บทที่ 2

สถิติที่ใช้ในการวิจัย

แผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียล (Factorial Experiments)

แผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียลเป็นแผนแบบการทดลองที่น่าสนใจมาก เพราะเป็นแผนแบบการทดลองที่สามารถทดลองปัจจัย (factor) ได้ทีละหลาย ๆ ปัจจัยไปพร้อม ๆ กันได้ ซึ่งทำให้สามารถประหยัดเวลา และค่าใช้จ่ายได้เป็นอย่างมาก และแผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียลที่สำคัญแบบหนึ่งคือแผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียลขนาด 2^2 หรือแผนแบบการทดลองที่มีปัจจัย 2 ปัจจัย ซึ่งแต่ละปัจจัยมี 2 ระดับ หรืออาจเรียกว่าระดับต่ำ (low) และระดับสูง (high) ซึ่งมีรูปแบบผลบวกของสิ่งทดลอง (treatment combinations) ดังนี้

อิทธิพลแฟคทอเรียล (Factorial effect)	Treatment combinations			
	(1)	a	b	ab
A	-	+	-	+
B	-	-	+	+
AB	+	-	-	+

ซึ่งการหาค่าเฉลี่ยของอิทธิพลของปัจจัย (the average of factor) สามารถหาได้ดังนี้

$$A = 1/2r\ [\ ab + a - b - (1)\ ]$$

$$B = 1/2r\ [\ ab + b - a - (1)\ ]$$

$$AB = 1/2r\ [\ ab + (1) - a - b\ ]$$

และการหาผลรวมกำลังสอง (Sum of Squares) สามารถหาได้ดังนี้

$$SSA = [ab + a - b - (1)]^2 / (r*4)$$

$$SSA = [ab + b - a - (1)]^2 / (r*4)$$

$$SSAB = [ab + (1) - a - b]^2 / (r*4)$$

$$SST = \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{n} y_{ijk}^2 - \frac{y_{...}^2}{4r}$$

$$SSE = SST - SSA - SSB - SSAB$$

โดยองศาความเป็นอิสระของ SST เท่ากับ (4r - 1)

ของ SSA เท่ากับ 1

ของ SSB เท่ากับ 1

ของ SSAB เท่ากับ 1

ของ SSE เท่ากับ 4*(r-1)

เมื่อ r คือจำนวนการทำซ้ำ

ซึ่งสามารถเขียนตารางวิเคราะห์ความแปรปรวนได้ดังนี้

สาเหตุของความผันแปร	d.f.	ผลรวมกำลังสอง	ผลรวมกำลังสองเฉลี่ย	F
A	1	SSA	SSA/1	MSA/MSE
B	1	SSB	SSB/1	MSB/MSE
AB	1	SSAB	SSAB/1	MSAB/MSE
ความคลาดเคลื่อน	4*(r-1)	SSE	SSE/(4*(r-1))	
รวม	(4r-1)	SST		

เพื่อให้สามารถหาความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ย (MSE) ได้ จึงต้องมีจำนวนการทำซ้ำอย่างน้อยที่สุดเท่ากับ 2 แต่เนื่องจากความจำเป็นบางประการอาจทำให้ไม่สามารถหาข้อมูลที่มีความคล้ายคลึงกันจำนวนมาก ๆ ได้ ซึ่งเป็นเหตุให้ไม่สามารถทำซ้ำในแผนแบบการทดลองได้ จึงได้มีการเสนอให้มีการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลาง (center point) โดยการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลางนี้คือการเก็บค่าสังเกตที่ตัวแปรในแผนแบบการทดลอง (x's) ทุกตัวมีค่าเป็น 0 ซึ่งการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลางนี้ทำให้สามารถหาค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยได้ และจะไม่ทำให้ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยเปลี่ยนแปลง แต่จะส่งผลทำให้การประมาณค่า β_0 มีค่าเข้าใกล้ค่าเฉลี่ย (Grand Mean) มากยิ่งขึ้น ซึ่งการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลางนี้ควรทำอย่างน้อยที่สุดเท่ากับ

(2k -1) และต้องมีจำนวนไม่มากเกินไป เนื่องจากการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลางนี้ทำขึ้นเพื่อแก้ปัญหาการไม่สามารถหาข้อมูลที่มีความคล้ายคลึงกันได้ โดยการหาค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยจากการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลางสามารถหาได้จากสูตรดังนี้

$$MSE = SSE/(n_0 - 1)$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n_0}(y_i - \bar{y})^2}{n_0 - 1}$$

เมื่อ n_0 คือจำนวนการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลาง

และการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลางนี้ยังมีประโยชน์ในการตรวจสอบความโค้ง (curvature) ในรูปแบบได้ด้วย โดยจะพิจารณารูปแบบ

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_j + \sum_{j=1}^{p}\beta_{jj} x_j^2 + \sum_{i<j}^{p}\sum^{p}\beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$

ทดสอบสมมติฐาน

$$H_o : \sum_{j=1}^{p}\beta_{jj} = 0$$

$$H_a : \sum_{j=1}^{p}\beta_{jj} \neq 0$$

ซึ่งการคำนวณผลรวมกำลังสองของความโค้ง (Sum of Squares of Curvature) สามารถหาได้จากสูตรดังนี้

$$SSC = \frac{n_f n_0 (\overline{y_f} - \overline{y_0})^2}{n_f + n_0}$$

เมื่อ n_f คือจำนวนตัวอย่างในแผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียล

n_0 คือจำนวนการทำซ้ำที่จุดศูนย์กลาง

$\overline{y_f}$ คือค่าเฉลี่ยของ y ที่จุดในแผนแบบการทดลอง

$\overline{y_o}$ คือค่าเฉลี่ยของ y ที่จุดศูนย์กลาง

และ SSC มีองศาความเป็นอิสระเท่ากับ 1

ซึ่งสามารถเขียนตารางวิเคราะห์ความแปรปรวนได้ดังนี้

สาเหตุของความผันแปร	d.f.	ผลรวมกำลังสอง	ผลรวมกำลังสองเฉลี่ย	F
A	1	SSA	SSA/1	MSA/MSE
B	1	SSB	SSB/1	MSB/MSE
AB	1	SSAB	SSAB/1	MSAB/MSE
Curvature	1	SSC	SSC/1	MSC/MSE
ความคลาดเคลื่อน	(n_0-1)	SSE	SSE/ (n_0-1)	
รวม	n-1	SST		

เราจะยอมรับสมมติฐานหลัก ก็ต่อเมื่อ F_{cur} มีค่าน้อยกว่า $F_{\alpha,1,(n0-1)}$ ซึ่งแสดงว่าในรูปแบบมีส่วนโค้งรวมอยู่ด้วย ซึ่งในการประมาณค่าเราจะต้องนำส่วนโค้งนั้นมาพิจารณาด้วย

การวิเคราะห์พื้นผิว (Response Surface Methodology (RSM))

การวิเคราะห์พื้นผิว (Response Surface Methodology (RSM)) เป็นวิธีการวิเคราะห์ที่ใช้เทคนิคทางสถิติ โดยรูปแบบที่ได้จากวิธีนี้จะเป็นการผสมผสานระหว่างรูปแบบที่ได้จากการสังเกต (Empirical model) และรูปแบบที่จะเป็นประโยชน์ (Exploitation model) โดยมีหลักการคือจะพิจารณาบริเวณที่สนใจ (Interest Region)ของตัวแปรพยากรณ์ (predictor variable) โดยจะพยายามหาบริเวณของตัวแปรพยากรณ์ที่เหมาะสมที่สุดที่จะทำให้รูปแบบที่ได้ มีความเอนเอียง (bias) น้อยที่สุด และมีความเหมาะสมของรูปแบบมากที่สุด ซึ่งความเหมาะสมของรูปแบบนี้สามารถพิจารณาได้จากค่าพารามิเตอร์ไร้ศูนย์กลาง (noncentrality parameter)

ในปี ค.ศ. 1963 จอร์จ อี พี บอกซ์ และนอร์แมน อาร์ แดรปเปอร์ (George E.P. Box and Norman R. Draper) ได้พิจารณารูปแบบที่จัดกลุ่มไม่ได้ (model misspecification) โดยทั่วไปมักจะประมาณค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยด้วยรูปแบบดังนี้

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{X}_1'\beta_1$$

โดยในที่นี้เราพิจารณารูปแบบกำลังหนึ่ง (First order model) ซึ่งมีรูปแบบดังนี้

$$y(x) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_j + \varepsilon$$

แต่ในความเป็นจริงแล้วรูปแบบความสัมพันธ์ที่แท้จริงอาจจะเป็นรูปแบบอื่น ๆ ที่เราละเลยตัวแปรบางตัวไป คือจะมีรูปแบบดังนี้

$$\eta(x) = \mathbf{X}_1'\beta_1 + \mathbf{X}_2'\beta_2$$

โดยในที่นี้เราจะพิจารณารูปแบบกำลังสอง (Second order model) ซึ่งมีรูปแบบดังนี้

$$\eta(x) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_j + \sum_{j=1}^{p} \beta_{jj} x_j^2 + \sum_{i<j}^{p} \sum \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$

และสามารถเขียนในรูปแบบของข้อมูลจำนวน n ชุดได้ดังนี้

$$\mathbf{y(x)} = \mathbf{X}_1\beta_1 \qquad (1)$$

$$\eta(x) = \mathbf{X}_1\beta_1 + \mathbf{X}_2\beta_2 \qquad (2)$$

ซึ่งถ้ารูปแบบ (2) เป็นจริง แต่เราใช้รูปแบบ (1) ในการประมาณค่า ดังนั้นตัวประมาณ ที่ได้จาก (1) ซึ่งเท่ากับ $\hat{\beta} = (\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1)^{-1}\mathbf{X}_1'y$ จึงเป็นตัวประมาณที่เอนเอียงของ β ซึ่งค่าคาดหวังของ $\hat{\beta}$ คือ

$$E(\hat{\beta}) = \beta + \mathbf{A}\beta_2$$

โดยที่ **A** คือเมทริกซ์ของความเอนเอียง (bias matrix) และ **A** สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\mathbf{A} = (\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1)^{-1}\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_2$$

ซึ่งสามารถคำนวณค่าความเอนเอียงของการประมาณ (bias in prediction) ได้จากสูตรดังนี้

$$B_1 = (nK/\sigma^2) \int_R B^2(y)$$

เมื่อ

$\mathbf{K}^{-1} = \int_R dx$

R คือบริเวณที่สนใจ

และ B(y) คือความเอนเอียงของ y

โดย เราสามารถหาค่าของ $\int_R B^2(y)$ ได้ในเทอมของโมเมนต์เมทริกซ์ (moment matrices) ดังนี้

$$\int_R B^2(y) = n\beta_2' \mathbf{T} \beta_2/\sigma^2$$

เนื่องจาก

$$B_1 = (n/\sigma^2) \int_R w(x)\{Ey(x) - \eta(x)\}^2 dx$$

เมื่อ

$y(\mathbf{x}) = \mathbf{X}_1\beta_1$

$\eta(\mathbf{x}) = \mathbf{X}_1\beta_1 + \mathbf{X}_2\beta_2$

และ

$\mathbf{M}_{11} = n^{-1} \mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1$

$\mathbf{M}_{12} = n^{-1} \mathbf{X}_1'\mathbf{X}_2$

$\mathbf{M}_{22} = n^{-1} \mathbf{X}_2'\mathbf{X}_2$

ดังนั้น

$$B_1 = (n/\sigma^2) \int_R \beta_2'(x_1 A - x_1')'(x_1' A - x_2')\beta_2 dx$$

$$= (n/\sigma^2)\beta_2' T \beta_2'/\sigma^2$$

โดยที่

$\mathbf{T} = \mu_{22} + \mathbf{M}'_{12}\mathbf{M}^{-1}{}_{11}\mu_{11}\mathbf{M}^{-1}{}_{11}\mathbf{M}_{12} - 2\mu'_{12}\mathbf{M}^{-1}{}_{11}\mathbf{M}_{12}$

n คือขนาดตัวอย่าง

และ μ_{11}, μ_{12} และ μ_{22} คือโมเมนต์เมทริกซ์

เมื่อ

$\mu_{11} = \mathbf{K} \int_R \mathbf{x}_1\mathbf{x}_1' dx$

$\mu_{12} = \mathbf{K} \int_R \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2' dx$

และ $\mu_{22} = \mathbf{K} \int_R \mathbf{x}_2\mathbf{x}_2' dx$

ซึ่งสามารถหาเมทริกซ์ต่างๆ ดังกล่าวที่กล่าวมาข้างต้นได้โดยจะยกตัวอย่างในกรณีแผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียลขนาด 2^2 จะได้ว่า

$$\mathbf{X} = [\, \mathbf{X}_1 \;\; \mathbf{X}_2 \,]$$

โดยที่

$$\mathbf{X}_1 = [\, 1 \quad x_1 \quad x_2 \,]$$

$$\mathbf{X}_2 = [\, x_1x_2 \quad x_1^2 \quad x_2^2 \,]$$

$$\mathbf{x}_1 = [\, 1 \quad x_1 \quad x_2 \,]$$

$$\mathbf{x}_2 = [\, x_1x_2 \quad x_1^2 \quad x_2^2 \,]$$

ดังนั้น

$$\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{n} & \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1^2 & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_2^2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{X}_2'\mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^3\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^3 \\ \mathbf{x}_1^3\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^4 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^2 \\ \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^3 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_2^4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_1^2 & \mathbf{x}_2^2 \\ \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_1^3 & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2^2 \\ \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_2^3 \end{bmatrix}$$

และ

$$\mathbf{M}_{11} = \frac{1}{n}\begin{bmatrix} \mathbf{n} & \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1^2 & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_2^2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{M}_{22} = \frac{1}{n}\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^3\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^3 \\ \mathbf{x}_1^3\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^4 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^2 \\ \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^3 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_2^4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{12} = \frac{1}{n}\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_1^2 & \mathbf{x}_2^2 \\ \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_1^3 & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2^2 \\ \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2^2 & \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_2^3 \end{bmatrix}$$

และ

$$\mathbf{x}_1'\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ x_1 & x_1^2 & x_1x_2 \\ x_2 & x_1x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}_2'\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} x_1^2x_2^2 & x_1^3x_2^2 & x_1^2x_2^3 \\ x_1^3x_2^2 & x_1^4 & x_1^2x_2^2 \\ x_1^2x_2^3 & x_1^2x_2^2 & x_2^4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_1'\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} x_1x_2 & x_1^2 & x_2^2 \\ x_1^2x_2 & x_1^3 & x_1x_2^2 \\ x_1x_2^2 & x_1^2x_2 & x_2^3 \end{bmatrix}$$

และ

$$\mu_{11} = \iint_R \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ x_1 & x_1^2 & x_1x_2 \\ x_2 & x_1x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2$$

$$\mu_{22} = \iint_R \begin{bmatrix} x_1^2x_2^2 & x_1^3x_2^2 & x_1^2x_2^3 \\ x_1^3x_2^2 & x_1^4 & x_1^2x_2^2 \\ x_1^2x_2^3 & x_1^2x_2^2 & x_2^4 \end{bmatrix} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2$$

$$\mu_{12} = \iint_R \begin{bmatrix} x_1\mathbf{x}_2 & x_1^2 & x_2^2 \\ x_1^2x_2 & x_1^3 & x_1x_2^2 \\ x_1x_2^2 & x_1^2x_2 & x_2^3 \end{bmatrix} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2$$

ในปี 1959 บอกซ์และแครปเปอร์ ได้เสนอบริเวณที่สนใจในแผนแบบการทดลองซึ่ง บริเวณนี้จะเป็นบริเวณที่มีค่าความเอนเอียงต่ำที่สุด โดยมีเงื่อนไขคือ

$$\mathbf{M}^{-1}{}_{11}\mathbf{M}_{12} = \mu^{-1}{}_{11}\mu_{12}$$

ซึ่งบริเวณที่สนใจนี้จะมีค่าอยู่ระหว่าง [-1 , 1] หรือ $g \leq 1$ และสามารถคำนวณค่า g ได้ดังนี้

$$g^2 = n / [(d_1+d_2)^* (n - n_0)]$$

หรือ

$$g^2 = n / 3^* (n - n_0)$$

เมื่อ n คือจำนวนตัวอย่างทั้งหมด

n_0 คือจำนวนตัวอย่าง (การทำซ้ำ) ที่จุดศูนย์กลาง

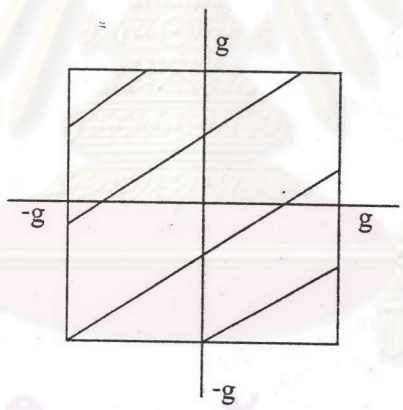
d_1 คือจำนวนของกำลังที่ใช้ในการประมาณ ในที่นี้เท่ากับ 1

และ d_2 เท่ากับ d_1+ 1 ซึ่งในที่นี้เท่ากับ 2

โดยสามารถเขียนเมทริกซ์ของแผนแบบการทดลอง (Design matrix) ได้ดังนี้

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \pm g & \pm g & \dots & \pm g \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

ในกรณีการทดลองแบบแฟคทอเรียลขนาด 2^2 จะมีบริเวณที่สนใจดังนี้



การทดสอบความเหมาะสมของรูปแบบ (lack of fit test)

การเลือกแผนแบบการทดลองที่เหมาะสมจะมีการพิจารณาจากหลาย ๆ อย่าง เช่น อันดับแรกจะพิจารณาจากความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยมีค่าน้อยที่สุด และการพิจารณาแผนแบบที่มีการสืบค้นความไม่พอเพียงของรูปแบบ (good detection of mode inadequacy) โดยสามารถพิจารณาได้จากค่ากำลังของการทดสอบความเหมาะสมของรูปแบบ (Power of the lack of fit test) ซึ่งในที่นี้จะดูได้จากค่าพารามิเตอร์ไร้ศูนย์กลาง คือ

$$\lambda = n\beta'_2 \mathbf{L}\beta_2/\sigma^2$$

เมื่อ

$$\mathbf{L} = \mathbf{M}_{22} - \mathbf{M}'_{12}\mathbf{M}^{-1}_{11}\mathbf{M}_{12}$$

β_2 คือสัมประสิทธิ์การถดถอยอันดับที่สอง (second order coefficient)

และ n คือขนาดตัวอย่าง

ในปี ค.ศ. 1972 แอทกินสัน (Atkinson) ได้เสนอแผนแบบการทดลองที่ทำให้ค่า $|L|$ มีค่ามากที่สุด ซึ่งถ้ารูปแบบความสัมพันธ์ของตัวแปรตามกับตัวแปรในแผนแบบการทดลองเป็นรูปแบบกำลังสอง นั่นคือ $\eta(x) = \mathbf{X}_1\beta_1 + X_2\beta_2$ เป็นจริง ค่าของ λ จะมีค่าสูง เพราะ λ มีการแจกแจงไคสแควร์ ซึ่งเป็นค่าผลรวมกำลังสองของความถดถอย (Sum Squares of Regression (SSR)) ของสัมประสิทธิ์การถดถอยอันดับที่สอง (β_2) ซึ่งถ้ามีค่ามากแสดงว่า β_2 จะมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ และแผนแบบการทดลองแบบใดที่ทำให้ค่า λ มีค่ามาก แสดงว่าแผนแบบการทดลองนั้นจะให้ค่ากำลังของการทดสอบความเหมาะสมของรูปแบบสูง

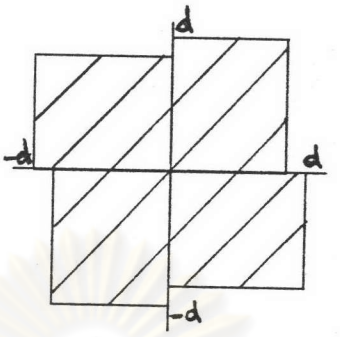
ถ้าจะพิจารณาจากเงื่อนไขดังกล่าวทั้ง 2 ข้อไปพร้อม ๆ กัน คือแผนแบบการทดลองที่มีค่าความเอนเอียงต่ำที่สุด และแผนแบบการทดลองที่ให้ค่าพารามิเตอร์ไร้ศูนย์กลางสูงที่สุด จะไม่สามารถหาค่า g ที่ทำให้เกิดเงื่อนไขทั้งสองข้อนี้พร้อมกันได้ ดังนั้นในปี ค.ศ. 1992 แพททริก ดีฟีโอ และเรย์มอนด์ เอช. ไมเยอร์ (Patrick DeFeo and Raymond H. Myers) จึงได้เสนอบริเวณที่สนใจในแผนแบบการทดลอง โดยบริเวณที่สนใจที่ใช้พิจารณานี้จะเป็นบริเวณที่ให้ค่าความเอนเอียงคงที่ และสามารถหาค่าเฉลี่ยของพารามิเตอร์ไร้ศูนย์กลางได้ในเทอมของค่าความเอนเอียงคงที่ โดยจะมีความสอดคล้องกับบริเวณที่สนใจของแผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียล โดยการแปลง (transform) ด้วยเมทริกซ์ **R** ซึ่งในกรณีแผนแบบการทดลองแบบแฟคทอเรียลขนาด 2^2 สามารถสร้างเมทริกซ์ **R** ได้ดังนี้

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin & \cos\theta \end{bmatrix}$$

เมื่อ θ คือมุมคงที่ และสามารถหาเมทริกซ์ของแผนแบบการทดลองได้ดังนี้

$$\mathbf{D}' = \begin{bmatrix} -d & d & -1 & 1 & \mathbf{0} \\ -1 & 1 & d & -d & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

โดยบริเวณที่สนใจในแผนแบบการทดลองนี้เป็นดังนี้



โดย g และ d มีความสัมพันธ์กันดังนี้

$$d^2 = \sqrt{(2g^2)} - 1$$

และ $d \leq 1$

การหาค่าเฉลี่ยของพารามิเตอร์ไร้ศูนย์กลางสามารถทำได้ดังนี้

$$\lambda^*_{ave} = \int_{\phi^*} \lambda d\beta_2 \; / \; \int_{\phi^*} d\beta_2$$

$$= \delta \; tr\,(T^{-1}L) \,/\, p_2$$

เมื่อ $\delta = \beta_2 T' \beta_2 / \sigma^2$

β_2 คือสัมประสิทธิ์การถดถอยอันดับที่สอง (second order coefficient)

และ p_2 คือจำนวนมิติ (dimension) ของ β_2

การประมาณค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยพหุคูณโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดสามัญ

วิธีการประมาณค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยพหุคูณนี้มีรากฐานมาจากทฤษฎีการประมาณเชิงเส้นที่คิดขึ้นโดยคาร์ล เฟรดริก เกาส์ (Carl Friedrich Gauss) ในปี ค.ศ. 1777 -1855 และอังเดร แอนดรีวิช มาร์โคฟ (Andrei Andreevich Markov) ในปี ค.ศ. 1855 -1922 โดยหลักใน

การประมาณค่าสัมประสิทธิ์คือ ทำให้ผลรวมกำลังของความคลาดเคลื่อน (Sum of Squares Error (SSE)) มีค่าน้อยที่สุด ซึ่งแสดงรายละเอียดดังนี้

นิยามที่ 1

จากสมการ $\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$ จะได้ว่าตัวประมาณกำลังสองน้อยที่สุดของ β คือ $\hat{\beta}$ ที่ทำให้ผลรวมกำลังสองของความคลาดเคลื่อนมีค่าน้อยที่สุด

จากนิยามที่ 1 เราจะทำการหาตัวประมาณกำลังสองน้อยที่สุดได้ดังนี้

กำหนด $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0,\hat{\beta}_1,...,\hat{\beta}_k)'$ จะได้ว่า $\hat{y} = \mathbf{X}\hat{\beta}$ ดังนั้น ε เป็นเวกเตอร์ของความคลาดเคลื่อน ซึ่งผลบวกกำลังสองของความคลาดเคลื่อนคือ

$$\begin{aligned}
SSE &= (\hat{\varepsilon}'\hat{\varepsilon}) \\
&= (y - \mathbf{X}\hat{\beta})'(y - \mathbf{X}\hat{\beta}) \\
&= (y' - \hat{\beta}'\mathbf{X}')(y - \mathbf{X}\hat{\beta}) \\
&= y'y - y'\mathbf{X}\hat{\beta} - \hat{\beta}'\mathbf{X}'y + \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\beta} \\
&= y'y - 2\hat{\beta}'\mathbf{X}'y + \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\beta}
\end{aligned}$$

การหาค่าน้อยที่สุดของผลรวมกำลังสองของความคลาดเคลื่อนทำได้โดยการหาอนุพันธ์ (differentiate) เทียบกับ β_i ; $i = 0,1,...,p$ (p เป็นจำนวนตัวแปร) แล้วกำหนดให้เท่ากับ 0

$$\frac{\partial(\varepsilon'\varepsilon)}{\partial\beta} = \frac{\partial(y'y - 2\hat{\beta}\mathbf{X}'y + \hat{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\beta})}{\partial\beta} = 0$$

จะได้ว่า $-2\mathbf{X}'y + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\beta} = 0$

$$(\mathbf{X}'\mathbf{X})\hat{\beta} = \mathbf{X}'y$$

ดังนั้น

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'y$$

และเมทริกซ์ความแปรปรวนร่วมของตัวประมาณ β คือ

$$\begin{aligned}
\text{cov}(\beta) &= \text{cov}[(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'y] \\
&= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\,\text{cov}(y)\,\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \\
&= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\sigma^2\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \\
&= \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}
\end{aligned}$$

การประมาณค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยพหุคูณโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดสามัญกรณีที่เมทริกซ์ X มีลำดับชั้นไม่เต็ม

ในกรณีที่ **X** มีลำดับชั้นไม่เต็ม (not full rank) จะมีผลทำให้ไม่สามารถหาเมทริกซ์ผกผันของ **X'X** ได้ ทำให้สมการปกติมีคำตอบได้หลายคำตอบ (no unique) วิธีหนึ่งที่จะหา คำตอบหนึ่งในนั้นได้ คือการหาเมทริกซ์ผกผันทั่วไป (Generalized inverse matrix) ซึ่งในที่นี้แทนด้วย **G** แล้วนำเมทริกซ์ผกผันทั่วไปที่ได้นี้ไปแทนค่าในสมการปกติ ซึ่งวิธีหาเมทริกซ์ผกผันทั่วไปสามารถทำเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

1. ในเมทริกซ์ **A** ซึ่งมีลำดับชั้นเท่า r และหาเมทริกซ์ไม่เป็นเอกฐาน (non-singular) ไมเนอร์ r เรียกว่าเมทริกซ์ **M**

2. หาเมทริกซ์ผกผันของเมทริกซ์ **M** ($\mathbf{M}^{-1}$) และหาเมทริกซ์สลับเปลี่ยน (transpose matrix) ของเมทริกซ์ผกผันของเมทริกซ์ **M** ($(\mathbf{M}^{-1})'$)

3. แทนสมาชิกแต่ละตัวของเมทริกซ์ **A** ด้วยสมาชิกแต่ละตัวของ $(\mathbf{M}^{-1})'$ ในตำแหน่งของเมทริกซ์ **M**

4. แทนสมาชิก (element) ตำแหน่งอื่นๆ ของเมทริกซ์ **A** ด้วย 0

5. หาเมทริกซ์สลับเปลี่ยนของเมทริกซ์ที่ได้ในข้อ 4.

6. เมทริกซ์ที่ได้ในข้อ 5. คือเมทริกซ์ผกผันทั่วไป (**G**) ของเมทริกซ์ **A**

ในกรณีที่เมทริกซ์ **X** คือ เมทริกซ์ของแผนแบบการทดลองและมีลำดับชั้นไม่เต็ม ซึ่งทำให้ **X'X** ซึ่งมี (p - r) แถว ที่มีค่าเป็น 0 และลำดับชั้นของ **X'X** เท่ากับ r สามารถสร้างเมทริกซ์ผกผันทั่วไป (**G**) ของ **X'X** ได้ดังนี้

$$\mathbf{X'X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_1'\mathbf{X}_2 \\ \mathbf{X}_2'\mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_2'\mathbf{X}_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} (\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1)^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

เนื่องจาก $\mathbf{X'}_1\mathbf{X}_1$ เป็นเมทริกซ์แนวทแยงมุมทำให้เมทริกซ์สลับเปลี่ยนของ $\mathbf{X'}_1\mathbf{X}_1$ เท่ากับ $\mathbf{X'}_1\mathbf{X}_1$ โดยที่เมทริกซ์ $\mathbf{X'}_1\mathbf{X}_1$ มีลำดับชั้นเต็ม (full rank) ซึ่งเท่ากับลำดับชั้นของ **X** จะได้ว่า **G** เป็นเมทริกซ์ผกผันทั่วไปของ **X'X** โดยที่ $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1 \quad \mathbf{X}_2]$ เมื่อ $\mathbf{X}_1$ มีลำดับชั้นเต็ม

และ $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1\mathbf{M}$ สำหรับบางเมทริกซ์ $\mathbf{M}$ เพราะสมาชิกแต่ละตัวของ $\mathbf{X}$ คือ -1 0 และ 1 ดังนั้น $\mathbf{M}$ จะมีสมาชิกแต่ละตัวเป็น -1 0 และ 1 และเมื่อหาเมทริกซ์ผกผันทั่วไปได้แล้ว นำมาแทนค่าในสมการปกติดังนี้

$$\begin{aligned}\hat{\beta}^{o} &= \mathbf{GX'}\,y \\ E(\hat{\beta}^{o}) &= \mathbf{G\,X'}\,E(y) \\ &= \mathbf{G\,X'X} \\ &= \mathbf{H}\beta\end{aligned}$$

ค่าคาดหวังของ $\hat{\beta}^{o}$ คือ $\mathbf{H}\beta$ เมื่อ $\mathbf{H} = \mathbf{G\,X'X}$ ซึ่งในที่นี้จะทำให้ $\hat{\beta}^{0}$ เป็นตัวประมาณที่ไม่เอนเอียงของ $\mathbf{H}\beta$ ซึ่งไม่ใช่ของ β และมีค่าความแปรปรวนดังนี้

$$\begin{aligned}V(\beta^{o}) &= V(\mathbf{G\,X'}y) \\ &= \mathbf{G\,X'}\,V(y)\,\mathbf{X\,G'} \\ &= \mathbf{G\,X'X\,G'}\sigma^{2}\end{aligned}$$

โดยที่ค่าคาดหวังของ y สามารถประมาณได้ดังนี้

$$\begin{aligned}E(y) &= y \\ &= \mathbf{X}\hat{\beta}^{0} \\ &= \mathbf{XGX'}\,y\end{aligned}$$

การประมาณค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสอง

$$\begin{aligned}SSE &= (y - \mathbf{X}\hat{\beta}^{0})'(y - \mathbf{X}\hat{\beta}^{0}) \\ &= y'\,(\mathbf{I - XGX'})(\mathbf{I - XGX'})y \\ &= y'(\mathbf{I - XGX'})\,y\end{aligned}$$

เพราะว่า $(\mathbf{I - XGX'})$ เป็นไอเดมโพเทนต์ และเป็นเมทริกซ์สมมาตรเพราะ $\mathbf{XGX'}$ เท่ากับ $\mathbf{G}$ ดังนั้นผลบวกกำลังสองของความคลาดเคลื่อนจึงสามารถหาได้จากสมการปกติที่เกิดจาก β^{0} ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้

$$
\begin{aligned}
\text{SSE} &= \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{XGX}')(\mathbf{I} - \mathbf{XGX}')\,\mathbf{y} \\
&= \mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\,\mathbf{XGX}'\mathbf{y} \\
&= \mathbf{y}'\mathbf{y} - \hat{\beta}^{0}\mathbf{X}'\mathbf{y}
\end{aligned}
$$