน้อย
 เพียงใด ที่เป็นเช่นนี้เพราะตัวแปรอิสระบางส่วนผูกพันกันอยู่ หรือมีทิศทางของการผันแปรร่วม
 กัน ตัวอย่างเช่น งานวิเคราะห์ทางเศรษฐกิจเราพบว่าในจังหวะที่สถานการณ์ทางเศรษฐกิจเฟื่องฟู
 (Boom) ตัวแปรรายได้ การบริโภค การออม การลงทุน ราคาสินค้า ตลอดจนการว่าง
 (หรือการมีงานทำ) จะขยายตัว หรือเพิ่มค่าไปในทางบวกร่วมกัน ขณะเดียวกันที่เมื่อจังหวะที่สถาน-
 การณ์ทางเศรษฐกิจซบถ่วง บัจจัยเหล่านี้ก็ลดตัวลง หรือลดค่าลง คือเปลี่ยนแปลงไปใน
 ทางลบร่วมกัน (Negative Covariation) หากนักวิจัยนำตัวแปรเหล่านี้เข้าเป็นตัวแปรสำหรับวิเคราะห์
 สมการถดถอย $Y = f(X's)$ ปัญหาที่เกิดขึ้นก็คือ $X'X$ มีลักษณะของ Near Singularity และนักวิจัยเอง
 ก็ไม่อาจแยกได้ว่าปัจจัยใดเป็นสาเหตุให้ปัจจัย Y ผันแปรไป จะจัดปัจจัยใดทิ้งก็ไม่อาจแน่ใจว่าจะ
 ผิดพลาดหรือไม่

สมมติว่าแบบจำลองที่กำหนดขึ้นคือ

$$Y = \beta_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_5 X_5 + u$$

และเราทราบว่า X_3, X_4 และ X_5 มีลักษณะของการผันแปรร่วมไปในทิศทางเดียวกัน (มี Covaria-
 tion หรือ move together) ซึ่งเป็นสถานการณ์ที่เราไม่อาจแยกประมาณค่า β_3, β_4 และ β_5
 ได้ ทางออกที่พอเป็นไปได้คือถือว่า $X_3 = X_4 = X_5$ แบบจำลองข้างต้นจึงเปลี่ยนรูปเป็น

$$Y = \beta_1 + \beta_2 X_2 + (\beta_3 + \beta_4 + \beta_5) X_3 + u$$

ต้องประมาณในรูปผลรวมคือ $(\beta_3 + \beta_4 + \beta_5)$ ไม่อาจแยกประมาณได้ ปัญหาก็คือ เราหา BLUE ของ $(\beta_3 + \beta_4 + \beta_5)$ ได้หรือไม่ หรือนัยหนึ่งค่าประมาณของ $(\beta_3 + \beta_4 + \beta_5)$ เป็น BLUE ของ $(\beta_3 + \beta_4 + \beta_5)$ หรือไม่

2. เมื่อเกิดปัญหา Multicollinearity ค่าประมาณของ β_j 's จะไม่แม่นยำและไม่มั่นคง หมายความว่าเมื่อเพิ่มหรือลดขนาดตัวอย่างเพียงเล็กน้อย ค่าประมาณของ β_j ' จะเปลี่ยนแปลงไปอย่างใหญ่หลวง แต่ $\hat{v}(\hat{\beta}_j)$ อาจไม่ได้รับความกระทบกระเทือนจากปัญหา Multicollinearity กล่าวคือจากการศึกษาในวาระต่าง ๆ กันพบว่าบางครั้งเมื่อเพิ่ม Colinear Variable เข้าสู่สมการจะพบว่า $\hat{v}(\hat{\beta}_j)$ เพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว แต่ในบางครั้งกลับพบว่า $\hat{v}(\hat{\beta}_j)$ มิได้เปลี่ยนแปลงไป แต่ประการใด อย่างไรก็ตามเมื่อพิจารณาของ Multicollinearity ที่มีต่อ $\hat{v}(\hat{\beta}_j)$ จะยังไม่แจ่มชัดเพราะมีประเด็นพอให้หวังติงได้ แต่โดยทั่วไปแล้ว $\hat{v}(\hat{\beta}_j)$ จะสูงขึ้นเมื่อมีปัญหา Multicollinearity เหตุที่ $\hat{v}(\hat{\beta}_j)$ มีค่าสูงย่อมมีผลให้ t_j มีค่าต่ำเพราะ $t_j = \hat{\beta}_j / \sqrt{\hat{v}(\hat{\beta}_j)}$ ผลที่ติดตามมาคือ β_j ไม่มีนัยสำคัญ และทำให้นักวิจัยตัดตัวแปรอิสระ x_j ทิ้งไปทั้งที่ x_j อาจเป็นตัวแปรที่ทรงความสำคัญต่องานเป็นอย่างยิ่งก็ได้

3. เมื่อเกิดปัญหา Multicollinearity ค่าประมาณของ β_j บางตัวจะมีเครื่องหมายผิดไปจากความเป็นจริง แต่ถ้าเครื่องหมายถูกต้องขนาดของ $\hat{\beta}_j$ ก็ผิดแผกไปจากที่ควรจะเป็น หรือมีค่าที่ไม่ก่อให้เกิดประโยชน์ในเชิงอภิปรายผล

4. เมื่อเกิดปัญหา Multicollinearity จะพบว่า $R^2_{1, 2, 3, \dots, k} < R^2_{j, 2, 3, \dots, j-1, j+1, \dots, k}$
; $j = 2, 3, \dots, k$

5. เมื่อเกิดปัญหา Multicollinearity พังก์ชันของ $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ คือ

$$\hat{w}\beta = w_1\beta_1 + w_2\beta_2 + \dots + w_k\beta_k$$

จะไม่เป็น Linear Unbiased Estimator

สำหรับผลกระทบที่ 5 นี้เป็นผลกระทบที่นับว่ารุนแรงที่สุดของปัญหา Multicollinearity เพราะถึงแม้จะเกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้น $\hat{\beta}$ ก็ยังคงเป็น Unbiased Estimator ของ β และเราพอจะแก้ปัญหาค่าประมาณค่า $\hat{\beta}_j$ ได้ด้วยการประมาณผลรวมของ β_j (ดูข้อ 1) แต่สิ่งที่นับว่าเป็นปัญหาก็คือค่าประมาณของผลรวมดังกล่าวไม่เป็น Linear Unbiased Estimator และในบางครั้งผลรวมหรือฟังก์ชันดังกล่าวก็เป็นสิ่งที่ไม่อาจประมาณค่าได้

หมายเหตุ จากข้อ 1 ผลรวมของพารามิเตอร์คือ $\beta_3 + \beta_4 + \beta_5$ สามารถเสนอในรูปแบบได้ดังนี้คือ

$$\beta_3 + \beta_4 + \beta_5 = 0\beta_1 + 0\beta_2 + \beta_3 + \beta_4 + \beta_5 = [0, 0, 1, 1, 1] \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_5 \end{bmatrix} = w'\beta$$

สำหรับผลกระทบที่ 5 นี้มีทฤษฎีสำคัญที่เป็นการแสดงให้เห็นว่าเมื่อเกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นเราสามารถหา Linear Unbiased Estimator ของ $w'\beta$ ได้ โดยอาศัย Characteristic Vector ดังนี้

ทฤษฎี 8.1 สมการ $Y = X\beta + U$ ที่ X ไม่มี Full Column Rank นั้นเราสามารถหา Unbiased Estimator ของ $w'\beta$ ได้ถ้าหากว่าสามารถจัดให้ w อยู่ในรูปการประกอบกันเชิงเส้นของแถวต่าง ๆ ของ X ซึ่งถ้าหากกระทำได้ BLUE ของ $w'\beta$ คือ $w'\hat{\beta}$ เมื่อ $\hat{\beta}$ คือ Solution จากระบบสมการ $X'X\hat{\beta} = X'Y$ โดย $w'\hat{\beta}$ จะเป็น Unique Estimator ของ $w'\beta$ เสมอ

ทฤษฎี 8.2 เราสามารถประมาณค่าฟังก์ชัน $w'\beta$ ได้ก็ต่อเมื่อ w เป็น Linear Combination ของ Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ Characteristic Value λ_1 ที่ไม่ใช่ 0 ของ $X'X$

พิสูจน์ (ทฤษฎี 8.2)

$$\text{จากสมการ } Y = X\beta + U$$

เราสามารถหาเมตริกซ์ P ที่แต่ละสดมภ์ของ P คือ Normalized Characteristic Vector ของเมตริกซ์ $X'X$ ที่มีผลให้ P เป็น Orthogonal Matrix ได้ ($P' = P^{-1}$ หรือ $P'P = PP' = I_k$)

ดังนั้นสมการ $Y = X\beta + U$ จึงจัดรูปเสียใหม่ได้ดังนี้คือ

$$\begin{aligned} Y &= X(P\hat{P}')\beta + U \\ &= (XP)(\hat{P}'\beta) + U \\ &= Z\theta + U \quad \text{เมื่อ } Z = XP \text{ และ } \theta = \hat{P}'\beta \end{aligned}$$

เมื่อพิจารณาเมตริกซ์ Z จะพบว่า Z เป็น Orthogonal Matrix และ $X'X$ เป็น Orthogonal Matrix เพราะ

$$Z'Z = (XP)'(XP) = P'(X'X)P = D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)$$

และถ้าเมตริกซ์ X มี Rank เท่ากับ $k-j$ (หมายความว่า X ไม่มี Full Rank) เมตริกซ์ $X'X$ จะมี Characteristic Value อยู่ j ตัวที่มีค่าเป็น 0 มีผลให้ j สดมภ์สุดท้ายของ XP เป็น Zero Vector ซึ่งย่อมทำให้เวกเตอร์ θ มีสมาชิกเพียง $k-j$ ตัวหรือ $\theta_{k-j+1}, \theta_{k-j+2}, \dots, \theta_k$ เป็นพารามิเตอร์ที่ต้องถูกขจัดออกไปจากสมการเสียก่อน เพราะไม่อาจประมาณค่าได้จากข้อมูลในเมตริกซ์ X ในทำนองกลับกันพารามิเตอร์ $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{k-j}$ จะเป็นสิ่งที่สามารถประมาณค่าได้จากข้อมูลในเมตริกซ์ X

ผลข้างต้นยืนยันว่าฟังก์ชัน $\hat{P}'\beta$ จะเป็นสิ่งที่เราสามารถประมาณค่าได้ก็ต่อเมื่อ $\hat{P}'\beta$ เป็นฟังก์ชันที่แปลงรูปให้เป็น Linear Combination ของ $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{k-j}$ เท่านั้น กล่าวคือ

$$\hat{P}'\beta = \hat{P}'(P\hat{P}')\beta = (P'\hat{P})'(P\beta) = (P'\hat{P})'\theta$$

แต่ $\theta_{k-j+1}, \theta_{k-j+2}, \dots, \theta_k$ เป็นสิ่งที่ประมาณค่าไม่ได้ ดังนั้น $\hat{P}'\beta$ จะประมาณได้ก็ต่อเมื่อสมาชิก j ตัวสุดท้ายของเวกเตอร์ $P'\hat{P}$ ต้องเป็น 0

ผลการพิสูจน์ข้างต้นแสดงให้เห็นว่าเราควรแปลงรูปเวกเตอร์ W อย่างไรจึงจะมีผลให้ $\hat{P}'\beta$ เป็นฟังก์ชันที่สามารถหาค่าประมาณได้ นอกจากนี้ผลพลอยได้ที่สำคัญอีกประการหนึ่งก็คือ การแปลงรูปเวกเตอร์ W ยังสามารถชี้ให้เห็นว่าฟังก์ชันใดฟังก์ชันใดที่มีค่าประมาณที่แม่นยำอีกด้วย (ความจริงส่วนนี้จะเชื่อมโยงไปถึง Ridge Regression ที่จะได้กล่าวถึงต่อไป)

ถ้า p_1 เป็น Normalized Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับราก λ_1 ของเมตริกซ์ $X'X$ ดังนั้นโดยอาศัยทฤษฎี 8.2 $\hat{P}'\beta = p_1'\beta$ จะเป็นฟังก์ชันที่สามารถประมาณค่าได้ โดยที่ค่าประมาณของ $p_1'\beta$ ก็คือ $p_1'\hat{\beta}$ เมื่อ $\hat{\beta}$ คือรากของสมการ $X'X\hat{\beta} = X'Y$ และ $p_1'\hat{\beta}$ จะเป็น BLUE ของ $p_1'\beta$ (ทฤษฎี 8.1) โดยที่ $v(p_1'\hat{\beta}) = \frac{\sigma^2}{\lambda_1}$ ซึ่งสามารถพิสูจน์ให้เห็นได้ดังนี้

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

$$\text{ดังนั้น } p_1'X'X\hat{\beta} = p_1'X'Y$$

แต่จากความรู้เรื่อง Characteristic Value เราทราบว่า $AX = \lambda X$ หรือ $X'A' = \lambda X'$ เมื่อ X คือ Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับราก λ

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้นโดยอาศัยความรู้ดังกล่าวเราย่อมาสรุปได้ว่า } p_1'(X'X) &= \lambda_1 p_1' \text{ และ } p_1'(X'X)\hat{\beta} \\ &= \lambda_1 p_1'\hat{\beta} \end{aligned}$$

$$\text{นั่นคือ } p_1'X'X\hat{\beta} = p_1'X'Y = \lambda_1 p_1'\hat{\beta}$$

สิ่งที่เราต้องการทราบคือ $v(p_1'\hat{\beta}) = ?$ ซึ่งจากสมการข้างบนนี้ทำให้เราทราบว่า

$$v(\lambda_1 p_1'\hat{\beta}) = v(p_1'X'X\hat{\beta}) = v(p_1'X'Y)$$

นั่นคือ

$$\begin{aligned} \lambda_1^2 v(p_1'\hat{\beta}) &= v(p_1'X'Y) = (p_1'X')(v(Y))(p_1'X')' \\ &= \sigma^2 p_1'(X'X)p_1 \end{aligned}$$

แต่ $p_1'(X'X)p_1 = \lambda_1$ หรือเมตริกซ์ $X'X$ Similar กับเมตริกซ์ $D = [\lambda_1]_{1 \times 1}$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } \lambda_1^2 v(p_1'\hat{\beta}) &= \sigma^2 \lambda_1 \\ v(p_1'\hat{\beta}) &= \frac{\sigma^2}{\lambda_1} \end{aligned}$$

¹ จากทฤษฎีใน Multivariate Normal Density ที่ $Y \sim N(\mu, V)$ ถ้า $Z = BY$ เราสามารถพิสูจน์ได้ว่า

$$Z \sim N(B\mu, BV B')$$

นอกจากนี้เรายังสามารถพิสูจน์ได้ว่า $p_1\hat{\beta}$ และ $p_j\hat{\beta}$ เป็นอิสระต่อกัน คือ $\text{cov}(p_1\hat{\beta}, p_j\hat{\beta}) = 0$ ในทุกค่า i, j ที่ $i \neq j$

และจากความรู้เหล่านี้ ถ้า p_1, p_2, \dots, p_{k-j} เป็น Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{k-j}$ ที่ไม่ใช่ 0 ของเมทริกซ์ $X'X$ และถ้าเราจัดฟังก์ชัน w อยู่ในรูป

$$w = K_1 p_1 + K_2 p_2 + \dots + K_{k-j} p_{k-j}$$

เราย่อมสามารถพิสูจน์ได้ว่า

$$v(w\hat{\beta}) = \sigma^2 \left(\frac{K_1^2}{\lambda_1} + \frac{K_2^2}{\lambda_2} + \dots + \frac{K_{k-j}^2}{\lambda_{k-j}} \right)$$

จึงเห็นได้ว่า ถ้า K_j มีค่าสูง และ λ_j มีค่าต่ำ $w\hat{\beta}$ จะขาดความแม่นยำ และถ้า λ_j มีค่าสูงเพียงใด $w\hat{\beta}$ ก็จะมีค่าความแม่นยำสูงขึ้นเพียงนั้น

หมายเหตุ เมื่อ $w = K_1 p_1 + K_2 p_2 + \dots + K_k p_k$ ดังนั้น

$$\begin{aligned} v(w\hat{\beta}) &= w' v(\hat{\beta}) w \\ &= w' [\sigma^2 (X'X)^{-1}] w \\ &= \sigma^2 w' \left[\sum_{j=1}^k \frac{1}{\lambda_j} p_j p_j' \right] w \\ &= \sigma^2 \sum_{j=1}^k \frac{K_j^2}{\lambda_j} \end{aligned}$$

แสดงว่าปัญหา Multicollinearity มิได้มีผลให้สมการ $Y = X\beta + u$ ขาดลักษณะที่ดีที่พึงนำไปใช้ในงานพยากรณ์ ปัญหาที่เป็นผลกระทบจึงปรากฏในรูปอื่นที่กล่าวมาแล้ว

8.3 สาเหตุของปัญหา Multicollinearity

ในสถานการณ์ทางปฏิบัติที่มีใช้งานทดลองในห้องทดลองเรามักพบว่าตัวแปรอิสระต่าง ๆ มีความโน้มเอียงที่จะผันแปรไปในทิศทางเดียวกัน โดยเฉพาะในกรณีของอนุกรมเวลา ดังนั้นการตั้งข้อตกลงว่าตัวแปรอิสระทั้งหลายจะต้องเป็นอิสระต่อกัน จึงค่อนข้างจะฝืนสถานการณ์อยู่บ้าง¹ แต่ก็จำเป็นต้องตกลงไว้เช่นนั้นเพื่อผลในทางทฤษฎี (หากพบสถานการณ์ที่ขัดแย้งก็ให้พยายามหาทางปรับแก้วิธีประมาณค่า β ให้เหมาะสมต่อไปโดยไม่ทำลายข้อตกลงเดิม)

เราอาจกล่าวได้ว่าปัญหา Multicollinearity เกิดจากสาเหตุดังต่อไปนี้

1. ตัวแปรที่มีธรรมชาติที่จะผันแปรร่วมทิศทางเดียวกันอยู่แล้ว และยังมีปรากฏการณ์ภายนอกเช่น ภัยธรรมชาติ สงคราม การนัดหยุดงาน ความผันผวนทางการเมือง ฯลฯ ตัวแปรจำนวนมากก็มีความโน้มเอียงที่จะผันแปรร่วมทิศทางเดียวกันมากยิ่งขึ้น เข้มข้นขึ้น บางครั้งถึงกับมีค่าเท่ากันในบางช่วงเวลา

2. การใช้ตัวแปรที่มีไว้เท่ากับจำนวนกลุ่มย่อย (Category, Subsample) ของกลุ่มตัวอย่างทั้ง ๆ ที่แบบจำลองนั้นมีเทอมคงที่อยู่ (Intercept Term)

3. การใช้ Lagged Variable ในสมการถดถอย การใช้ Lagged Variable แม้จะมีส่วนช่วยให้แบบจำลองของเราสามารถเคลื่อนไหวรับได้กับความเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นตามกาลเวลา (ทำให้ Linear Model มีธรรมชาติของ Dynamic Model) แต่ค่าของ Lagged Variable ทั้งหมดจะเป็นค่าเดียวกัน แม้ในวาระเดียวกันจะมีค่าต่างกันแต่ค่าของ Lagged Variable ก็จะทำให้เห็นถึงการผันแปรค่าร่วมทิศทางกันเด่นชัดเป็นพิเศษ ตัวอย่างเช่นเราใช้ x_t ซึ่งมีค่าเท่ากับ 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 เป็นตัวแปรอิสระ ถ้าหากเพิ่ม x_{t-1} และ x_{t-2} ร่วมเป็นตัวแปรอิสระ จะพบว่าค่าของ x_t, x_{t-1} และ x_{t-2} ปรากฏดังนี้

¹ ข้อตกลงสมการถดถอยที่ตกลงว่าเมตริกซ์ X มี Full Column Rank แปลว่าสดมภ์ต่าง ๆ ของ X ต้องเป็นอิสระเชิงเส้นต่อกัน การตั้งข้อตกลงเช่นนี้มีเจตนาเพื่อบังคับให้เมตริกซ์ $(X'X)^{-1}$ มีค่าปรากฏ

วาระที่ (period)	X_t	X_{t-1}	X_{t-2}
3	4	3	2
4	5	4	3
5	6	5	4
6	7	6	5
7	8	7	6
8	9	8	7
9	10	9	8

ขอให้สังเกตว่า x_t , x_{t-1} และ x_{t-2} มีลักษณะของการผันแปรร่วมทาง (Covariation) กันอย่างเด่นชัดแม้ในวาระเดียวกัน จะให้ค่าต่างกัน แต่ก็มีค่าเดียวกันในต่างวาระ

ปัญหา Multicollinearity มักเกิดขึ้นกับข้อมูลอนุกรมเวลามากกว่าข้อมูลสำรวจเพราะตัวแปรที่มีธรรมชาติที่จะผันแปรร่วมทางกันตามกาลเวลา แม้จะมีผู้กล่าวว่าปัญหานี้ไม่ใช่ปัญหาสำคัญในงานที่มุ่งเพื่อการพยากรณ์ (Klein, L.R., 1967) แต่ปัญหาอันเป็นผลกระทบทางสถิติ (ตอน 8.2) ก็มีใช้สิ่งที่ไม่มีความสำคัญ เรากล้าพอที่จะเฉยเมยต่อผลกระทบเหล่านี้หรือ...?

8.4 การตรวจสอบ

ในทางปฏิบัติเรามีเครื่องมือ และยุทธวิธีที่จะใช้ตรวจสอบว่าได้เกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นหรือไม่ รุนแรงเพียงใดได้หลายวิธีด้วยกัน แต่ในแต่ละวิธีก็ยังมีจุดอ่อนให้ท้วงติงได้ว่า ยังไม่ดีพอ หรือ ยังมีจุดอ่อนอยู่ ที่เป็นเช่นนี้เพราะเราไม่อาจควบคุมให้เมตริกซ์ X และ $X'X$ มีลักษณะต่าง ๆ ได้ตามต้องการ เพราะเมตริกซ์ X และ $X'X$ มีธรรมชาติที่ผันผวนไปได้มากมายตามธรรมชาติของตัวแปร X 's และค่าของตัวแปรเหล่านั้น รวมตลอดถึงจังหวะเวลาที่ใช้ในการบันทึกข้อมูล ด้วยเหตุนี้นักวิจัยพึงใช้ยุทธวิธีในการตรวจจับปัญหา Multicollinearity ที่จะกล่าวถึงต่อไปหลาย ๆ วิธีผสมผสานกันไม่ควรใช้วิธีหนึ่งเป็นการเฉพาะเพราะอาจไม่ได้ผลเท่าที่ควร และในที่นี้จะกล่าวถึงเฉพาะกรณี que ถือว่าตัวแปรอิสระเป็น Mathematical Variable เท่านั้น ผู้ที่สนใจกรณีของ Random Variable ให้ติดตามศึกษาได้จากเอกสารอ้างอิง

8.4.1 สหสัมพันธ์เชิงเส้นระหว่างตัวแปรอิสระ

วิธีนี้กระทำโดยการวัดค่าสหสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรอิสระคือ

$$r_{st} = \frac{\sum (x_{si} - \bar{x}_s)(x_{ti} - \bar{x}_t)}{\sqrt{\sum (x_{si} - \bar{x}_s)^2 \sum (x_{ti} - \bar{x}_t)^2}} \quad ; s, t = 2, 3, \dots, k ; s \neq t$$

วิธีนี้มีแนวคิดเดิมดังนี้คือ ถ้า $x_s = cx_t$ ซึ่งแสดงว่าเวกเตอร์ x_s และ x_t มี Linearly Dependent เราสามารถพิสูจน์ได้โดยง่ายได้ว่า $r_{st} = 1$ โดยนัยกลับกันถ้า $r_{st} = 1$ ย่อมแสดงว่าเวกเตอร์ x_s และ x_t มี Perfect Colinearity เหตุที่ $x_s = cx_t$ ผลสะท้อนก็คือเมตริกซ์ X ไม่มี Full Rank

ดังนั้น สหสัมพันธ์เชิงเส้นระหว่างตัวแปรอิสระจึงนับว่าเป็นดัชนีที่พอจะสามารถชี้ให้เห็นว่าได้เกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นหรือไม่ ในทางปฏิบัติเราจะถือว่า ถ้า $r_{st} > 0.80$ หรือ 0.90 คือสัญญาณอันตรายของงานเพราะถือว่ากำลังเกิดปัญหา Multicollinearity ที่รุนแรง นอกเหนือจากใช้เฉพาะ r_{st} เป็นเกณฑ์เราอาจใช้วิธีเปรียบเทียบค่า r_{st} กับ R^2 ซึ่งก็ยังคงอยู่ในข่ายของการใช้ข้อสังเกตจากสหสัมพันธ์เชิงเส้น ตรวจสอบปัญหา Multicollinearity อยู่เพียงแต่ปรับปรุงให้ดีขึ้น กติกาใหม่นี้เราจะถือว่าเมื่อใดก็ตามที่ $r_{st} > R^2$ แสดงว่าได้เกิดปัญหา Multicollinearity ที่รุนแรงขึ้นแล้วให้เร่งแก้ไขเป็นการด่วน

วิธีการเหล่านี้แม้จะมีข้อดีอยู่ในแง่ที่ช่วยชี้ให้เห็น Linearity Dependent หรือ Near Dependent ระหว่างเวกเตอร์ แต่ถ้าตัวแปรหลายคู่ให้ค่าสหสัมพันธ์สูงกว่า 0.80 หรือ 0.90 หรือสูงกว่า R^2 นักวิจัยจะเริ่มสับสน และไม่อาจตัดสินใจได้ว่าตัวแปรใดกันแน่ที่พึงพึงตัวแปรอื่นหรือถ้าจะกล่าวในแง่มุมมองของผู้มองโลกในแง่ร้ายก็คือ “วิธีนี้ดีแต่ชี้ให้เห็นปัญหา แต่ไม่ยอมชี้ทางแก้ปัญหา”

8.4.2 Partial Regression

คำว่า Partial Regression หมายถึงการวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = f(X's)$ ทั้งสิ้น $k - 1$ ชุด แต่ละชุดใช้ตัวแปรอิสระ $k - 2$ ตัว โดยสลับเปลี่ยนตัวแปรอิสระออกจากสมการเดิมคราวละ 1 ตัว แล้วคำนวณหา R^2 ของแต่ละสมการแล้วนำไปเปรียบเทียบกับ R^2 ของสมการเดิม (เต็มรูป) เช่น

$$Y = \beta_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_5 X_5 + u$$

ซึ่งเป็นสมการเต็มรูป สมมุติค่านวนหา Multiple Correlation ได้เท่ากับ R^2 จากสมการเต็มรูปนี้ให้ สับเปลี่ยนเอาตัวแปรอิสระออกจากสมการแล้ววิเคราะห์สมการถดถอยระหว่าง Y กับ X's ที่เหลืออยู่แล้วคำนวณหา R^2 ในกรณีนี้จะพบว่า มี Partial Regression อยู่ 4 ชุดคือ

$$\begin{aligned} Y &= \beta_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + u && \text{ได้ } R^2 : (\text{ตัด } X_5 \text{ ทิ้ง}) \\ Y &= \beta_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_5 X_5 + u && \text{ได้ } R^2 : (\text{ตัด } X_4 \text{ ทิ้ง}) \\ Y &= \beta_1 + \beta_2 X_2 + \beta_4 X_4 + \beta_5 X_5 + u && \text{ได้ } R^2 : (\text{ตัด } X_3 \text{ ทิ้ง}) \\ Y &= \beta_1 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_5 X_5 + u && \text{ได้ } R^2 : (\text{ตัด } X_2 \text{ ทิ้ง}) \end{aligned}$$

การตัดสินใจให้กระทำดังนี้คือ ถ้า R^2 จากสมการเต็มรูปมีค่าใกล้เคียงกับ R^2 จาก Partial Regression แสดงว่าเกิดปัญหา Multicollinearity ที่รุนแรง

ความจริงแล้วแนวคิดของวิธี Partial Regression พัฒนามาจากเทคนิคการหา Best subset ของตัวแปรอิสระนั่นเอง (ขอให้ย้อนไปศึกษาเรื่อง SW, FS, BE ในตอน 4.5.2.2) กล่าวคือ ถ้า Sub-Model ใดให้ค่า R^2 สูงอยู่แล้ว เมื่อเพิ่มตัวแปรอิสระอื่นเข้าไปให้เป็น Full-Model กลับมิได้ ช่วยให้ R^2 ของ Full-Model สูงกว่าที่เป็นอยู่เดิมก็แสดงว่าตัวแปรที่เพิ่มเข้าไปใหม่นั้นเป็นตัวแปรที่ไม่มีประโยชน์ในเชิงสร้างสรรค์แต่ประการใด เพราะอาจเป็นไปได้ที่ตัวแปรที่เพิ่มเข้าสู่สมการดังกล่าวมีธรรมชาติที่คล้ายคลึงกับตัวแปรอิสระตัวใดตัวหนึ่งที่มีอยู่เดิม

สำหรับวิธีนี้ ถ้ามองกันโดยผิวเผินก็อาจจะเห็นว่าเป็นวิธีที่ดี แต่ถ้าจะพิจารณาให้ละเอียดตามย่อหน้าข้างบนนี้จะพบว่า การที่ R^2 ของ Full-Model มิได้สูงขึ้นกว่าที่เคยเป็นอยู่เดิม ใน Sub-Model นั้นมิได้หมายความว่าตัวแปรอิสระตัวใหม่ที่เพิ่มเข้าสู่สมการมีความสัมพันธ์เชิงเส้นกับตัวแปรที่มีอยู่เดิมเสมอไป แต่ตัวแปรตัวใหม่ที่กล่าวถึงนั้นอาจมิใช่ปัจจัยที่มีความหมายหรือความสำคัญในการควบคุมความเคลื่อนไหวของ Y ก็ได้ และถ้าหากว่า R^2 จาก Sub-Model หลายชุดมีค่าใกล้เคียงกับ R^2 ของ Full-Model นักวิจัยจะเริ่มรวนเรและตัดสินใจไม่ได้ วิธีนี้จึงมีจุดอ่อนอยู่มาก

8.4.3 F - test และ t - test

ในการวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = \beta_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_k X_k + u$ นั้นเรามีความจำเป็นต้องตรวจสอบนัยสำคัญอย่างน้อย 2 ระยะ คือ

1. ทดสอบ $H_0: \beta_2 = \beta_3 = \dots = \beta_k = 0$ VS $H_1: \beta_j$ not all equal; $j=2,3,\dots,k$

โดยใช้ตัวสถิติ F คือ $F_c = \frac{\hat{\beta}' X' Y - n\bar{Y}^2}{Y' Y - \hat{\beta}' X' Y}$ เป็นเกณฑ์ในการตัดสินใจ วิธีนี้

เรียกว่า Overall F-test โดยจะมีเจตนาที่จะตรวจคุณภาพกว้าง ๆ ของงานว่าสมการถดถอยมีวิสัยที่อยู่ ในเกณฑ์ที่พอจะยอมรับได้หรือไม่ หรืออีกนัยหนึ่งก็คือตัวแปรอิสระ X's ทั้งหลายที่กำหนดขึ้นนั้น ร่วมกันควบคุมความเคลื่อนไหวของ Y ได้หรือไม่

2. ทดสอบ $H_0: \beta_j = 0$ VS $H_1: \beta_j \neq 0$; $i=1,2,\dots,k$ โดยใช้

ตัวสถิติ $t_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\hat{V}(\hat{\beta}_j)}}$ เป็นเกณฑ์ในการตัดสินใจ การทดสอบวิธีนี้มีเจตนาที่จะวิเคราะห์ในรายละเอียดว่า ตัวแปรอิสระแต่ละตัวมีอิทธิพลต่อ Y แท้จริงหรือไม่ (มีนัยสำคัญหรือไม่) มากน้อยเพียงไร (ระดับนัยสำคัญ α มีค่าเท่าไร)

ในสถานการณ์ทางปฏิบัตินั้น หากพบว่าสมการ $Y = X\beta + U$ ให้ค่า R^2 ก่อนข้าง สูง F มีนัยสำคัญ (คือยอมรับ $H_1: \beta_j$ not all zero) แต่กลับพบว่า t_j ไม่มีนัยสำคัญ (คือยอมรับ $H_0: \beta_j = 0$) บางส่วนหรือทั้งหมด จะถือว่าได้เกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นแล้ว

วิธีนี้แม้จะเป็นที่ยอมรับว่าพอจะใช้ตรวจสอบปัญหา Multicollinearity ได้แต่ในบางครั้งแม้ว่า F จะมีนัยสำคัญขณะที่ t ไม่มีนัยสำคัญก็ได้ยืนยันว่าตัวแปรอิสระจะพึงพิงเชิงเส้นต่อกันเสมอได้ และวิธีนี้ได้ชี้ให้เห็นว่าเกิด Linearly Dependent หรือ Near Dependency ที่จุดใด

8.4.4 Auxilary Regression

แนวคิดของ Auxilary Regression พัฒนามาจากความรู้เรื่อง Linearly Dependent และ Basis ของ Vector Space ดังนี้

“ถ้า $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ เป็น Basis ของ Vector Space \mathcal{V} แล้วเวกเตอร์ v ใด ๆ ใน \mathcal{V} จะเกิดขึ้นจากการประกอบกันเชิงเส้นของเวกเตอร์ใน Basis เสมอ กล่าวคือ $v = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_n v_n$ เมื่อ $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ เป็นสมาชิกของ Field \mathcal{F} และ $\alpha_i; i = 1, 2, \dots, n$ มิใช่ 0 ทั้งหมด” และ “ถ้า \mathcal{S} เป็นอนุเซตของ \mathcal{V} โดยที่สมาชิกของ \mathcal{S} มี Linearly Dependent แล้ว เวกเตอร์ v ย่อมเกิดขึ้นจากการประกอบกันของเวกเตอร์ใน \mathcal{S} ได้”¹

¹ มนตรี พิริยะกุล, คณิตศาสตร์สำหรับนักสถิติ (พีชคณิตเชิงเส้น), (สำนักพิมพ์กราฟิเคอาร์ท, กรุงเทพฯ, 2525), หน้า 204 อ่านเพิ่มเติมบทที่ 4 Vector Space

โดยอาศัยความรู้ดังกล่าวเราจึงสามารถคิดว่าตัวแปรอิสระมีความสัมพันธ์เชิงเส้น (Linearly Dependent) ต่อกันหรือไม่...? มากน้อยเพียงใด...? ด้วยการวิเคราะห์สมการถดถอยระหว่างตัวแปรอิสระ x_j กับตัวแปรอิสระอื่น ๆ คือ $x_j = f(x_2, x_3, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_k)$; $j = 2, 3, \dots, k$ แล้วหาค่าสหสัมพันธ์พหุคูณ $R_{j-2,3 \dots j-1, j+1 \dots k}^2$ (ต่อไปจะใช้เขียนในรูปย่อคือ R_j^2) ถ้า R_j^2 มีค่าสูงแสดงว่าเกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้น เช่น จากความสัมพันธ์เดิมคือ $y = f(x_2, x_3, x_4, x_5)$ ให้นักวิจัยคำนวณหาค่า R_2^2, R_3^2, R_4^2 และ R_5^2 จากสมการ $x_2 = f(x_3, x_4, x_5)$, $x_3 = f(x_2, x_4, x_5)$, $x_4 = f(x_2, x_3, x_5)$ และ $x_5 = f(x_2, x_3, x_4)$ ตามลำดับ หากพบว่า R_2^2 มีค่าสูง แสดงว่า x_2 เกิดจากการประกอบกันเชิงเส้นของเวกเตอร์ x_3, x_4 และ x_5 ถ้า R_5^2 มีค่าสูงแสดงว่า x_5 เกิดจากการประกอบกันเชิงเส้นของเวกเตอร์ x_2, x_3 และ x_4 ดังนี้ เป็นต้น

การตรวจสอบโดยวิธีนี้ชี้ให้เห็นเค้าโครงความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์ได้ใกล้เคียงกับความเป็นจริงมาก แต่ถ้า R_j^2 หลายค่ามีค่าสูงเราจะพบปัญหาเพราะไม่อาจจำแนกได้ว่าความสัมพันธ์รูปใดคือความสัมพันธ์ที่แท้จริงระหว่างตัวแปรอิสระ

8.4.5 Variance Inflation Factor (VIF)

วิธีนี้เกี่ยวเนื่องอยู่กับวิธี 8.4.4 โดยเราจะศึกษาโครงสร้างของแมตริกซ์ $\sigma^2 (X'X)^{-1}$ โดยอาศัยความรู้เกี่ยวกับ R_j^2 กล่าวคือเราสามารถพิสูจน์ได้ว่าสมาชิกใน Main Diagonal ของแมตริกซ์ $(X'X)^{-1}$ คือ $\frac{1}{(1-R_j^2)}$ เมื่อ R_j^2 ; $j = 2, 3, \dots, k$ คือสัมประสิทธิ์ R^2 ในข้อ 8.4.4 นั่นคือ

$$c_{jj} = \frac{1}{(1-R_j^2)} \quad ; \quad j = 2, 3, \dots, k$$

เมื่อ c_{jj} คือสมาชิก ณ ตำแหน่ง (j, j) ของแมตริกซ์ $(X'X)^{-1}$

จาก $c_{jj} = \frac{1}{(1-R_j^2)}$, $j = 2, 3, \dots, k$ จะพบว่าถ้า $R_j^2 \rightarrow 1$ แล้ว c_{jj}

จะมีค่าสูงมีผลให้ $v(\hat{\beta}_j) = \sigma^2 c_{jj}$ มีค่าสูงซึ่งแสดงว่า x_j คือตัวแปรที่เกิดจากการประกอบกันเชิงเส้นของตัวแปรอิสระอื่น ๆ (ขอให้สังเกตว่าวิธี 8.4.4 และ 8.4.5 ให้ผลสรุปเดียวกัน) สิ่งที่เป็นปัญหา

¹ อ่านตอน 4.4.2 ซึ่งกล่าวว่า $\hat{v}(\hat{\beta}_j) = \frac{\hat{\sigma}^2}{\sum x_{ji}^2 (1-R_j^2)}$ แสดงว่า $c_{jj} = \frac{1}{(1-R_j^2)} = \frac{\hat{v}(\hat{\beta}_j) \sum x_{ji}^2}{\hat{\sigma}^2}$

ก็คือ ถ้า c_{jj} หลายค่ามีค่าสูงจะมีปัญหาในการตรวจสอบปัญหา Multicollinearity เช่นเดียวกับกรณี 8.4.4 วิธีนี้พัฒนาโดย D.E. Marquardt และ R.D. Snee ในปี 1970, 1973 และ 1975 โดยทั้ง Marquardt และ Snee ถือว่าวิธีนี้คือวิธีที่ดีที่สุด¹

8.4.6 การวิเคราะห์ค่าดีเทอร์มิแนนท์ของเมทริกซ์ $X'X$

จากการศึกษาในตอน 4.4 เราทราบว่าเมทริกซ์ $X'X$ สำหรับสมการถดถอยต่อไปนี้เป็นคือ

$$y_i = \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{3i} + \dots + \beta_k x_{ki} + u_i - \bar{u} \quad ; i = 1, 2, \dots, n$$

เมื่อ $y_i = Y_i - \bar{Y}$ และ $x_{ji} = X_{ji} - \bar{X}_j$; $i = 1, 2, \dots, n$; $j = 2, 3, \dots, k$

จะสามารถแปลงรูปเป็น Correlation Matrix ได้โดยง่าย และจากสมการแปลงรูปข้างต้น ถ้าแปลงรูปตัวแปรทุกตัวด้วยการถ่วงน้ำหนักด้วย Standard Deviation คือ

$$\frac{y_i}{s_1} = \beta_2 \frac{x_{2i}}{s_2} + \beta_3 \frac{x_{3i}}{s_3} + \dots + \beta_k \frac{x_{ki}}{s_k} + \frac{u_i - \bar{u}}{s_u} \quad ; i = 1, 2, \dots, n$$

จะพบว่าเมทริกซ์ $(X'X)$ คือ Correlation Matrix R_x ที่สมาชิกของเมทริกซ์ดังกล่าวคือสหสัมพันธ์เชิงเส้นระหว่างตัวแปรอิสระ

ดังเหตุผลดังกล่าวการวิเคราะห์ค่าดีเทอร์มิแนนท์ของเมทริกซ์ $(X'X)$ และการวิเคราะห์ค่าดีเทอร์มิแนนท์ของเมทริกซ์ R_x จึงมีผลลัพธ์ตรงกันกล่าวคือ

¹ Judge, G.G. et. al., **Op.Cit.**, p.475 และ Webster, J.T., Gunst, R.F. and Mason, R.L., "Recent Development in Stepwise Regression Procedures" (The Univ. of Kentucky Conference on Regression with a Large Number of Predictor Variables, Lexington, Kentucky, Oct. 11-12, 1973). p.37

$$X'X = \begin{vmatrix} \frac{x_{21}}{s_2} & \frac{x_{22}}{s_2} & \frac{x_{23}}{s_2} & \dots & \frac{x_{2n}}{s_2} \\ \frac{x_{31}}{s_3} & \frac{x_{32}}{s_3} & \frac{x_{33}}{s_3} & \dots & \frac{x_{3n}}{s_3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{x_{k1}}{s_k} & \frac{x_{k2}}{s_k} & \frac{x_{k3}}{s_k} & \dots & \frac{x_{kn}}{s_k} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \frac{x_{21}}{s_2} & \frac{x_{31}}{s_3} & \dots & \frac{x_{k1}}{s_k} \\ \frac{x_{22}}{s_2} & \frac{x_{32}}{s_3} & \dots & \frac{x_{k2}}{s_k} \\ \frac{x_{23}}{s_2} & \frac{x_{33}}{s_3} & \dots & \frac{x_{k3}}{s_k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{x_{2n}}{s_2} & \frac{x_{3n}}{s_3} & \dots & \frac{x_{kn}}{s_k} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} c \frac{x_{21}^2}{s_2^2} & c \frac{x_{21}x_{31}}{s_2s_3} & \dots & \sum \frac{x_{2i}x_{ki}}{s_2s_k} \\ \sum \frac{x_{21}x_{31}}{s_2s_3} & c \frac{x_{31}^2}{s_3^2} & \dots & \sum \frac{x_{3i}x_{ki}}{s_3s_k} \\ \sum \frac{x_{2i}x_{ki}}{s_2s_k} & \sum \frac{x_{3i}x_{ki}}{s_3s_k} & \dots & \sum \frac{x_{ki}^2}{s_k^2} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2k} \\ r_{23} & 1 & r_{34} & \dots & r_{3k} \\ r_{24} & r_{34} & 1 & & r_{4k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{2k} & r_{3k} & r_{4k} & \dots & 1 \end{vmatrix}$$

$$= R_x$$

การวิเคราะห์หาค่าเทอร์มินัลของเมตริกซ์ $X'X$ สามารถกระทำได้ 2 แนวทางดังนี้
แนวทางที่ 1 การวิเคราะห์เฉพาะ $|X'X|$

จากการบรรยายโครงสร้างของเมตริกซ์ $X'X$ เมื่อตัวแปรได้รับการจัดรูปสู่รูปมาตรฐาน (Standardized Variable) จะพบว่า $|X'X|$ มีค่าปรากฏระหว่าง 0 ถึง 1 กล่าวคือ ถ้าตัวแปรอิสระ x_i และ x_j ทุกคู่มี Perfect Correlation สมาชิกของ $X'X$ จะเป็น 1 ทุกตัว มีผลให้ $|X'X| = 0$ ในทางตรงกันข้ามถ้าตัวแปรอิสระ x_i และ x_j ไม่มีความสัมพันธ์กันเลย คือ $r_{ij} = 0$ เมตริกซ์ $X'X$ จะเป็น Identity Matrix ซึ่งมีผลให้ $|X'X| = 1$ ด้วยเหตุนี้หากนักวิจัยตรวจสอบ $|X'X|$ แล้วพบว่า $|X'X|$ เท่ากับ 0 หรือใกล้ 0 แสดงว่าตัวแปรอิสระบางคู่มีความสัมพันธ์เชิงเส้นต่อกัน

วิธีนี้แม้จะพอชี้ให้เห็นปัญหา Multicollinearity ได้แต่ก็ยังมีจุดอ่อนหลายประการดังนี้

(1) $|X'X| \rightarrow 0$ ชี้ให้เห็นว่าได้เกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นแล้วเท่านั้น แต่ไม่ได้ชี้ให้เห็นว่า Multicollinearity เกิดขึ้นเพราะเหตุใด? ตัวแปรอิสระใดบ้างเกิดขึ้นจากการประกอบกันเชิงเส้นของตัวแปรอื่น? มีตัวแปรอิสระใดบ้างทำหน้าที่เสมือน Basis ของ Column Space ของเมตริกซ์ X

(2) โดยอาศัยความรู้เรื่อง Characteristic Vector ในตอน 8.1 เราสามารถพิสูจน์ได้โดยง่ายว่า

$$|X'X| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_k = \prod_i \lambda_i$$

แสดงว่าในกรณีที่ $|X'X| \rightarrow 0$ อาจเนื่องมาจากสาเหตุอื่นคือ Characteristic Root ของ $X'X$ บางตัวมีค่าต่ำ การสรุปว่ามีปัญหา Multicollinearity โดยยึดถือเอาจากสถานการณ์ที่ $|X'X| \rightarrow 0$ จึงยังมีข้อโต้แย้ง

แนวทางที่ 2 Farrar - Glauber Test

ฟาร์รราร์ และ กลอเบอร์ (Farrar, D.E. and Glauber, R.R., 1967)¹ ได้พยายามหาหนทางสร้างเกณฑ์การทดสอบ Multicollinearity โดยการเปรียบเทียบค่า $|X'X|$ กับค่าวิกฤตที่เหมาะสมมิใช่เพียงแต่ตรวจดูว่า $|X'X|$ มีค่าใกล้ 0 หรือใกล้ 1 ดังแนวทางที่ 1 ซึ่งโน้มเอียงไปในเชิงอัตตนิยมมากเกินไป โดยฟาร์รราร์และกลอเบอร์มุ่งตรวจดูว่าเมตริกซ์ X เบี่ยงห่างจากธรรมชาติของ Orthogonality หรือไม่ รุนแรงเพียงใด ตัวแปร (สดมภ์ของเมตริกซ์ X) ใดเกิดจากการประกอบ

¹ Kontsoyiannis, A., Op. Cit., p.234

กันของตัวแปรอื่น และตัวแปรใดบ้างคือปัจจัยที่มีส่วนร่วมในการสร้างปัญหา Multicollinearity (หมายความว่าเวกเตอร์ใดบ้างทำหน้าที่เสมือน Basis ของ Column Space ของ X) เครื่องมือทดสอบปัญหา Multicollinearity ตามวิธีการของฟาร์ราร์และกลอเบอร์จึงประกอบด้วย test ต่าง ๆ ต่อไปนี้ ซึ่งจะต้องทดสอบอย่างต่อเนื่อง

1. χ^2 -test สำหรับตรวจสอบว่ามีปัญหา Multicollinearity หรือไม่ รุนแรงเพียงใด

ปฏิเสธสมมุติฐานหลัก H_0 : ตัวแปร X's เป็นอิสระต่อกัน VS H_1 : ตัวแปร X's สัมพันธ์กัน ณ ระดับนัยสำคัญ α เมื่อ $*\chi^2 > \chi^2_{1-\alpha, v}$

โดยที่

$$*\chi^2 = -[n-1-\frac{1}{6}(2k+5)] \log_e |x'x|$$

เมื่อ n = ขนาดตัวอย่าง, k = จำนวนตัวแปรอิสระ

$|x'x|$ = ค่าดีเทอร์มิแนนท์ของเมทริกซ์ $x'x$ ที่ตัวแปรทุกตัวได้รับการแปลงรูป

เป็น Standardized Variable หรือนัยหนึ่ง $|x'x| = |R_x|$

และ $v = \frac{1}{2} k(k-1)$

ถ้า $*\chi^2 > \chi^2_{1-\alpha, v}$ แสดงว่าตัวแปรอิสระ X's ไม่เป็นอิสระต่อกัน (not Orthogonal) และยิ่ง $*\chi^2$ มีค่าสูงกว่า $\chi^2_{1-\alpha, v}$ มากเพียงใด ปัญหา Multicollinearity จะยิ่งรุนแรงมากเพียงนั้น

เมื่อ $*\chi^2 > \chi^2_{1-\alpha, v}$ ให้ทดสอบขั้นที่ 2 และ 3 ต่อไป

2. F-Test สำหรับตรวจสอบว่าตัวแปรอิสระใดเกิดจากการประกอบกันเชิงเส้นของตัวแปรอิสระอื่น

การตรวจสอบในขั้นนี้เพื่อตรวจดูว่าตัวแปรอิสระตัวใดเกิดขึ้นจากการประกอบกันเชิงเส้นของตัวแปรอื่นหรือไม่โดยตรวจสอบ R_j^2 (หรือ $R_{j-2, 3, \dots, j-1, j+1, \dots, k}^2$) ว่ามีค่าเท่ากับเท่าไร (อ่านตอน 8.4.4) แตกต่างจาก 0 อย่างมีนัยสำคัญหรือไม่¹ สมมุติฐานที่มุ่งทดสอบสำหรับกรณีนี้คือ

¹ ในตอน 8.4.4 เราพิจารณาแต่เพียงว่า R_j^2 มีค่าสูงหรือไม่ ถ้า R_j^2 มีค่าสูงแสดงว่าได้เกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นโดย x_j เกิดขึ้นจากการประกอบกันเชิงเส้นระหว่างตัวแปรอิสระอื่น ๆ ที่เหลืออยู่ แต่วิธีนี้มีลักษณะโน้มเอียงไปในเชิงอัตตนิยม (Subjective Judgement) เพราะไม่มีกฎเกณฑ์ใดบังคับไว้อย่างชัดเจนว่า R_j^2 สูงเพียงใดจึงจะนับว่าเกิดปัญหา Multicollinearity ซึ่งเป็นสาเหตุให้ ฟาร์ราร์ และ กลอเบอร์สร้างเกณฑ์เปรียบเทียบขึ้นใช้สำหรับกรณีดังกล่าว

$$H_0 : R_j^2 = 0 \quad \text{VS} \quad H_1 : R_j^2 \neq 0$$

หรือเขียนให้เต็มรูปได้ดังนี้

$$H_0 : R_{j.23\dots j-1,j+1\dots k}^2 = 0 \quad \text{VS} \quad H_1 : R_{j.23\dots j-1,j+1\dots k}^2 \neq 0$$

โดยเราจะปฏิเสธ H_0 ณ ระดับนัยสำคัญ เมื่อ $F^* > F_{k-1, n-k, 1-\alpha}$ โดยที่

$$F^* = \frac{R_j^2/k-1}{(1-R_j^2)/n-k}$$

3. t - test เพื่อตรวจสอบดูว่าตัวแปรอิสระใดมีส่วนร่วมในการสร้างปัญหา Multicollinearity

การตรวจสอบในขั้นนี้เป็นการตรวจสอบดูว่าตัวแปรอิสระคู่ใดบ้างที่มีความสัมพันธ์กัน โดยการดำเนินการตรวจสอบ จะดำเนินการตรวจสอบสหสัมพันธ์ที่แท้จริงคือ Partial Correlation ระหว่างตัวแปรอิสระ x_i กับ x_j ; $i \neq j = 2, 3, \dots, k$ ทีละคู่ทั้งสิ้น

$\left(\frac{k-1}{2} \right) = \frac{(k-1)(k-2)}{2}$ คู่ Partial Correlation ระหว่างตัวแปรอิสระคู่ใดแตกต่างจาก 0 อย่างมีนัยสำคัญ แสดงว่าตัวแปรอิสระคู่ นั้น ๆ ต้องรับผิดชอบในปัญหา Multicollinearity สมมุติฐานและเกณฑ์การตัดสินใจปรากฏดังนี้

$$H_0 : R_{ij.23\dots k} = 0 \quad \text{VS} \quad H_1 : R_{ij.23\dots k} \neq 0$$

ปฏิเสธสมมุติฐานหลัก ณ ระดับนัยสำคัญ α เมื่อ $|t^*| > t_{n-k, 1-\frac{\alpha}{2}}$ โดยที่

$$t^* = \frac{(R_{ij.23\dots k}) \sqrt{n-k}}{\sqrt{1-R_{ij.23\dots k}^2}}$$

ถ้าปฏิเสธ H_0 แสดงว่า $R_{ij.23\dots k} \neq 0$ หรือ x_i และ x_j มีความสัมพันธ์กันอย่างเด่นชัด หรือ x_i และ x_j มีส่วนรับผิดชอบต่อปัญหา Multicollinearity¹

Farrar - Glauber Test ได้รับความนิยมน้อยกว่าเพราะสามารถระบุ หรือชี้ให้เห็นปัญหา ความรุนแรงของปัญหา ตัวแปรที่เป็นปัญหาและตัวแปรที่ต้องรับผิดชอบต่อปัญหา อย่างไรก็ตาม Farrar - Glauber Test มีจุดอ่อนที่สำคัญที่ทำให้เกิดข้อโต้แย้งได้ดังนี้

(1) ฟาร์รา และกลอเบอร์ถือว่าค่าสังเกต $z_i = (y_i, x_{2i}, x_{3i}, \dots, x_{ki})$; $i = 1, 2, \dots, n$ เป็นอิสระต่อกัน และสุ่มมาจากกลุ่มประชากรปกติ (Multivariate Normal Density) จึงมีผลให้ตัวสถิติ $-\ln |x'x|$ มีการแจกแจงแบบ χ^2 ได้ แต่ในทางปฏิบัติแล้วตัวแปรต่าง ๆ มิได้เป็นอิสระต่อกัน แต่กลับมีความสัมพันธ์กันอยู่บ้างในบางระดับเสมอ ซึ่งในกรณีเช่นนี้ตัวสถิติ $-\ln |x'x|$ จึงมิได้มีการแจกแจงแบบ χ^2 แม้เราจะยอมให้ $z_i \sim N(\mu, V)$ ได้ก็ตาม

(2) H : ตัวแปรอิสระ X 's เป็นอิสระต่อกัน (Orthogonal) หมายถึง X 's ทั้งหมดประชากรคือ X 's ที่พึงเป็นไปได้ทั้งหมดที่ควบคุมความเคลื่อนไหวของ Y หรือถ้ามองที่เมตริกซ์ $x'x$ (ซึ่งก็คือ R_x นั่นเอง) คำว่า Orthogonal หมายถึง R_x เป็น Population Correlation Matrix การสรุปหรืออนุมานสู่ Population Correlation Matrix จากข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างซึ่งมิได้เป็นไปโดยสุ่ม² จึงเป็นเรื่องที่ไม่ถูกต้อง และมีความขัดแย้งกันในระหว่างเหตุผลทางทฤษฎี และวิธีดำเนินการในทางปฏิบัติ

8.5 การแก้ปัญหา Multicollinearity

การแก้ปัญหา Multicollinearity สามารถกระทำได้หลายวิธีดังนี้

¹ อ่านตอน 4.4.2 เรื่องเทคนิคการคำนวณหา $R_{1.23\dots k}^2$, R_j^2 และ R_{ij}^2

² ขอให้ระลึกว่าเรากำหนดตัวแปรอิสระโดยอาศัยกฎเกณฑ์ทางทฤษฎี การคิดคำนึงและความเป็นไปได้ต่าง ๆ มิใช่กำหนดโดยสุ่ม

8.5.1 การเพิ่มข้อมูล

การเพิ่มข้อมูลเป็นวิธีหนึ่งที่สามารถแก้ปัญหา Multicollinearity ได้เพราะข้อมูลที่เพิ่มให้แต่ละตัวแปรอิสระจะมีผลให้ธรรมชาติเดิมของเวกเตอร์เปลี่ยนแปลงไป แต่อย่างไรก็ตาม การเพิ่มข้อมูลให้แก่แต่ละตัวแปรอิสระโดยตรงอาจไม่ช่วยให้สถานการณ์ดีขึ้น ดังนั้นทางออกที่เหมาะสมก็คือการกำหนดเงื่อนไขให้แก่ข้อมูลที่จะเพิ่มเข้ามาใหม่ดังแนวคิดต่อไปนี้

สมมติว่าแบบจำลอง $Y = X\beta + U$ มี Linear Dependency ปรากฏขึ้นระหว่าง Column Vector ของเมทริกซ์ X ($X'X$ ไม่มี Full Rank และมี Zero Characteristic Root)¹ และสมมติว่ามีตัวแปรอิสระเพียงตัวเดียวเท่านั้น ที่เป็น Linear Combination ของเวกเตอร์อื่น ๆ ซึ่งแสดงว่า จะมี Normalized Characteristic Vector เพียงชุดเดียวคือ p ที่มีผลให้ $X'Xp = 0^2$ และทำให้ Linear Combination ของพารามิเตอร์คือ $p'\beta$ เป็นพารามิเตอร์ที่ไม่อาจประมาณค่าได้

แต่เนื่องจาก $X'Xp = 0$ ก็ต่อเมื่อ $Xp = 0$ หรือ Xp เป็น Zero Vector แสดงว่าปัญหา Multicollinearity นี้เกิดขึ้นได้เนื่องมาจากเวกเตอร์ต่าง ๆ ที่ประกอบเป็นเมทริกซ์ X ตั้งฉากกัน (Orthogonal) กับเวกเตอร์ p ด้วยเหตุนี้ถ้าเราสามารถทำให้เวกเตอร์ต่าง ๆ ไม่ตั้งฉากกับเวกเตอร์ p เราก็คงแก้ปัญหา Multicollinearity ได้ ซึ่งจากทางออกนี้แสดงว่าเราควรเพิ่มข้อมูลคือเวกเตอร์ $Z_{n+1}' = (1, X_{2,n+1}, X_{3,n+1}, \dots, X_{k,n+1})$ ในลักษณะที่ $Z_{n+1}' = cp$ เมื่อ c คือตัวคงที่ใด ๆ

และในกรณีทั่วไปคือเมทริกซ์ $X'X$ ไม่ถึงกับเป็น Singular Matrix แต่เป็นเพียง Near Singular หรือ Characteristic Root บางค่ามีค่าต่ำ สมมุติ Characteristic Root ดังกล่าวคือ λ และ Normalized Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ λ คือ p จะพบว่าค่าสังเกตชุดใหม่ที่จะสุ่มเพิ่มเติมก็คือ ค่าสังเกตที่ควรขนานกับเวกเตอร์ p คือ $Z_{n+1}' = cp$ เช่นกัน

กล่าวโดยสรุปแล้ว การเพิ่มข้อมูลอาจช่วยแก้ปัญหา Multicollinearity ได้ และถ้าจะให้แน่ใจว่าจะสามารถแก้ปัญหาและเพิ่มความถูกต้องแม่นยำให้แก่ค่าประมาณของ β ค่าสังเกตที่เพิ่มเติม นั้นจะต้องได้รับการคัดเลือกมาในลักษณะที่เป็นพหุคูณของ Normalized Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ Characteristic Root ที่มีค่าต่ำสุด การกิจของนักวิจัยที่จะแก้ปัญหาโดยวิธีนี้ก็คือ

¹ ถ้าเมทริกซ์ A ใด ๆ มี Zero Root แสดงว่าเมทริกซ์นั้นเป็น Singular Matrix ดังทฤษฎีต่อไปนี้ "Singular Matrix A ใด ๆ จะมี Zero Characteristic Root เสมอ"

² $AY = \lambda Y$ ถ้า $\lambda = 0$ แสดงว่า $AY = 0$

- (1) หา Characteristic Root ของ $X'X$ คือ $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$
- (2) หา Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ λ_i ที่มีค่าต่ำที่สุด แล้ว Normalized ด้วยการหารสมาชิกของ Characteristic Vector ดังกล่าวด้วยความยาวของเวกเตอร์ ได้เวกเตอร์ p^1
- (3) กำหนดค่า c ตามความเหมาะสม
- (4) คูณ c เข้ากับสมาชิกทุกตัวของ p เวกเตอร์ cp คือค่าสังเกตชุดที่ $(n+1)$ ตามต้องการ สำหรับกรณีที่มี Characteristic Root หลายค่ามีค่าต่ำเราสามารถพิสูจน์ได้ในทำนองเดียวกัน และสำหรับปัญหาของการประมาณค่า Linear Combination ของพารามิเตอร์ β คือ $w'\beta$ ซิลวี (Silvey, S.D., 1969)² สามารถพิสูจน์ให้เห็นได้ว่า ถ้าเลือกค่าสังเกต z_{n+1} ให้เป็นพหุคูณของเวกเตอร์ v เมื่อ $v = (I_k + \frac{1}{d^2} X'X)^{-1}w$ โดยที่ d^2 คือความยาวของเวกเตอร์ z_{n+1} แล้วค่าประมาณของ $w'\beta$ จะมีความถูกต้องแม่นยำขึ้น

8.5.2 Ridge Regression

8.5.2.1 หลักการและคุณสมบัติ

Ridge Regression ได้รับการพัฒนาขึ้นมาเพื่อแก้ปัญหา Multicollinearity โดยโฮเอิร์ลและเคนนาร์ด (Hoerl, A.E. and Kennard, R.W., 1970)³ และได้มีผู้อื่นร่วมกันพัฒนาอีกหลายท่าน⁴

หลักการโดยทั่วไปของ Ridge Regression ก็คือเมื่อพบว่า $|X'X| \rightarrow 0$ ซึ่งจะมีผลให้ $(X'X)^{-1}$ มีแนวโน้มที่จะไม่ปรากฏค่า และค่าประมาณของ β คือ $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$ มีค่าสูงผิดความจริง ให้พยายามปรับรูปเมตริกซ์ $X'X$ โดยการผนวกค่าคงที่ใด ๆ เข้ากับสมาชิกใน Main Diagonal ของ $X'X$ ซึ่งจะช่วยให้ Characteristic Root มีค่าสูงขึ้นและหลุดพ้นจากปัญหา Multicollinearity⁵

¹ อ่าน มนตรี พิริยะกุล, คณิตศาสตร์สำหรับนักสถิติ (พีชคณิตเชิงเส้น) หน้า 240-248, 311-321

² Silvey, S.D., "Multicollinearity and Imprecise Estimation," (Jour. of The royal Statistical Society, Series B., 35) p.67-75

³ Hoerl, A.E. and Kennard, R.W., "Ridge Regression : Biased Estimation of Nonorthogonal Problems", (Technometrics, 12) p.55-67, 69-82

⁴ Judge, G.G., et. al. Op. Cit., p.471-486

⁵ อย่างลึ้มว่า $|X'X| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_k$ ถ้า λ บางค่ามีค่าต่ำ $|X'X|$ จะมีค่าใกล้ 0 ถ้าผนวกค่าคงที่ c ใด ๆ ให้แก่สมาชิกใน Main Diagonal ของ $X'X$ ทำให้เมตริกซ์ $X'X$ เปลี่ยนรูปเป็น $(X'X + cI_k)$ สมาชิกในแนว Main diagonal ของ $(X'X + cI_k)$ จะใหญ่กว่าของเดิมใน $X'X$ ซึ่งมีผลให้ Characteristic root ของ $(X'X + cI_k)$ มีค่าสูงขึ้นกว่าเดิม และ $|X'X + cI_k|$ จะมีค่าสูงขึ้น

Ridge Regression นอกจากพัฒนามาเพื่อแก้ปัญหา Multicollinearity แล้ว ยังสามารถ

แก้ไขจุดอ่อนบางประการของ OLS อีกด้วย กล่าวคือ โดยปกติแล้วเวกเตอร์ β คือ $\beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}$

จะมีความยาวคงที่¹ ค่าประมาณที่ดีของเวกเตอร์ β นั้นนอกจากจะประมาณค่าสมาชิกของเวกเตอร์ β ได้แม่นยำ (คือ $\hat{v}(\hat{\beta}_j) \rightarrow 0$) แล้วเวกเตอร์ของค่าประมาณคือ $\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix}$ ควรมีความยาว

โดยถ่วงเฉลี่ย (Expected Length) เท่ากับความยาวของ β

แต่จากการศึกษาความยาวถ่วงเฉลี่ย (Expected Length) ของ OLS-Estimator ของ β คือ $\hat{\beta}$ กลับพบว่า $\hat{\beta}$ มีความยาวถ่วงเฉลี่ยสูงกว่า β กล่าวคือ

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}'\hat{\beta}) &= E[(X'X)^{-1}X'Y]'[(X'X)^{-1}X'Y] \\ &= E[(X'X)^{-1}X'(X\beta+U)]'[(X'X)^{-1}X'(X\beta+U)] \\ &= E[\beta+(X'X)^{-1}X'U]'[\beta+(X'X)^{-1}X'U] \\ &= E[\beta'\beta+\beta'(X'X)^{-1}X'U+U'X(X'X)^{-1}\beta+U'X(X'X)^{-1}(X'X)^{-1}X'U] \\ &= \beta'\beta+0+0+E[U'X(X'X)^{-1}(X'X)^{-1}X'U] \\ &= \beta'\beta+\sigma^2 \text{tr}[X(X'X)^{-1}(X'X)^{-1}X'] \\ &= \beta'\beta+\sigma^2 \text{tr}(X'X)^{-1} \end{aligned}$$

แต่ $P'(X'X)P = D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)$ และ

$[P'(X'X)P]^{-1} = P'(X'X)^{-1}P = D^{-1} = \text{diag}(\frac{1}{\lambda_1}, \frac{1}{\lambda_2}, \dots, \frac{1}{\lambda_k})$ แสดงว่า $(X'X)^{-1}$

Similar กับ D^{-1} (P เป็น Orthogonal Modal Matrix)

ดังนั้น $\text{tr} P'(X'X)^{-1}P = \text{tr}(X'X)^{-1}PP' = \text{tr}(X'X)^{-1}I_k = \text{tr}(X'X)^{-1}$

แต่ $P'(X'X)^{-1}P = D$ แสดงว่า $\text{tr}(X'X)^{-1} = \text{tr} D^{-1} = \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} + \dots + \frac{1}{\lambda_k}$

¹ ในที่นี้หมายถึง Square Length กล่าวคือเรานิยามความยาวของเวกเตอร์ v ได้ดังนี้ ความยาว (Length หรือ Norm) ของเวกเตอร์ $v = \sqrt{v'v} = \sqrt{\sum v_i^2}$ เมื่อ $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ ด้วยเหตุนี้จึงกล่าวถึงเฉพาะ $v'v$ ซึ่งหมายถึงกำลังสองของความยาว (Square Length)

$$\begin{aligned} \text{นั่นคือ } E(\hat{\beta}'\hat{\beta}) &= \beta'\beta + \left(\frac{\sigma^2}{\lambda_1} + \frac{\sigma^2}{\lambda_2} + \dots + \frac{\sigma^2}{\lambda_k}\right) \\ &> \beta'\beta + \frac{\sigma^2}{\lambda_{\min.}} \quad \text{เมื่อ } \lambda_{\min.} \text{ คือค่าต่ำสุดของ } \lambda_i; i = 1, 2, \dots, k \end{aligned}$$

แสดงว่าเวกเตอร์ $\hat{\beta}$ มีความยาวโดยถัวเฉลี่ยสูงกว่าความยาวของเวกเตอร์ β อยู่แล้วเป็นปกติ

หมายเหตุ ในเชิงวิเคราะห์เราพิจารณาเฉพาะ λ_{\min} ก็เพียงพอที่จะทำให้มองเห็นข้อเท็จจริงได้เพราะ λ_{\min} ยังมีค่าต่ำเพียงใด $\hat{\beta}$ ก็จะมีค่าความยาวโดยถัวเฉลี่ยสูงกว่าความยาวของ β มากเพียงนั้น

ด้วยเหตุผล 2 ประการข้างต้นคือ (1) เพื่อแก้ปัญหา Multicollinearity และ (2) เพื่อให้ $\hat{\beta}$ มีความยาวโดยถัวเฉลี่ย (ความยาวคาดหวัง) ใกล้เคียงกับความยาวจริงของ β เราจึงควรแก้ปัญหาดังกล่าวเหล่านี้ด้วยการทำให้ λ_{\min} มีค่าสูงขึ้น ซึ่งกระทำได้ด้วยการเพิ่มขนาดสมาชิกในแนว Main Diagonal ของ $X'X$ ดังที่กล่าวมาแล้ว

ให้ $\hat{\beta}^*(c)$ คือ Ridge Regression Estimator ของ β จากสมการนอร์มอล

$$(X'X + cI_k)\beta = X'Y$$

โดยที่ c เป็นตัวคงที่ใด ๆ ที่ไม่ติดลบ คือ $0 \leq c \leq 1$ ดังนั้น¹

$$\hat{\beta}^*(c) = (X'X + cI_k)^{-1}X'Y$$

จากการศึกษาคุณสมบัติทางทฤษฎีของ $\hat{\beta}^*(c)$ พบว่า $\hat{\beta}^*(c)$ มีคุณสมบัติดังนี้

1. $\hat{\beta}^*(c)$ เป็นเวกเตอร์ที่มีความยาวน้อยกว่าเวกเตอร์อื่น ๆ
2. SS (Residual) จะมีค่าสูงขึ้นตามค่าของ c
3. เวกเตอร์ $\hat{\beta}^*(c)$ มีความยาวน้อยกว่าเวกเตอร์ $\hat{\beta}$ เมื่อ $c \neq 0$ และเมื่อ c มีค่าสูงขึ้นเวกเตอร์ $\hat{\beta}^*(c)$ จะลดความยาวลง และเมื่อ $c \rightarrow \infty$ แล้ว $\hat{\beta}^*(c) \rightarrow \hat{\beta}^*(c) \rightarrow 0$
4. เราสามารถหาค่าของ c ; $c > 0$ ที่มีผลให้ $MSE(\hat{\beta}^*(c)) < MSE(\hat{\beta})$ ได้เสมอ
5. Ridge Estimator $\hat{\beta}^*(c) = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1}\hat{\beta} = Z\hat{\beta}$ เป็น Linear Transformation ของ OLS - Estimator กล่าวคือ

¹ ในกรณี Standardized Variable จะพบว่า $X'X$ ก็คือ Correlation Matrix R_x ซึ่งสมาชิกใน Main Diagonal ของ R_x จะมีค่าระหว่าง 0 ถึง 1 เราจึงปรับค่าเมตริกซ์ $X'X$ ที่มีปัญหาด้วยการผนวกค่าคงที่ c ; $0 \leq c \leq 1$

$$\begin{aligned}
\hat{\beta}^*(c) &= (X'X + cI_k)^{-1} X'Y \\
&= (X'X + cI_k)^{-1} [(X'X)(X'X)^{-1}] X'Y^1 \\
&= (X'X + cI_k)^{-1} (X'X) [(X'X)^{-1} X'Y] \\
&= [(X'X)^{-1} (X'X + cI_k)]^{-1} [(X'X)^{-1} X'Y]^2 \\
&= [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} \hat{\beta}
\end{aligned}$$

หรือกล่าวสั้นอีกนัยหนึ่งก็คือ $\hat{\beta}^*(c)$ สัมพันธ์กับ $\hat{\beta}$ ในลักษณะ $\hat{\beta}^*(c) = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} \hat{\beta}$ และขอให้สังเกตว่าถ้า $c = 0$ จะพบว่า $\hat{\beta}^*(c) = \hat{\beta}$ หรือ OLS เป็นกรณีเฉพาะของ Ridge Regression เมื่อ $c = 0$

6. $\hat{\beta}^*(c) = (X'X + cI_k)^{-1} X'Y = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} \hat{\beta}$ เป็น Biased Estimator ของ β และ Covariance Matrix ของเวกเตอร์ $\hat{\beta}^*(c)$ คือ

$$\text{Cov}(\hat{\beta}^*(c)) = \sigma^2 [X'X + cI_k]^{-1} (X'X) [X'X + cI_k]^{-1}{}^3$$

พิสูจน์ ก. $E(\hat{\beta}^*(c)) = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} E(\hat{\beta})$

แต่ $E(\hat{\beta}) = \beta$ และเมื่อกำหนดให้ $Z = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1}$ จึงพบว่า

$$E(\hat{\beta}^*(c)) = Z\beta \neq \beta$$

แสดงว่า $\hat{\beta}^*(c)$ เป็น Biased Estimator ของ β

$$\begin{aligned}
\text{ข. Cov.}(\hat{\beta}^*(c)) &= E\{[\hat{\beta}^*(c) - E(\hat{\beta}^*(c))] [\hat{\beta}^*(c) - E(\hat{\beta}^*(c))]'\} \\
&= E\{[\hat{\beta}^*(c) - Z\beta] [\hat{\beta}^*(c) - Z\beta]'\} \\
&= E\{[Z\hat{\beta} - Z\beta] [Z\hat{\beta} - Z\beta]'\} \\
&= E\{Z(\hat{\beta} - \beta) [(\hat{\beta} - \beta)]' Z'\}
\end{aligned}$$

¹ $(X'X)^{-1} (X'X) = I_k$

² $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ ในที่นี้ $A = (X'X)^{-1}$ และ $B = (X'X + cI_k)$

³ Marquardt, D.E. and Snee, R.D., "Ridge Regression", (The Univ. of Kentucky Conference on Regression with a Large Number of Predictor Variable, Lexington, Kentucky, Oct. 11-12, 1973), p.76

แต่ $\hat{\beta} - \beta = [\beta + (X'X)^{-1}X'U] - \beta = (X'X)^{-1}X'U$

$$\begin{aligned} \therefore \text{Cov}(\hat{\beta}(c)) &= E[Z(X'X)^{-1}X'UU'X(X'X)^{-1}Z'] \\ &= Z(X'X)^{-1}X'E(UU')X(X'X)^{-1}Z' \\ &= \sigma^2 Z(X'X)^{-1}Z' \end{aligned}$$

แต่ $Z = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1}(X'X)^{-1}(X'X)$

$$\begin{aligned} &= \{(X'X)[I_k + c(X'X)^{-1}]\}^{-1}(X'X) \\ &= [X'X + cI]^{-1}(X'X) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \text{Cov}(\hat{\beta}(c)) &= \sigma^2 Z(X'X)^{-1}Z' \\ &= \sigma^2 [X'X + cI]^{-1}(X'X)(X'X)^{-1}(X'X)[X'X + cI]^{-1} \\ &= \sigma^2 [X'X + cI]^{-1}(X'X)[X'X + cI]^{-1} \end{aligned}$$

7. $\text{MSE}(\hat{\beta}(c)) = \text{tr. Cov}(\hat{\beta}(c)) + \beta'[Z - I_k]'[Z - I_k]\beta$

$$\begin{aligned} &= \text{Variance} + (\text{Bias})^2 \\ &= \sigma^2 \sum_i^k \frac{\lambda_i}{(\lambda_i + c_i)} + c^2 \beta'[X'X + cI]^{-2} \beta \end{aligned}$$

พิสูจน์ $\text{MSE}(\hat{\beta}(c)) = E\{(\hat{\beta}(c) - \beta)'(\hat{\beta}(c) - \beta)\}^2$

แต่ $\hat{\beta}(c) = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1}\hat{\beta} = Z\hat{\beta}$

$$\therefore \text{MSE}(\hat{\beta}(c)) = E[Z\hat{\beta} - \beta]'[Z\hat{\beta} - \beta]$$

พิจารณา $Z\hat{\beta} - \beta$ จะพบว่า

¹ อ่าน Hoerl, A.E. and Kennard, R.W., Op. Cit., p.60

² จากข้อ 6 เราทราบว่า $\hat{\beta}(c)$ เป็น Biased Estimator ดังนั้นดัชนีที่ใช้วัด Dispersion จึงต้องใช้ MSE แทน Variance โดยปกติ MSE จะเป็น Scalar และต้องวัดในรูปของ Deviation from true parameter มิใช่ Deviation from expected Value ของ estimator ขอให้เปรียบเทียบกับข้อ 6

$$\begin{aligned} z\hat{\beta} - \beta &= z\hat{\beta} - z\beta + z\beta - \beta && \text{บวกเข้าลบออกด้วย } z\beta \\ &= z(\hat{\beta} - \beta) + (z - I_k)\beta \end{aligned}$$

$$[z\hat{\beta} - \beta]' = (\hat{\beta} - \beta)'z' + \beta'(z - I_k)'$$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } \text{MSE}(\hat{\beta}(c)) &= E[(\hat{\beta} - \beta)'z' + \beta'(z - I_k)'] [z(\hat{\beta} - \beta) + (z - I_k)\beta] \\ &= E[(\hat{\beta} - \beta)'z'z(\hat{\beta} - \beta) + (\hat{\beta} - \beta)'z'(z - I_k)\beta + \beta'(z - I_k)'z(\hat{\beta} - \beta) \\ &\quad + \beta'(z - I_k)'(z - I_k)\beta] \end{aligned}$$

$$\text{แต่เนื่องจาก } E(\hat{\beta} - \beta) = 0 \text{ หรือ } E(\hat{\beta}) = \beta$$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } \text{MSE}(\hat{\beta}(c)) &= E[(\hat{\beta} - \beta)'z'z(\hat{\beta} - \beta)] + \beta'(z - I_k)'(z - I_k)\beta \\ &= a + b \end{aligned}$$

$$\text{พิจารณา } a = E[(\hat{\beta} - \beta)'z'z(\hat{\beta} - \beta)] \text{ จะพบว่า } \hat{\beta} - \beta = (X'X)^{-1}X'U - \beta$$

$$\begin{aligned} a &= E[(\hat{\beta} - \beta)'z'z(\hat{\beta} - \beta)] = E[U'X(X'X)^{-1}z'z(X'X)^{-1}X'U] \\ &= E[U'\{X(X'X)^{-1}z'z(X'X)^{-1}X'\}U] \\ &= \sigma^2 \text{tr}\{X(X'X)^{-1}z'z(X'X)^{-1}X'\} \\ &= \sigma^2 \text{tr}\{(X'X)^{-1}z'z\}^1 \end{aligned}$$

แต่ $Z = [I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1}$ เป็น Symmetric Matrix ขนาด $k \times k$ คือ $Z' = Z$

$$\begin{aligned} (X'X)^{-1}z'z &= (X'X)^{-1}ZZ = (X'X)^{-1}[I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1}[I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} \\ &= \{[I_k + c(X'X)^{-1}](X'X)\}^{-1}[I_k + c(X'X)^{-1}]^{-1} \\ &= (X'X + cI)^{-1}[(X'X)(X'X)^{-1}\{I_k + c(X'X)^{-1}\}^{-1}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &^1 \text{tr}(ABCDE) = \text{tr}(BCDEA) \text{ ดังนั้น } \text{tr}\{X(X'X)^{-1}z'z(X'X)^{-1}X'\} \\ &= \text{tr}\{(X'X)^{-1}z'z(X'X)^{-1}X'X\} = \text{tr}\{(X'X)^{-1}z'z\} \end{aligned}$$

$$= (X'X+cI)^{-1} (X'X) [(I_k+c(X'X)^{-1}) (X'X)]^{-1}$$

$$= (X'X+cI)^{-1} (X'X) (X'X+cI)^{-1}$$

นั่นคือ $a = \sigma^2 \text{tr}[(X'X+cI)^{-1} (X'X) (X'X+cI)^{-1}]$

$$\text{MSE}(\hat{\beta}^*(c)) = \sigma^2 \text{tr}[(X'X+cI)^{-1} (X'X) (X'X+cI)^{-1}] + \beta'(Z-I_k)'(Z-I_k)\beta$$

$$= \text{tr Cov}(\hat{\beta}^*(c)) + \beta'(Z-I_k)'(Z-I_k)\beta$$

$$= \text{tr Cov}(\hat{\beta}^*(c)) + (\text{Bias})^2$$

และโดยอาศัยเทคนิคในทางพีชคณิตเชิงเส้นและความรู้เรื่อง Characteristic Value เราสามารถพิสูจน์ได้ว่า

$$\text{MSE}(\hat{\beta}^*(c)) = \sigma^2 \sum_i^n \frac{\lambda_i}{(\lambda_i+c_i)^2} + c^2 \beta'(X'X+I_k)^{-2} \beta$$

ข้อสังเกต จาก $\text{MSE}(\hat{\beta}^*(c))$ จะพบว่า Variance Term จะมีค่าลดลงขณะที่ c มีค่าสูงขึ้น แต่ Bias Term จะมีค่าสูงขึ้นเมื่อ c มีค่าสูงขึ้น

$$8. \text{SS (Residual)} = [Y-X\hat{\beta}^*(c)]'[Y-\hat{\beta}^*(c)] = Y'Y - \hat{\beta}'^*(c)' X'Y - k\hat{\beta}'^*(c)' \hat{\beta}^*(c)$$

พิสูจน์

$$\text{SSE} = [Y-X\hat{\beta}^*(c)]'[Y-X\hat{\beta}^*(c)]$$

$$= Y'Y - Y'X\hat{\beta}^*(c) - \hat{\beta}^*(c)' X'Y + \hat{\beta}^*(c)' X'X\hat{\beta}^*(c)$$

$$= Y'Y - \hat{\beta}^*(c)' X'Y - [Y'X\hat{\beta}^*(c) - \hat{\beta}^*(c)' X'X\hat{\beta}^*(c)]$$

$$= Y'Y - \hat{\beta}^*(c)' X'Y - [Y'X - \hat{\beta}^*(c)' X'X] \hat{\beta}^*(c)$$

$$= Y'Y - \hat{\beta}^*(c)' X'Y - [X'Y - X'X\hat{\beta}^*(c)]' \hat{\beta}^*(c)$$

แต่ $(X'X+kI)\hat{\beta}^*(c) = X'Y$ คือ Normal Equation ของ Ridge Regression

$$\text{ดังนั้น SSE} = Y'Y - \hat{\beta}^*(c)' X'Y - [(X'X+cI)\hat{\beta}^*(c) - X'X\hat{\beta}^*(c)]' \hat{\beta}^*(c)$$

$$= Y'Y - \hat{\beta}^*(c)' X'Y - c\hat{\beta}^*(c)' \hat{\beta}^*(c)$$

ข้อสังเกต ถ้า $c = 0$ จะมีผลให้ $\hat{\beta}^*(c) = \hat{\beta}$ และ $\text{SSE} = Y'Y - \hat{\beta}' X'Y$

8.5.2.2 การประมาณค่า c

จากตอนที่ 8.5.2.1 เราได้ศึกษาพบว่าถ้าเกิดปัญหา Multicollinearity ขึ้นแล้ววิธีแก้ปัญหานี้ก็คือให้นำตัวคองที่ c ใด ๆ ไปผนวกกับสมาชิกใน Main Diagonal ของ $X'X$ เพื่อจะได้ทำให้ λ_{\min} มีค่าสูงขึ้น ปัญหาก็คือค่าที่เหมาะสมของ c คืออะไร หรือ $c = ?$

การประมาณค่า c สามารถกระทำได้หลายวิธีทั้งโดยวิธี Ridge Trace วิธี Iterate ตลอดจนวิธีของเบย์ส ในที่นี้จะเสนอวิธีต่าง ๆ ไว้ 3 วิธีพอเป็นแนวทางดังนี้

วิธีที่ 1 Ridge Trace

วิธีนี้เสนอโดยโฮเอิร์ล และเคนนาร์ด (Hoerl, A.E. and Kennard, R.W., 1970)¹ หลักการโดยสรุปก็คือ

(1) จาก $\hat{\beta}(c) = (X'X+cI)^{-1}X'Y$ ให้แปรค่าของ c จาก 0 ไปถึง 1 โดยที่การแปรค่าครั้งหนึ่งให้คำนวณหา $\hat{\beta}(c)$ ครั้งหนึ่ง และหาค่า $SSE = Y'Y - \hat{\beta}(c)'X'Y - k\hat{\beta}(c)'\hat{\beta}(c)$ ครั้งหนึ่ง ซึ่งจะมีผลให้ $\hat{\beta}_j^*$; $j = 1, 2, \dots, k$ และ SSE มีค่าผันแปรไปตามค่าของตัวคองที่ c

(2) นำค่าของ $\hat{\beta}_j^*$; $j = 1, 2, \dots, k$ และ SSE ไปพล็อตในกระดาษกราฟ โดยให้แกนตั้ง คือค่าของ $\hat{\beta}_j^*$ และ SSE ส่วนแกนนอนคือแกนของค่าคองที่ c จะได้โค้ง (Trace) ทั้งสิ้น k โค้ง ($\hat{\beta}_j^*$ หนึ่งตัวต่อ 1 โค้ง) และอีกโค้งหนึ่งคือโค้งของ SSE

(3) วิเคราะห์จากกลุ่มของ Trace เพื่อวินิจฉัยเลือกค่า c ที่เหมาะสมดังนี้

- ก. เลือกค่า c จากแนวของ Trace ที่ไม่เปลี่ยนแปลงมากนัก (System Stabilization)²
- ข. เลือก c จากโค้งของ SSE ที่มีค่าต่ำ
- ค. เลือก c จากเฉพาะกลุ่มของ Trace ที่ไม่มีเครื่องหมาย (+ หรือ -) สลับไปสับมา กล่าวคือ Trace ของ $\hat{\beta}_j^*$ จะต้องอยู่เหนือแกน หรือใต้แกนเสมอ ถ้าเคยอยู่เหนือแกนแล้วกลับไปอยู่ใต้แกนแสดงว่า $\hat{\beta}_j^*$ มีเครื่องหมายเปลี่ยนแปลงไปตามค่า c ที่สูงขึ้น ซึ่งไม่ใช่สิ่งที่เราต้องการ

¹ Hoerl, A.E. and Kennard, R.W., *Ibid.*, p.58 และ Hoerl, A.E. and Kennard, R.W., "Ridge Regression : Application to Nonorthogonal Problems", (Technometrics, 12, Feb., 1970), p.69-82 ซึ่งเสนอเฉพาะ Ridge Trace.

² โฮเอิร์ลและเคนนาร์ดแนะนำว่า เราใช้ ข้อ ก. นี้เพียงประการเดียวก็เพียงพอ

ให้ตัด $\hat{\beta}_j^*$ ทิ้งไปแล้วหา Ridge Trace ใหม่¹

หมายเหตุ นักวิจัยควรเลือกค่า c โดยใช้เกณฑ์ทั้ง 3 ข้อ (ก, ข, ค) ผสมกันไม่ควรใช้ข้อใดข้อหนึ่ง

ตัวอย่างเช่น ข้อมูลจาก กอร์แมน และโทแมน (Gorman and Toman) ซึ่งประกอบด้วยตัวแปรอิสระ 10 ตัว ปรากฏ Correlation Matrix และ $\lambda_i; i=1,2,\dots,10$ ดังนี้²

X_1	1										
X_2	-0.04	1									
X_3	0.51	-0.00	1								
X_4	0.12	-0.16	0.00	1							
X_5	-0.71	0.06	-0.59	-0.07	1						
X_6	-0.87	0.09	-0.65	-0.09	0.84	1					
X_7	-0.09	0.24	-0.02	0.03	0.38	0.13	1				
X_8	-0.00	0.01	0.34	0.08	-0.36	-0.20	-0.48	1			
X_9	-0.09	0.09	-0.08	0.02	-0.14	0.40	0.07	-0.18	1		
X_{10}	-0.36	-0.30	-0.44	-0.09	0.54	0.45	0.40	-0.46	0.05	1	
Y	-0.81	-0.10	-0.63	-0.10	0.56	0.81	0.04	0.06	0.46	0.45	1
	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9	X_{10}	Y

$$\lambda_1 = 3.692$$

$$\lambda_6 = 0.659$$

$$\lambda_2 = 1.542$$

$$\lambda_7 = 0.357$$

$$\lambda_3 = 1.293$$

$$\lambda_8 = 0.220$$

$$\lambda_4 = 1.046$$

$$\lambda_9 = 0.152$$

$$\lambda_5 = 0.972$$

$$\lambda_{10} = 0.068$$

¹ โฮเอิร์ลและเคนนาร์ดแนะนำให้คง X_j ไว้ตามเดิม ถ้าต้องการขจัดทิ้งให้กระทำโดยแทนค่า X_{ji} ด้วย \bar{x}_j ซึ่งจะให้ผลให้ $\hat{\beta}_j = 0$ โดยมีได้ทำให้ต้องเปลี่ยนแปลงขนาดของเมตริกซ์ ($X'X+cI$) แต่ประการใด

² อ่านรายละเอียดใน Hoerl, A.E. and Kennard, R.W. *Ibid.*, p.70-75

จะเห็นว่า $\lambda_{\min} = 0.068 \neq 0$

ผลการทดลองคำนวณหาค่า $\hat{\beta}^*(c)$ และ SSE เมื่อแปรค่า c จาก 0 ถึง 1 ปรากฏ Trace ของ $\hat{\beta}_j^*$ ดังภาพ

จากภาพเราใช้แกนตั้งด้านซ้ายมือคือค่าของ $\hat{\beta}_j^*$; $j = 1, 2, \dots, 10$ แกนตั้งด้านขวามือคือแกนของ SSE แกนนอนคือแกนของค่าคงที่ c (สัญลักษณ์ที่ใช้เดิมใน Literature คือ k ผู้เขียนใช้อักษร c แทนเพราะเกรงว่านักศึกษาจะนำไปสับสนกับอักษร k ที่เคยใช้แสดงรหัสของตัวแปร) โดยที่ c มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 1 และ ณ. $c = 0$ ค่าของ $\hat{\beta}_j^*$ ในแกนตั้ง (ซ้าย) ก็คือ $\hat{\beta}_j$ (OLS - Estimator ของ β_j)

จากภาพจะเห็นว่า เมื่อ $c = 0$ ขนาด (absolute magnitude) ของ $\hat{\beta}_j^*$ (ซึ่งก็คือ $\hat{\beta}_j$ นั่นเอง) มีค่าสูงมาก และเมื่อ c มีค่าสูงขึ้นขนาดของ $\hat{\beta}_j^*$ จะลดลงอย่างรวดเร็ว และเมื่อ c มีค่าระหว่าง 0.2 ถึง 0.3 ขนาดของ $\hat{\beta}_j^*$ จะค่อย ๆ ทรงตัว หรือมีอัตราการเปลี่ยนแปลงช้าลงซึ่งเมื่อ c มีค่าสูงขึ้น Trace ของ $\hat{\beta}_j^*$ ก็มีได้เปลี่ยนไปมากนั้ ขณะเดียวกันเมื่อพิจารณาโค้งของ SSE ซึ่งแสดงด้วยเส้นประ จะเห็นว่า SSE ค่อย ๆ มีค่าสูงขึ้นเมื่อ c มีค่าสูงขึ้น และ ณ จุดที่ $0.2 < c < 0.3$ จะพบว่า SSE มีได้มีค่าสูงเกินไป

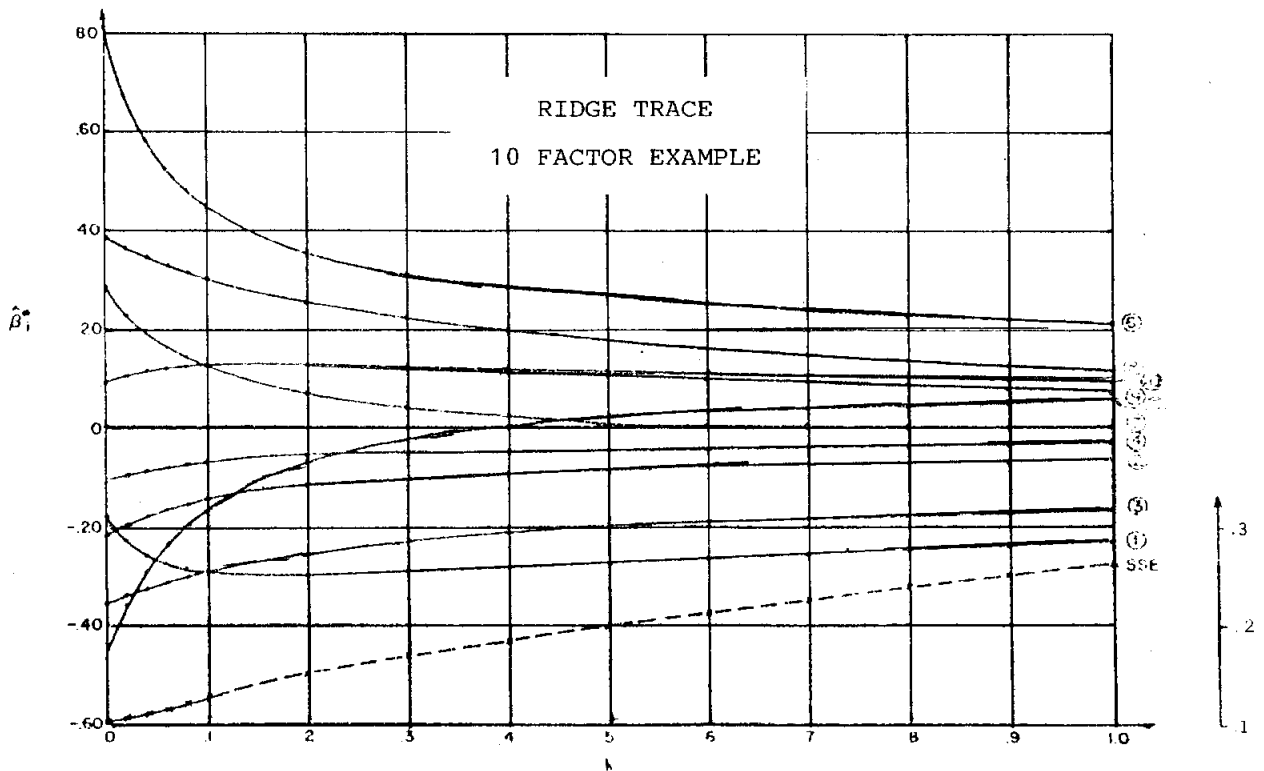
ด้วยเหตุผลดังกล่าว เมื่อกำหนดให้ $c = 0.25$ จะทำให้ $\hat{\beta}_j^*$ มีค่าคงที่ (System Stabilization) เราจึงใช้ $c = 0.25$

นอกจากนี้หากพิจารณา Trace ของ $\hat{\beta}_5^*$ และ $\hat{\beta}_7^*$ จะพบว่า $\hat{\beta}_5^*$ มีค่าเปลี่ยนจากลบเป็นบวก เมื่อ c มีค่าสูงขึ้น ขณะที่ $\hat{\beta}_7^*$ มีค่าลดลงสู่ 0 เมื่อ c มีค่าสูงขึ้น แสดงว่า x_5 และ x_7 มีอิทธิพลไม่แน่นอนสมควรขจัดทิ้ง และเมื่อทดลองตัด x_5 และ x_7 ทิ้งพบว่าเวกเตอร์ $\hat{\beta}^*(c)$ มีความยาวลดลง ทั้งยังมีธรรมชาติคล้ายความยาวของ Orthogonal Coefficient Vector แต่เรื่องนี้ โฮเออร์ล และเคนนาร์ด แนะนำว่า เราไม่จำเป็นต้องตัดตัวแปรใดออก ตัวแปรใดที่ปรารถนาจะคัดออกสามารถกระทำได้โดยไม่ต้องลดขนาดของเมตริกซ์ $(X'X + cI)$ คือ แทนที่ x_{j1} ด้วย \bar{x}_j ซึ่งจะมีผลเสมือนการกำหนดให้ $\beta_j = 0$

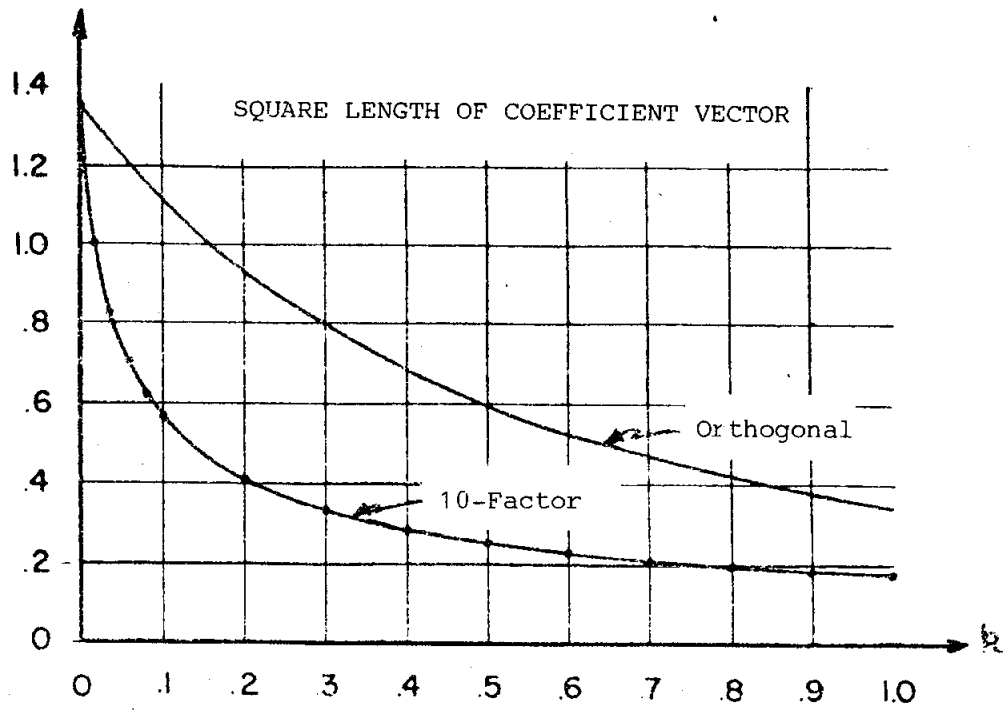
จาก Ridge Trace เมื่อกำหนดให้ $c = 0.025$ จะพบว่า

$\hat{\beta}_1^*$	=	-0.295	$\hat{\beta}_6^*$	=	0.325
$\hat{\beta}_2^*$	=	-0.110	$\hat{\beta}_7^*$	=	0.050
$\hat{\beta}_3^*$	=	-0.245	$\hat{\beta}_8^*$	=	0.240
$\hat{\beta}_4^*$	=	-0.050	$\hat{\beta}_9^*$	=	0.125
$\hat{\beta}_5^*$	=	-0.040	$\hat{\beta}_{10}^*$	=	0.125

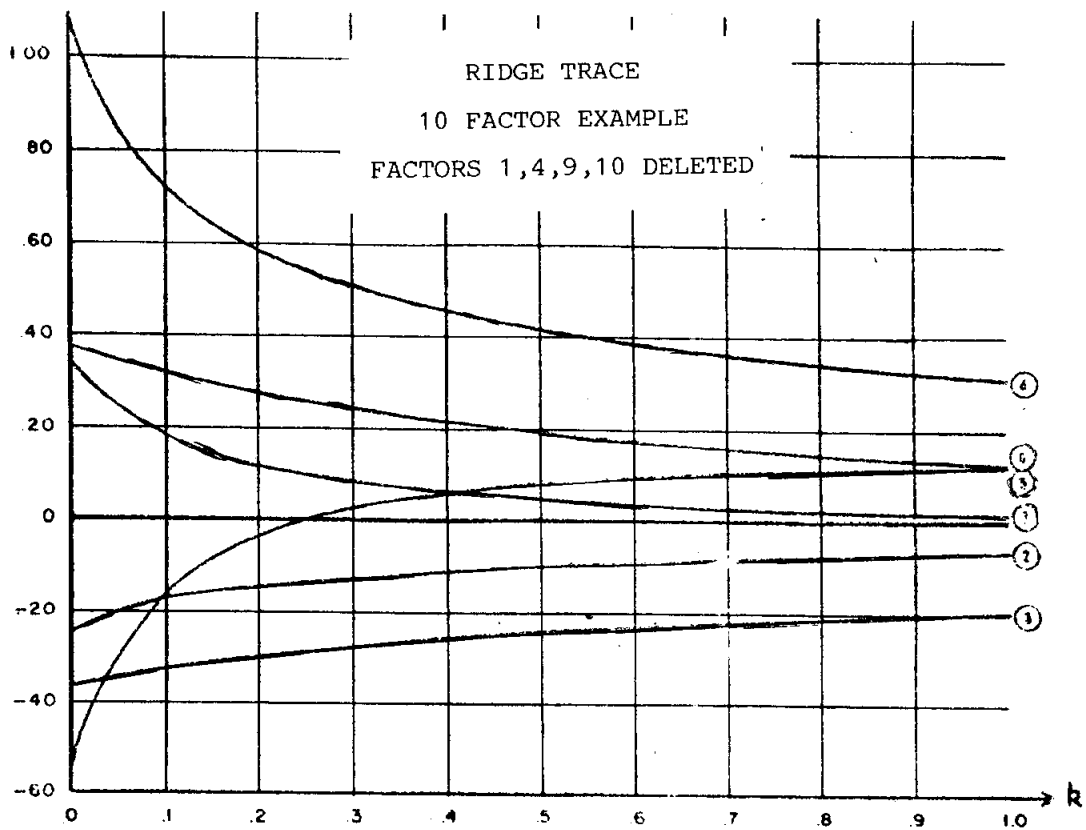
SSE = 0.16

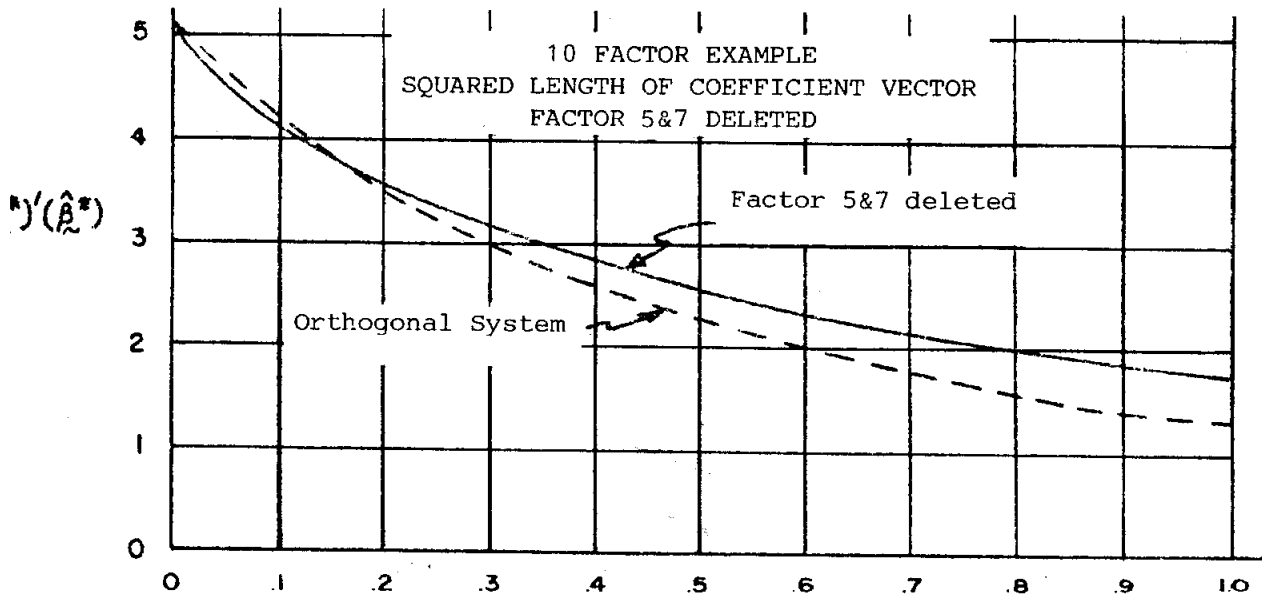


$(\hat{\beta}^*)'(\hat{\beta}^*)$



$\hat{\beta}_i^*(k)$





วิธีที่ 2 Hoerl - Kennard - Baldwin estimator¹

$$c_{HKB} = \frac{k\hat{\sigma}^2}{\hat{\beta}'\hat{\beta}}$$

โดยที่ k = จำนวนตัวแปรอิสระ, $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$ คือ OLS - Estimator ของ β และ

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-k}(Y'Y - \hat{\beta}'X'Y)$$

จากการศึกษาพบว่าวิธีนี้จะมีคุณภาพสูง (เป็น Minimax Estimator) ถ้าหาก

$k > 3$ และ $\lambda_{\min} < \frac{(4+k)\lambda_{\max}}{2k}$ และพบว่าถ้า $k < 2$ จะไม่ดีไปกว่า OLS เลย

วิธีที่ 3 McDonald - Galarneau Estimator²

แมคโดนัลด์ และ กาลาร์นู พิจารณาจากข้อเท็จจริงที่ว่า OLS - Estimator คือเวกเตอร์ $\hat{\beta}$ นั้น โดยปกติจะมีความยาวสูงกว่าความยาวของเวกเตอร์จริงคือ β อยู่ทั้งสิ้น $\sigma^2 \text{tr}(X'X)^{-1}$ กล่าวคือ

¹ Judge, G.G. et. al., Op. Cit., p.475-6

² Ibid., p.277

$$E(\hat{\beta} \hat{\beta}') = \beta \beta' + \sigma^2 \text{tr}(X'X)^{-1}$$

หรือ

$$E[\hat{\beta} \hat{\beta}' - \sigma^2 \text{tr}(X'X)^{-1}] = \beta \beta'$$

ด้วยเหตุนี้ถ้าเราจะใช้ Ridge Regression เราควรเลือกตัวคงที่ c ที่มีผลให้เวกเตอร์ $\hat{\beta}^*(c)$ มีความยาวเท่ากับความยาวจริง (โดยประมาณ) นั่นก็คือควรเลือกค่า c โดยวิธี Search จากสมการ

$$\hat{\beta}^*(c) \hat{\beta}^*(c)' = \hat{\beta} \hat{\beta}' - \hat{\sigma}^2 \text{tr}(X'X)^{-1}$$

เมื่อ
$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-k} (Y'Y - \hat{\beta}'X'Y)$$

ยังมีวิธีประมาณค่า c อีกมากมายหลายวิธี ผู้สนใจสามารถติดตามศึกษาได้จาก เอกสารอ้างอิง และวารสารทางวิชาการโดยเฉพาะอย่างยิ่งคือ Technometrics, JASA และอื่น ๆ

8.5.3 Principal Component Regression (PCR)

PCR เป็นกรณีเฉพาะที่สำคัญของ Factor Analysis หลักการโดยสรุปของ PCR ก็คือ พยายามสร้างตัวแปรอิสระตัวใหม่ คือ Z 's ที่เกิดจาก Linear Combination ของตัวแปรอิสระ X 's ขึ้นมาในลักษณะที่ตัวแปร Z 's เหล่านี้เป็นอิสระเชิงเส้นต่อกัน (เราไม่เรียกว่า Independent แต่เรียกว่า Artificial Independent) ซึ่งตัวแปร z_j แต่ละตัวจะดึงเอาคุณลักษณะร่วมต่าง ๆ จาก X 's มาไว้ในตัวของมันโดย z_1 จะดึงเอาคุณลักษณะต่าง ๆ ของ X 's ไว้มากที่สุดตก (Residual) ที่เหลือจะถูก z_2 ดึงเอาไว้ กากที่เหลือจากที่ z_2 ดึงไปแล้วจะถูก z_3 ดึงเอาไว้ ดังนี้เรื่อยไป ซึ่งก็คงพอมองเห็นได้ว่าจำนวนตัวแปร Z อาจมีจำนวนได้มากที่สุดเท่ากับจำนวนตัวแปร X 's แต่โดยทั่วไปแล้วจำนวนตัวแปร Z มักน้อยกว่าจำนวนตัวแปร X ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับธรรมชาติของ Z ว่าดูดซับเอาคุณลักษณะร่วมของ X 's ไว้ในตัวได้รวดเร็วเพียงใด จากนั้นจึงใช้ Z 's เป็นตัวแปรอิสระสำหรับวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = f(Z)$ ปัญหา Multicollinearity ย่อมไม่ปรากฏในสมการ $Y = f(Z)$ เพราะ Z 's ถูกสร้างให้เป็นตัวแปรที่อิสระต่อกันอยู่แล้ว ปัญหาที่ปรากฏพบก็คือเราไม่ทราบว่ z_j แต่ละตัวหมายถึงอะไร เพราะ z_j เป็น Linear Combination ของ X 's ทำให้ประสบปัญหาในการอภิปรายผล

8.5.3.1 หลักเกณฑ์และการพัฒนา

การพัฒนา PCR นั้นกระทำได้ 2 แนวคือ แนวที่อาศัย Characteristic Value แนวหนึ่ง และแนวที่อาศัย Correlation Matrix อีกแนวหนึ่ง นักศึกษาเลือกใช้วิธีใดก็ได้ เพราะให้ผลเสมอกัน จะต่างกันที่ความยากง่ายของการพัฒนา ซึ่งหากนักศึกษามีพื้นฐานความรู้เรื่องพีชคณิตเชิงเส้นดีพอ แนวทางทั้งสองล้วนเป็นเรื่องง่ายไม่ยากแก่การติดตาม ในที่นี้จะกล่าวถึงเฉพาะแนวที่อาศัย Characteristic Value เท่านั้น ส่วนแนวที่อาศัย Correlation Matrix ซึ่งความจริงก็คือกรณีที่พัฒนาต่อจากเดิมไปอีกเพียงเล็กน้อยนั้น นักศึกษาสามารถศึกษาได้จาก Koutsoyiannis, A., *Op. Cit.*, p.414-20 และ Johnston, J., *Op. Cit.*, p.325-6 และเพื่อให้แนวทางทั้งสองกลายเป็นแนวทางเดียวกัน (แต่ต่างกันเล็กน้อยในวิธีปฏิบัติ) เราจะพัฒนา PCR จากกรณีในตัวแปร X's และ Y ได้รับการแปลงรูปให้เป็น Standardized Variable ซึ่งในกรณีเช่นนี้เมตริกซ์ $X^T X$ ก็คือ Correlation Matrix R_X นั่นเอง

$$\text{จากสมการ } \frac{y}{s_1} = \beta_2 \frac{x_2}{s_2} + \beta_3 \frac{x_3}{s_3} + \dots + \beta_k \frac{x_k}{s_k} + \frac{u-\bar{u}}{s_u} \text{ หรือเสนอในรูป}$$

เมตริกซ์ได้เป็น $y = X\beta + u$ โดยที่ X เป็นเมตริกซ์ขนาด $n \times (k-1)$ β เป็นเวกเตอร์ขนาด $(k-1) \times 1$

สมมุติว่าเราตรวจพบว่ามีปัญหา Multicollinearity ปรากฏขึ้น การพัฒนา PCR จะเริ่มจากการแปลงรูปสมการ $y = X\beta + u$ ดังนี้

ให้ P คือ Orthogonal Modal Matrix ที่แต่ละสดมภ์ของ P คือ Normalized Characteristic Vector p_2, p_3, \dots, p_k ขนาด $(k-1) \times 1$ ที่สอดคล้องกับ Characteristic Value $\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_k$ ของเมตริกซ์ $X^T X$ กล่าวคือ

$$P = (p_2, p_3, \dots, p_k) \quad \text{โดยที่ } p_i^T p_j = \begin{cases} 1 & \text{ถ้า } i = j \\ 0 & \text{ถ้า } i \neq j \end{cases} \quad \text{หรือ } P^T P = P P^T = I$$

¹ ผู้เขียนใช้สมการ $y_i = \beta_1 + \beta_2 X_{2i} + \beta_3 X_{3i} + \dots + \beta_k X_{ki} + u_i$ ตามแบบเดิมที่เคยเสนอไว้ในบทที่ 3 ดังนั้นเมื่อ Standardize จึงมีผลให้สมการถดถอยไม่มีเทอมคงที่ β_1 ปรากฏอยู่ เมตริกซ์ X ซึ่งมีขนาด $n \times (k-1)$ แต่ตาม Literature นิยมใช้สมการรูปต่อไปนี้เป็นคือ $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{2i} + \dots + \beta_{k-1} X_{ki} + u_i$ ซึ่งภายหลังจาก Standardize เมตริกซ์ X จะมีขนาด $n \times k$ อย่างไรก็ตามผลลัพธ์จากสมการ 2 รูปนี้จะตรงกันเสมอเพียงแต่ต้องระมัดระวังเรื่องค่าของ k อยู่บ้าง กล่าวคือตามรูปของผู้เขียน k หมายถึงจำนวนพารามิเตอร์ β_{k-1} หมายถึงจำนวน Regression Coefficient คือ $\beta_2, \beta_3, \dots, \beta_k$ และจำนวน Regressor คือ X_2, X_3, \dots, X_k ขณะที่รูปที่ใช้ใน Literature k หมายถึงจำนวน Regression Coefficient และ Regressor คือ $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ และ X_1, X_2, \dots, X_k

นำเมตริกซ์ P ไปแปลงรูปสมการ $Y = X\beta + U$ โดยอาศัยความจริงว่า $I = PP'$ จะ

พบว่า

$$\begin{aligned} Y &= X(PP')\beta + U \\ &= (XP)(P'\beta) + U \\ &= (XP)\theta + U && : \text{ให้ } P'\beta = \theta \\ &= Z\theta + U && : \text{ให้ } XP = Z \text{ เรียกว่า Principal Component Matrix} \end{aligned}$$

การประมาณค่าพารามิเตอร์ θ จากสมการ $Y = Z\theta + U$ สามารถกระทำได้โดยอาศัย OLS ตามปกติคือ $\hat{\theta} = (Z'Z)^{-1}Z'Y$ แต่เนื่องจาก $\theta = P'\beta$ ค่าประมาณของ θ จึงเป็น Linear Function ของ β ดังนั้นเพื่อให้ได้ค่าประมาณของ β เราจึงต้องปรับรูปคืนสู่ β ตามเดิมคือ

$$\begin{aligned} \text{จาก } \hat{\theta} &= P'\beta \text{ โดยที่ } P \text{ เป็น Orthogonal Matrix } (P'P = PP' = I) \\ \therefore \hat{\beta}_{PC} &= P\hat{\theta} \end{aligned}$$

อย่างไรก็ตามในทางปฏิบัติเราไม่จำเป็นต้องนำตัวแปร Z ทุกตัวคือ z_2, z_3, \dots, z_k เข้าร่วมการวิเคราะห์ทั้งหมดเพราะ z_j บางตัวอาจไม่ได้มีความสำคัญ คือไม่ได้ดึงดูดเอาอิทธิพลร่วมของ X 's ไว้ในตัวเลย เราจึงจำเป็นต้องตัดตัวแปร Z บางตัวทิ้งไปก่อนการวิเคราะห์ สมมติว่ามี z_2, z_3, \dots, z_r เท่านั้นที่มีความสำคัญเราก็ตัด $z_{r+1}, z_{r+2}, \dots, z_k$ ทิ้งไป ด้วยเหตุนี้การวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = Z\theta + U$ จึงต้องอาศัยวิธี Partition ดังนี้คือ

$$Z = [z_1 | z_2] \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix} + U = z_1\theta_1 + z_2\theta_2 + U$$

โดยที่

$$Z = [z_2, z_3, \dots, z_r | z_{r+1}, z_{r+2}, \dots, z_k] = [z_1 | z_2]$$

และ

$$\theta = \begin{bmatrix} \theta_2 \\ \theta_3 \\ \vdots \\ \theta_r \\ \theta_{r+1} \\ \vdots \\ \theta_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix}$$

แล้วให้ถือเสมือนว่า $\theta_2 = 0$ คือ $\theta_{r+1} = 0, \theta_{r+2} = 0, \dots, \theta_k = 0$ ดังนั้นสมการถดถอยที่ต้อง
วิเคราะห์จึงลดรูปลงเหลือเพียง $Y = [Z_1 | Z_2] \begin{bmatrix} \theta_1 \\ 0 \end{bmatrix} + U$ นั่นคือ

$$Y = Z_1 \theta_1 + U \text{ และ } \hat{\theta}_1 = (Z_1' Z_1)^{-1} Z_1' Y$$

ดังนั้นเมื่อเขียน $\hat{\theta}_1$ สู่ $\hat{\beta}$ จึงพบว่า $\hat{\beta}_{PC} = P_1 \hat{\theta}_1$ โดยที่ $P_1 = (p_2, p_3, \dots, p_r)$

หมายเหตุ ถ้าใช้ตัวแปร Z ทุกตัววิเคราะห์สมการถดถอยจะพบว่า $\hat{\beta}_{PC} = \hat{\beta}_{OLS}$
ซึ่งจะไม่ช่วยแก้ปัญหา Multicollinearity ได้แต่ประการใด

8.5.3.2 ลำดับความสำคัญตัวแปร Z และการทดสอบความสำคัญ

พิจารณาสมการ $Y = (XP)\theta + U$ จะพบว่าเมื่อกำหนดให้ $Z = XP$ ก็แสดงว่า
Principal Component Matrix Z เกิดขึ้นจาก Orthogonal Transformation ของเมตริกซ์ X
หรือ $Z = XP = X(p_2, p_3, \dots, p_k) = (Xp_2, Xp_3, \dots, Xp_k) = (Z_2, Z_3, \dots, Z_k)$ เรา
เรียก Z_j ว่า Principal Component Variable ตัวที่ j

พิจารณา Z_j จะพบว่า $Z_j = Xp_j$ โดยที่ p_j คือ Normalized Characteristic Vector
ที่สอดคล้องกับ Characteristic Root λ_j ของเมตริกซ์ $X'X$ แสดงว่า Z_j คือ Linear Combination
ของเวกเตอร์ X 's กล่าวคือ

$$Z_j = Xp_j = [X_2, X_3, \dots, X_k] \begin{bmatrix} p_{j2} \\ p_{j3} \\ \vdots \\ p_{jk} \end{bmatrix}$$

$$= p_{j2} X_2 + p_{j3} X_3 + \dots + p_{jk} X_k$$

แสดงว่า Z_j เกิดจากการประกอบกันของเวกเตอร์ X_2, X_3, \dots, X_k และ Z_j จะมีความสำคัญมาก
น้อยเพียงใดขึ้นอยู่กับธรรมชาติของ Z_j เองว่าสามารถดึงเอาคุณลักษณะต่าง ๆ ของ

x_2, x_3, \dots, x_k ไว้ในตัวได้มากน้อยเพียงใด z_j ตัวใดดึงดูเอาอิทธิพลร่วมของ X 's ไว้ในตัวได้มากที่สุด ถือว่ามีความสำคัญที่สุด z_j ตัวใดดึงดูอิทธิพลร่วมของ X 's ไว้ในตัวได้น้อยถือว่ามีความสำคัญน้อย ลดหลั่นกันไปจนถึง z_j ตัวท้าย ๆ ที่แทบจะมีได้ดึงดูเอาอิทธิพลร่วมของ X 's ไว้ในตัวได้เลย (เพราะ z_j ตัวก่อนหน้านั้นดึงดูอิทธิพลร่วมของ X 's ไว้หมดหรือเกือบหมด) ก็จะไม่มีความสำคัญเลย และสามารถตัดทิ้งไปจากกระบวนการวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = Z\theta + U$ ได้

พิจารณาตัวแปร $z_j = Xp_j$ จะพบว่า

$$\begin{aligned} z_j' z_j &= (Xp_j)'(Xp_j) \\ &= p_j'(X'X)p_j \\ &= \lambda_j \end{aligned}$$

และ

$$\begin{aligned} Z'Z &= (XP)'(XP) \\ &= P'(X'X)P \\ &= D \\ &= \text{diag}(\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_k) \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_2 & & & & \\ & \lambda_3 & & & \\ & & \dots & & \\ & & & \lambda_j & \\ & & & & \dots \\ & & & & & \lambda_k \end{bmatrix} \end{aligned}$$

¹ จาก Characteristic Equation $AY = \lambda Y$ เราจะพบว่า $Y'AY = Y'\lambda Y = \lambda Y'Y = \lambda$ ถ้า Y เป็น Orthonormal Vector ดังนั้นจาก $p_j'(X'X)p_j$ เราทราบว่า $(X'X)p_j = \lambda_j p_j$ เพราะฉะนั้น $p_j'(X'X)p_j = \lambda_j p_j'p_j = \lambda_j$

เมื่อเรียงลำดับค่าของ Characteristic root λ ตามขนาดจากมากไปหาน้อยในลักษณะของ Order Statistic สมมุติว่าได้อดังนี้

$$\lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4 > \dots > \lambda_k^1$$

เราจึงให้ $z_2 = x_{p_2}$ เป็น PC ตัวที่ 1 $z_3 = x_{p_3}$ เป็น PC ตัวที่ 2 ... $z_k = x_{p_k}$ เป็น PC ตัวที่ k-1²

เครื่องมือที่ใช้วัดความสำคัญของ PC ก็คือ Relative Magnitude ของ λ ซึ่งเป็นอัตราส่วน เปรียบเทียบระหว่าง λ กับ S ซึ่งเป็นผลรวมความผันแปรของตัวแปร X's ซึ่งพัฒนาได้อดังนี้

$$\begin{aligned} S &= \sum_i^n (x_{2i} - \bar{x}_2)^2 + \sum_i^n (x_{3i} - \bar{x}_3)^2 + \dots + \sum_i^n (x_{ki} - \bar{x}_k)^2 \\ &= \sum_i^n x_{2i}^2 + \sum_i^n x_{3i}^2 + \dots + \sum_i^n x_{ki}^2 \end{aligned}$$

= ผลรวมของสมาชิกใน Main Diagonal ของเมตริกซ์ $X'X$ เมื่อตัวแปร x's และ Y ได้รับการแปลงรูปให้เป็น Deviated Form หรือ Standardized Form

$$= \text{tr} (X'X)^3$$

$$\begin{aligned} \text{แต่ } \text{tr} [P'(X'X)P] &= \text{tr} (X'X) \text{ และ } \text{tr} [P'(X'X)P] = \text{tr} [(XP)'(XP)] \\ &= \text{tr} [Z'Z] = \text{tr} D \text{ เมื่อ } D = \text{diag} (\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_k) \end{aligned}$$

ดังนั้น

$$S = \text{tr}(X'X) = \text{tr}(Z'Z) = \text{tr} D = \lambda_2 + \lambda_3 + \dots + \lambda_k$$

แต่เนื่องจากตัวแปร X's และ Y เป็น Standardize Form ดังนั้น $X'X = R_x$ ดังนั้น

¹ ผู้เขียนใช้ดัชนีของ λ ตามดัชนีของตัวแปร x โปรดอย่าได้สงสัยว่าเพราะเหตุใดจึงไม่มี λ_1

² อ่าน Johnston, J., Op. Cit., p. 323-4 ซึ่งแสดงการหาลำดับที่ของ PC โดยอาศัย Lagrangian Multiplier

³ อ่านตอน 4.4.1 และ 8.4.6

$$s = \text{tr}(X'X) = \text{tr} R_X = k - 1$$

$$\lambda_2 + \lambda_3 + \dots + \lambda_k = k - 1$$

หรือ

$$\frac{\lambda_2}{k-1} + \frac{\lambda_3}{k-1} + \dots + \frac{\lambda_k}{k-1} = 1 \text{ หรือ } 100\%$$

ด้วยเหตุนี้ ดัชนีที่ใช้วัดว่า z_j มีความสำคัญเพียงใด ควรตัดทิ้งไปก่อนการวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = f(Z's)$ หรือไม่ก็คือ $\frac{\lambda_j}{k-1} \times 100\%$ ถ้า z_j ตัวใดให้ค่า $\frac{\lambda_j}{k-1}$ สูงก็แสดงว่า z_j ตัวนั้นมีความสำคัญสูงเพราะดึงดูเอาความผันแปรร่วมของ $X's$ ไปได้มาก z_j ตัวใดให้ค่า $\frac{\lambda_j}{k-1}$ ต่ำก็แสดงว่า z_j ตัวนั้นมีความสำคัญน้อยเพราะดึงดูเอาความผันแปรร่วมของ $X's$ ไปได้ น้อย ด้วยเหตุนี้และโดยอาศัยกฎเกณฑ์ดังกล่าว เราจึงสามารถขจัดตัวแปร z_j ที่ไม่มีความสำคัญทิ้งไปก่อนที่จะนำไปวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = f(Z's)$

8.5.3.3 หลักเกณฑ์การขจัดตัวแปร z_j ก่อนการวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = f(Z's)$

ดังที่กล่าวมาแล้วในตอนต้นว่าตัวแปร Z อาจมีจำนวนได้สูงสุดไม่เกินจำนวนตัวแปรอิสระ X แต่โดยทั่วไปจะน้อยกว่าเพราะ z_j บางตัวอาจไม่มีความหมาย หรือความสำคัญเลย เพราะดึงดูความผันแปรร่วม s ไปได้เล็กน้อยเกินไป และในทางปฏิบัติเราควรตัดตัวแปร z_j ที่ไม่จำเป็นทิ้งไปเสียบ้างเพื่อสงวน df หลักเกณฑ์ตัดเลือก z_j ทิ้งไปหรือคง z_j เอาไว้มีหลายวิธีดังนี้

1. Kaiser's Criterion

วิธีนี้ให้พิจารณา z_j ทิ้งถ้าพบว่า $\lambda_j < 1$ โดยที่ $z_j = xp_j$ เมื่อ p_j คือ Normalized Characteristic Vector ที่สอดคล้องกับ λ_j (หรือตัด z_j ทิ้ง ถ้าพบว่า $z_j'z_j < 1$)

วิธีปฏิบัติสำหรับกฎเกณฑ์นี้สามารถกระทำได้ง่ายเพียงแต่ตรวจสอบเมตริกซ์ D โดยที่ $D = \text{diag}(\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_k)$ หากพบว่า λ ตัวใดมีค่าต่ำกว่า 1 ก็ให้ตัดทิ้งไปซึ่งมีผล

¹ ขอให้สังเกตว่า $k-1$ ก็คือจำนวนราก λ หรือจำนวนตัวแปรอิสระ X นั้นเอง โดยนัยนี้ถ้าหากว่างานวิจัยประกอบ ด้วยตัวแปร X ทั้งสิ้น 5 ตัว คือ X_2, X_3, X_4, X_5, X_6 จะพบว่า $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4 + \lambda_5 + \lambda_6 = 5$ ความผันแปร ร่วมของ X_2, X_3, \dots, X_6 ที่ z_j แต่ละตัวดึงดูเอาไว้ก็คือ $\frac{\lambda_j}{5}$ เช่น $\frac{\lambda_2}{5}, \frac{\lambda_3}{5}, \dots, \frac{\lambda_6}{5}$ สมมุติ ว่า $\lambda_2 = 2.5, \lambda_3 = 1.25, \lambda_4 = 1.00, \lambda_5 = 0.20, \lambda_6 = 0.05$ จะพบว่า $\frac{\lambda_2}{5} = \frac{2.5}{5} = .50$
 $\frac{\lambda_3}{5} = \frac{1.25}{5} = .25, \frac{\lambda_4}{5} = \frac{1}{5} = .20, \frac{\lambda_5}{5} = \frac{0.20}{5} = .04, \frac{\lambda_6}{5} = \frac{0.05}{5} = .01$ หรือ z_2, z_3, z_4, z_5, z_6 ดึงดูอิทธิพลร่วมของ $X's$ ไว้ในตัวได้ 50%, 25%, 20%, 4% และ 1% ตามลำดับ

เสมือนกำหนดให้ λ ตัวนั้นมีค่าเป็น 0 และเมื่อเราจัดเรียงค่าของ λ ตามลำดับจากมากไปหาน้อย คือ $\lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_k$ ค่าของ λ ที่อยู่ท้ายๆ ก็ถูกขจัดทิ้ง หรือถูกกำหนดให้เป็น 0 สมมติ $\lambda_{r+1} < 1$ ผลที่ตามมาก็คือ $\lambda_{r+2}, \lambda_{r+3}, \dots, \lambda_k$ ล้วนมีค่าน้อยกว่า 1 และถูกขจัดทิ้ง (คือกำหนดให้เท่ากับ 0) ดังนี้

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_2 & & & & & \\ & \lambda_3 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \lambda_r & & \\ & & & & 0 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

และเมตริกซ์ $P = [p_2, p_3, \dots, p_k]$ โดยที่ p_j คือ Normalized Vector ที่สอดคล้องกับ λ_j ก็จะลดรูปเป็น $P = [p_2, p_3, \dots, p_r, 0, \dots, 0] = [P_1 \mid P_2]$ เมื่อ 0 คือ Zero Vector

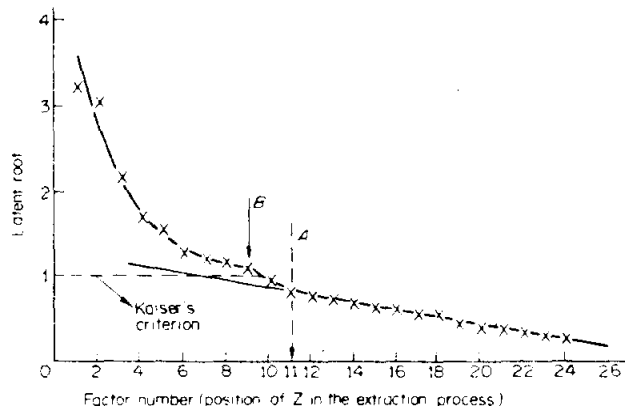
$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } Z &= XP = X[p_2, p_3, \dots, p_r, 0, \dots, 0] = X[P_1 \mid P_2] \\ &= [Xp_2, Xp_3, \dots, Xp_r, 0, \dots, 0] = [XP_1 \mid 0] \\ &= [Z_1 \mid Z_2] \end{aligned}$$

ดังนั้นสมการถดถอย $Y = X(PP')\beta + U$ จึงเปลี่ยนรูปเป็น $Y = X(P_1P_1')\beta + U$ หรือ $Y = Z_1\theta_1 + U$ และค่าประมาณของ θ_1 ก็คือ $\hat{\theta}_1 = (Z_1'Z_1)^{-1}Z_1'Y$ เมื่อย้อนคืนสู่ β จะพบว่า $\hat{\theta}_1 = P_1'\beta$ ซึ่งเมื่อคูณตลอดด้วย P_1 จะได้

$$\begin{aligned} P_1\hat{\theta}_1 &= P_1P_1'\beta \\ \text{หรือ } \hat{\beta} &= P_1\hat{\theta}_1 \end{aligned}$$

2. Cattell's Scree test'

การทดสอบวิธีนี้ให้พิจารณาลักษณะการเปลี่ยนโค้งของคู่ลำดับ (j, λ_j) กล่าวคือให้ใช้แกนนอนแทนระหัด (เลขที่) ของ λ และแกนตั้งแทนค่าของ λ เมื่อนำคู่ลำดับ (j, λ_j) ไปพล็อตลงในแกน Coordinate ดังกล่าว ทางเดินของจุด (j, λ_j) จะมีลักษณะของโค้งที่ลาดเอียงลงทางขวาดังภาพ



ขอให้สังเกตว่าเส้นโค้งจะลาดลงตามลำดับจนใกล้ที่จะตัดแกนนอน (แต่ต้องไม่ตัดกับแกนนอน เพราะถ้าตัดแกนนอนแสดงว่า $\lambda_j = 0$ หรือ $x'x$ เป็น Singular Matrix มิใช่ Near Singularity ซึ่งเป็นประเด็นที่เรากำลังศึกษาอยู่)

การตัดสินใจให้พิจารณาจากโค้งโดยคง λ_j ทุกตัวที่อยู่ก่อนจุดเปลี่ยนโค้ง (Curvature) เอาไว้ และตัด λ_j ทุกตัวที่อยู่ถัดจุดเปลี่ยนโค้งทิ้ง หรือกล่าวให้เข้าใจง่ายขึ้นก็คือให้ตัด λ_j ทุกตัวที่ทำให้โค้งมีลักษณะยัดตัวเป็นแนวเส้นตรง

จากภาพจะเห็นว่า $\lambda_{12}, \lambda_{13}, \dots, \lambda_{24}$ สอดคล้องกับโค้งที่ยัดตัวเป็นเส้นตรง ให้ตัด $\lambda_{12}, \lambda_{13}, \dots, \lambda_{24}$ ทิ้งและคง $\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_{11}$ เอาไว้ เมื่อเปรียบเทียบกับ Kaiser's Criterion จะพบว่า Kaiser's Criterion คง λ_j ไว้น้อยกว่าคือ ถ้าใช้ Kaiser's Criterion เราจะคง $\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_9$ เอาไว้ นอกนั้นตัดทิ้ง

¹ Koutsoyiannis, A., Op. Cit., p.423.4

3. Bartlett's Criterion

หลักเกณฑ์ของวิธีนี้ก็คือ ภายหลังจากได้ตรวจสอบ $\lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_k$ แล้ว พบว่า $\lambda_{r+1}, \lambda_{r+2}, \dots, \lambda_k$ มีค่าต่ำขณะที่ $\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_r$ มีค่าสูงอยู่ในระดับที่พอยอมรับได้ ปัญหาที่จะต้องกระทำก็คือเราควรคง λ_j ตัวใดกลุ่ม ($\lambda_{r+1}, \lambda_{r+2}, \dots, \lambda_k$) ไว้โดยตั้งเป็นข้อสมมุติฐานว่า λ_j เหล่านี้มีค่าไม่ต่างกัน คือ

$$H_0 : \lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \dots = \lambda_k \quad \text{VS} \quad H_1 : \lambda \quad \text{not all equal}$$

ซึ่งถ้ายอมรับ H_0 ก็แสดงว่า $\lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \dots = \lambda_k$ เมื่อ $\lambda_k = \lambda_{\min}$ หรือยอมรับว่า λ_j ทุกตัวในกลุ่ม ($\lambda_{r+1}, \lambda_{r+2}, \dots, \lambda_k$) มีค่าต่ำเท่ากับ λ_{\min} ซึ่งโดยปกติจะต่ำมากจนไม่ถือว่ามีความสำคัญ แล้วตัดสินใจตัด $z_{r+1}, z_{r+2}, \dots, z_k$ ทิ้งไป แต่ถ้าปฏิเสธ H_0 ก็แสดงว่าเราเชื่อว่า λ_{r+1} ต้องไม่มีค่าต่ำเท่ากับ λ_{\min} ให้ตัดสินใจคง z_{r+1} ไว้ แล้วทดสอบสมมุติฐาน

$H_0 : \lambda_{r+2} = \lambda_{r+3} = \dots = \lambda_k$ ต่อไป หากปฏิเสธ H_0 ก็ให้คง z_{r+2} ไว้ แล้วทดสอบ

$H_0 : \lambda_{r+3} = \lambda_{r+4} = \dots = \lambda_k$ ต่อไป ทำดังนี้เรื่อยไปจนกว่าจะยอมรับ H_0 สมมุติว่าเมื่อทดสอบถึง $H_0 : \lambda_{r+5} = \lambda_{r+6} = \dots = \lambda_k$ แล้วปรากฏว่าเรายอมรับสมมุติฐานนี้ก็แสดงว่าเรา

จะคง $z_2, z_3, \dots, z_r, z_{r+1}, \dots, z_{r+4}$ เอาไว้เพื่อวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = z_1\theta_1 + u$

หรือ $Y = \gamma_2 z_2 + \gamma_3 z_3 + \dots + \gamma_{r+4} z_{r+4} + u$ ต่อไป

ตัวทดสอบสำหรับวิธีนี้ก็คือ

$$\chi^2^* = n \log_e \left\{ (\lambda_{r+1} \lambda_{r+2} \dots \lambda_k)^{-1} \left(\frac{\lambda_{r+1} + \lambda_{r+2} + \dots + \lambda_k}{k-1-r} \right)^{k-1-r} \right\}$$

โดยปฏิเสธ H_0 ณ ระดับนัยสำคัญ α เมื่อ $\chi^2^* > \chi_{\alpha}^2$ โดยที่ $v = \frac{1}{2} (k-r-2) (k-r+1)$

8.5.3.4 การประมาณค่าพารามิเตอร์ β

การประมาณค่า β ใน PCR สามารถกระทำได้ 2 วิธีดังนี้

¹ ควรใช้ Kaiser's Criterion หรือ Cattell's Scree Test ตรวจสอบดู

² โดยอาศัย Sequence $\lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_k$ แสดงว่า λ_{r+1} ต้องสูงกว่า $\lambda_{r+2}, \lambda_{r+3}, \dots, \lambda_k$ อยู่แล้ว เมื่อปฏิเสธ H_0 (ยอมรับ H_1) ก็แปลว่าเรายอมรับว่า λ_{r+1} มีค่าสูงพอที่จะคงเอาไว้ได้

วิธีที่ 1 อาศัย Inverse Transformation

จากสมการ $Y = Z_1\theta_1 + u$ เมื่อ $Z_1 = XP_1$ และ $\theta_1 = P_1'\beta$ โดยที่ $P_1 = [p_2, p_3, \dots, p_r]$ และโดยอาศัย OLS เราจึงสามารถประมาณค่า θ_1 ได้โดยง่ายคือ

$$\hat{\theta}_1 = (Z_1'Z_1)^{-1}Z_1'Y$$

เมื่ออาศัย Inverse Transformation จึงพบว่า $\hat{\beta} = P_1\hat{\theta}_1$

วิธีนี้มีผลเช่นเดียวกับ Restricted Least Square ที่ประมาณค่า β จากสมการ $Y = Z\beta + u$ ภายใต้ข้อจำกัดว่า $P_2'\theta_2 = 0$

วิธีที่ 2 ใช้ OLS

สมมุติว่าภายหลังจากพิจารณาตัดตัวแปร Z ที่ไม่สำคัญบางส่วนทิ้งไปแล้วเหลือตัวแปร Z ที่สำคัญ $r-1$ ตัวคือ Z_2, Z_3, \dots, Z_r ให้ดำเนิน การวิเคราะห์สมการถดถอย $Y = f(Z)$ โดยอาศัย OLS ตามปกติคือ

$$\text{จาก } Y = \gamma_2 Z_2 + \gamma_3 Z_3 + \dots + \gamma_r Z_r + u$$

แล้วประมาณค่า $\gamma_2, \gamma_3, \dots, \gamma_r$ โดยอาศัย OLS ได้ $\hat{\gamma}_2, \hat{\gamma}_3, \dots, \hat{\gamma}_r$ สมการประมาณค่าที่ได้ก็คือ $Y = \hat{\gamma}_2 Z_2 + \hat{\gamma}_3 Z_3 + \dots + \hat{\gamma}_r Z_r$

แต่เนื่องจาก $z_j = xp_j = p_{j2}x_2 + p_{j3}x_3 + \dots + p_{jk}x_k ; j = 2, 3, \dots, k$

ให้แทนที่ z_j ด้วย xp_j จะได้สมการ $Y = f(X)$ ตามเดิมคือ

$$\begin{aligned} Y &= \hat{\gamma}_2 (p_{22}x_2 + p_{23}x_3 + \dots + p_{2k}x_k) + \hat{\gamma}_3 (p_{32}x_2 + p_{33}x_3 + \dots + p_{3k}x_k) \\ &+ \dots + \hat{\gamma}_k (p_{k2}x_2 + p_{k3}x_3 + \dots + p_{kk}x_k) \\ &= (\hat{\gamma}_2 p_{22} + \hat{\gamma}_3 p_{32} + \dots + \hat{\gamma}_k p_{k2})x_2 + (\hat{\gamma}_2 p_{23} + \hat{\gamma}_3 p_{33} + \dots + \hat{\gamma}_k p_{k3})x_3 \\ &+ \dots + (\hat{\gamma}_2 p_{2k} + \hat{\gamma}_3 p_{3k} + \dots + \hat{\gamma}_k p_{kk})x_k \\ &= \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_3 + \dots + \hat{\beta}_k x_k \end{aligned}$$

จะเห็นได้ว่า $\hat{\beta}_j$ เป็น Linear Combination ของ $\hat{Y}_2, \hat{Y}_3, \dots, \hat{Y}_k$ และขอให้สังเกตว่า ถ้าเราคงตัวแปร Z ทุกตัวเอาไว้ ค่าประมาณของ β_{PC} จะมีผลตรงกันกับ $\hat{\beta}_{OLS}$ ทุกประการ

ข้อสังเกต

ขอให้สังเกตว่าวิธีที่ 1 และวิธีที่ 2 ก็คือวิธีเดียวกัน