Peatükk 6

Mitmese võrdluse meetodid

6.1 Scheffé meetod

6.1.1 t-testi ja mudelite võrdlemiseks mõeldud F-testi võrdlus

Kui testisime t-testi abil hüpoteesi mõne parameetrite hinnatava lineaarkombinatsiooni kohta

$$H_0: \ \boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}(= \mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = 0$$

kasutasime varem (vaata peatükki 3) t-statistikut

$$\begin{aligned} t &= \frac{\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}}{\sqrt{\widehat{\mathrm{D}\left(\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)}}} \\ &= \frac{\mathbf{v}^T\mathbf{P}_{\mathbf{X}}\mathbf{y}}{\sqrt{MSE\mathbf{v}^T\mathbf{P}_{\mathbf{X}}\mathbf{v}}} \overset{H_0}{\sim} t_{df=n-\mathrm{rank}(\mathbf{X})}. \end{aligned}$$

Samas on lisakitsendus $\mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = 0$ vaadeldav kui nõue, et vaatlusvektor ei tohi paikneda vabalt vektorruumis $\mathcal{C}(\mathbf{X})$, vaid peab paiknema vektorruumi $\mathcal{C}(\mathbf{X})$ mingis kindlas alamruumis. Selliseks alamruumiks on näiteks mudelimaatriksi

$$\mathbf{X}_0 := (\mathbf{I} - \mathbf{P}_{\mathbf{P}_{\mathbf{X}}\mathbf{v}})\mathbf{X} \tag{6.1}$$

veergude poolt moodustatud vektorruum $\mathcal{C}(\mathbf{X}_0)$. Nimelt $\mathcal{C}(\mathbf{X}_0) \subseteq \mathcal{C}(\mathbf{X})$, sest

$$\begin{aligned}
(\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X} &= (\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{P_X X} \\
&= (\mathbf{P_X} - \mathbf{P_X v}(\mathbf{v}^T\mathbf{P_X v})^-\mathbf{v}^T\mathbf{P_X})\mathbf{X} \\
&= \mathbf{P_X}(\mathbf{I} - \mathbf{P_X v}(\mathbf{v}^T\mathbf{P_X v})^-\mathbf{v}^T\mathbf{P_X})\mathbf{X} \\
&= \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T(\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X} \\
&= \mathbf{X}\cdot\ldots,
\end{aligned}$$

ja kui $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}(=\mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = 0$ siis ka $\mathrm{E}\mathbf{y} \in \mathcal{C}(\mathbf{X}_0)$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\mathbf{y} &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\
&= \mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\
&= (\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{C}(\mathbf{X}_0)
\end{aligned}$$

sest

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} &= \mathbf{P_X v}\left(\mathbf{v}^T\mathbf{P_X P_X v}\right)^- \mathbf{v}^T\mathbf{P_X X}\boldsymbol{\beta} \\
&= \mathbf{P_X v}\left(\mathbf{v}^T\mathbf{P_X P_X v}\right)^- \mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\
&= 0,
\end{aligned}$$

kuna eelduse kohaselt $\mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = 0$.

Selgub, et pole vahet, kas testime hüpoteesi $H_0 : \boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta} = 0$ kahepoolse t-testi abil või võrdleme F-testi abil mudeleid mudelimaatriksitega $\mathbf{X}$ ja $\mathbf{X}_0$ ($\mathbf{X}_0$ on defineeritud valemiga 6.1). Veendume selles:

$$\begin{aligned}
t^2 &= \frac{\mathbf{y}^T\mathbf{P_X v v}^T\mathbf{P_X y}}{MSE\mathbf{v}^T\mathbf{P_X v}} \\
&= \frac{\mathbf{y}^T\mathbf{P_X v}(\mathbf{v}^T\mathbf{P_X v})^-\mathbf{v}^T\mathbf{P_X y}}{MSE}.
\end{aligned}$$

Kirjutame välja ka mudelite võrdlemiseks mõeldud F-statistiku. Paneme esmalt tähele, et

$$\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0} = (\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X}\left(((\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X})^T(\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X}\right)^-((\mathbf{I}-\mathbf{P}_{\mathbf{P_X v}})\mathbf{X})^T$$

ja seega

$$
\begin{aligned}
F &= \frac{\mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_{X_0}}\right)\mathbf{y}/1}{MSE} \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - (\mathbf{I} - \mathbf{P_{P_Xv}})\mathbf{X}\cdot\ldots\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_X}(\mathbf{I} - \mathbf{P_{P_Xv}})\mathbf{X}\cdot\ldots\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_X}(\mathbf{I} - \mathbf{P_{P_Xv}})(\mathbf{I} - \mathbf{P_{P_Xv}})\mathbf{X}\cdot\ldots\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T(\mathbf{I} - \mathbf{P_{Xv}})\mathbf{P_{X_0}}\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}_0^T\mathbf{P_{X_0}})\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T(\mathbf{I} - \mathbf{P_{P_Xv}})\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_X}(\mathbf{I} - \mathbf{P_{P_Xv}})\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X}\left(\mathbf{I} - \mathbf{I} + \mathbf{P_{P_Xv}}\right)\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\left(\mathbf{P_X}\mathbf{P_{P_Xv}}\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\mathbf{P_X}\left(\mathbf{P_Xv}\left(\mathbf{v}^T\mathbf{P_Xv}\right)^-\mathbf{v}^T\mathbf{P_X}\right)\mathbf{y}/MSE \\
&= \mathbf{y}^T\mathbf{P_Xv}\left(\mathbf{v}^T\mathbf{P_Xv}\right)^-\mathbf{v}^T\mathbf{P_Xy}/MSE \\
&= t^2
\end{aligned}
$$

Seega annab kahepoolne t-test samasuguse tulemuse, kui F-test mis testib lihtsustatud mudelimaatriksi $\mathbf{X}_0$ sobivust.

6.1.2 Scheffé meetod

Vaatame mudelit $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$, kus $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_0|\mathbf{X}_1)$, $\boldsymbol{\beta}^T = (\boldsymbol{\beta}_0^T|\boldsymbol{\beta}_1^T)$. Testime, kas lihtsam mudel $\mathbf{y} = \mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}_0$ on sama hea kui keerukam. Teeme testi, kontrollime, kas

$$\frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_{X_0}})\mathbf{y}/(p - p_0)}{MSE} \sim F_{p-p_0;n-p},$$

kus $p := \operatorname{rank}(\mathbf{X})$ ja $p_0 := \operatorname{rank}(\mathbf{X}_0)$.

Kui teostatud test lükkab ümber nullhüpoteesi, kerkib esile küsimus: Milles ikkagi seisneb erinevus? Millised faktori nivood on teineteisest erinevad? Millised vaid parameetervektorit $\boldsymbol{\beta}_1$-te puudutavad hinnatavad lineaarkombinatsioonid (kontrastid) $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}$ on nullist erinevad?

Viimane väide vajab veidi täpsustustamist: kuna puudutab hinnatav parameeterfunktsioon $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}$ ainult parameetervektori osa $\boldsymbol{\beta}_1$-te? Siis, kui $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}^T\mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0 + \mathbf{v}^T\mathbf{X}_1\boldsymbol{\beta}_1 = \mathbf{v}^T\mathbf{X}_1\boldsymbol{\beta}_1$ ehk kui $\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0 = 0$. Alternatiivselt kirja pandult: $\mathbf{P_Xv} \subset \mathcal{C}(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_{X0}})$ (sest kui $\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0 = 0$ siis ka $\mathbf{P_{X0}v} = 0$ ja $(\mathbf{P_X} - \mathbf{P_{X0}})\mathbf{v} = \mathbf{P_Xv}$).

Loomulikult võime erinevaid parameetervektorit $\boldsymbol{\beta}_1$ puudutavaid lineaarkombinatsioone $\boldsymbol{\lambda}_1^T\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\lambda}_2^T\boldsymbol{\beta}, \ldots$ testida ka olulisuse nivool α tavaliste t-testide abil (nagu tegime seda peatükis 3), kuid sellisel juhul võiksime kõigi tehtud testide peale kokku teha I-liiki viga märksa suurema tõenäosusega kui α. Kui aga soovime, et kõikmõeldavate parameetervektorit $\boldsymbol{\beta}_1$ puudutavate hinnatavate lineaarkombinatsioonide testimisel ei tehtaks I-liiki viga kõigi testide peale kokku suurema tõenäosusega kui α, siis võiksime testimiseks kasutada Scheffé meetodit.

Scheffé meetodi korral kummutame nullhüpoteesi $H_0 : \boldsymbol{\lambda}_i^T\boldsymbol{\beta} = 0$ siis, kui

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\boldsymbol{\lambda}_i\boldsymbol{\lambda}_i{}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0)}{MSE\boldsymbol{\lambda}_i^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\boldsymbol{\lambda}_i} > f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}.$$

Võrdluseks:
kui sooviksime testida vaid ühte hüpoteesi, siis t-statistikut kasutades (t-statistiku ruutu kasutades) jõuaksime järgmise otsustuseeskirjani:

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\boldsymbol{\lambda}_i\boldsymbol{\lambda}_i^T\hat{\boldsymbol{\beta}}}{MSE\boldsymbol{\lambda}_i^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\boldsymbol{\lambda}_i} > f_{1-\alpha;1;n-p}.$$

Kui aga kasutaksime F-testi võrdlemaks mudeleid mudelimaatriksitega $\mathbf{X}$ ja $\mathbf{X}_0$ siis võtaksime vastu alternatiivse hüpoteesi (parameetervektori osa $\boldsymbol{\beta}_1$ on siiski vaja) siis, kui

$$\frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_{\mathbf{X}} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE} > f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}.$$

Järgnev teoreem tõestab, et kui mudelite võrdlemiseks mõeldud F-test võtab vastu alternatiivse hüpoteesi, siis leidub ka selline vaid parameetervektorit $\boldsymbol{\beta}_1$ puudutav hinnatav lineaarkombinatsioon $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}$ mille puhul Scheffé meetod kummutab nulhüpoteesi $H_0 : \boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta} = 0$. Samuti kehtib vastupidine väide — kui Scheffé meetodi abil õnnestub mingi parameetervektorit $\boldsymbol{\beta}_1$ puudutava hinnatava lineaarkombinatsiooni jaoks nullhüpotees kummutada, siis peab ka F-test nullhüpoteesi kummutama ja rikkama mudeli kasuks otsustama.

Teoreem 6.1

$$\begin{aligned}
\frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_{\mathbf{X}} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE} &> f_{1-\alpha;p-p_0;n-p} \qquad (6.2)\\
&\Leftrightarrow\\
\exists \mathbf{v}, \mathbf{v}^T\mathbf{X}_0 = 0,&\\
\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0)}{MSE\mathbf{v}^T\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T\mathbf{v}} &> f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}. \qquad (6.3)
\end{aligned}$$

Tõestuse idee.

Tõestamaks, et kehtib väide

$$a > b \Leftrightarrow \exists \mathbf{x},\ f(\mathbf{x}) > c$$

võime näidata, et

1. $a > b \Rightarrow \exists \mathbf{x},\ f(\mathbf{x}) > c$
2. $a \le b \Rightarrow$ ei leidu sellist vektorit $\mathbf{x}$, mis rahuldaks nõuet $f(\mathbf{x}) > c$
   ehk
   $a \le b \Rightarrow \forall \mathbf{x},\ f(\mathbf{x}) \le c$.

Tõestus (1). Näitame, et kui kehtib (6.2), siis tõepoolest eksisteerib vähemalt üks vektor $\mathbf{v}$, nii et kehtib ka võrratus (6.3). Veendume, et üheks võrratust rahuldavaks vektoriks on vektor

$$\mathbf{v} := (\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}.$$

Paneme tähele, et $\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0 = 0$ (sest $\mathbf{X}_0 \subseteq \mathcal{C}(\mathbf{X})$ ja seega ka $\mathbf{P}_\mathbf{X}\mathbf{X}_0 = \mathbf{X}_0$).

On lihtne veenduda, et $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta} := \mathbf{v}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}^T\mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0 + \mathbf{v}^T\mathbf{X}_1\boldsymbol{\beta}_1$ on hinnatav ja sõltub vaid parameetervektoris $\boldsymbol{\beta}_1$ asuvatest tundmatutest parameetritest.

Paigutades valitud $\mathbf{v}$ väärtuse võrratusse 6.3 ja arvestades, et $\mathbf{P}_\mathbf{X}(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}) = \mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}$, saame

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0)}{MSE \cdot \mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{P}_\mathbf{X}(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}} &> f_{1-\alpha;p-p_0;n-p} \\
\frac{\mathbf{y}^T\mathbf{P}_\mathbf{X}(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{P}_\mathbf{X}\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE \cdot \mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}} &> f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}. \\
\frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE \cdot \mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}} &> f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}. \\
\frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE} &> f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}.
\end{aligned}$$

Viimane avaldis on aga tõene tehtud eelduse (6.2) kohaselt.

Nüüd võtame ette tõestuse teise poole (2) ja näitame, et

$$\begin{aligned}
\frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE} &\le f_{1-\alpha;p-p_0;n-p} \\
\Rightarrow & \\
\forall \mathbf{v}, \mathbf{v}^T\mathbf{X}_0 = 0 : & \\
\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0)}{MSE\mathbf{v}^T\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T\mathbf{v}} &\le f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}.
\end{aligned}$$

Paneme esmalt tähele, et

$$
\begin{aligned}
&\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0)}{\mathbf{v}^T\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T\mathbf{v}} = \\
&= \hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{v}(\mathbf{v}^T\mathbf{P_X}\mathbf{v})^-\mathbf{v}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0) \\
&= \mathbf{y}^T\mathbf{P_X}\mathbf{v}((\mathbf{P_X}\mathbf{v})^T(\mathbf{P_X}\mathbf{v}))^-(\mathbf{P_X}\mathbf{v})^T\mathbf{y}/(p-p_0) \\
&= \mathbf{y}^T\mathbf{P}_{\mathbf{P_X}\mathbf{v}}\mathbf{y}/(p-p_0)
\end{aligned}
$$

Aga $\mathbf{P}_{\mathbf{P_X}\mathbf{v}}$ on ortogonaalne projektor ühemõõtmelisse alamruumi $\mathcal{C}(\mathbf{P_X}\mathbf{v})$, mis on omakorda ruumi $\mathcal{C}(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})$ alamruum, $\mathcal{C}(\mathbf{P_X}\mathbf{v}) \subseteq \mathcal{C}(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})$. Selles veendumiseks märka, et $\mathbf{P}_{\mathbf{P_X}\mathbf{v}} = (\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{P}_{\mathbf{P_X}\mathbf{v}}$ ja järelikult on kõik $\mathbf{P}_{\mathbf{P_X}\mathbf{v}}$ veerud esitatavad maatriksi $\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}$ veergude lineaarkombinatsioonide kaudu.

Aga vaesema mudeli (vähemaid tunnuseid kasutava) mudeli prognooside ruutude summa $\mathbf{y}^T\mathbf{P}_{\mathbf{P_X}\mathbf{v}}\mathbf{y}$ on aga alati väiksem (või samasuur) kui rikkama mudeli prognooside ruutude summa $\mathbf{y}^T(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}$.

Vahepala

Veendume, et vaesema mudeli prognooside dispersioon (või prognooside ruutude summa) on alati väiksem (või samasuur) kui rikkama mudeli prognooside dispersioon (prognooside ruutude summa).

1. Olgu meil mudel $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_0|\mathbf{X}_1)$. Siis $\mathbf{P_X} = (\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}) + \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}$ ja

$$
\begin{aligned}
\mathbf{y}^T\mathbf{P_X}\mathbf{y} &= \mathbf{y}^T(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y} + \mathbf{y}^T\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}\mathbf{y} \\
&\geq \mathbf{y}^T\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}\mathbf{y},
\end{aligned}
$$

sest maatriks $(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})$ on mittenegatiivselt määratud (sest ta on projektor):

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\cdot(\mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}) &= \mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}\mathbf{P_X}+\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0} \\
&= \mathbf{P_X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0},
\end{aligned}
$$

sest

$$
\begin{aligned}
\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}\mathbf{P_X} &= (\mathbf{P_X}\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})^T \\
&= \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}^T = \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}.
\end{aligned}
$$

Seega lihtsama mudeli prognooside ruutude summa on alati samasuur või väiksem, kui keerukama mudeli prognooside ruutude summa (ka siis, kui mõlemad mudelid on õiged!).

2. $\mathbf{P}_{(\mathbf{P}_\mathbf{X}-\mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})} = \mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}$.

Vahepala lõpp.

Seega $\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y} \geq \mathbf{y}^T\mathbf{P}_{\mathbf{P}_\mathbf{X}\mathbf{v}}\mathbf{y}$ ja järelikult

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}/(p-p_0)}{MSE\mathbf{v}^T\mathbf{P}_\mathbf{X}\mathbf{v}} \leq \frac{\mathbf{y}^T(\mathbf{P}_\mathbf{X} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0})\mathbf{y}/(p-p_0)}{MSE}$$

Viimane on aga tehtud eelduse tõttu väiksem kui $f_{1-\alpha;p-p_0;n-p}$.

□

Tõestatud teoreemist järeldub, et tõenäosus teha ühe või enama Scheffé meetodil kontrollitava hüpoteesi puhul I-liiki viga ei ole suurem kui α. Kui tegelikult kehtib nullhüpotees (näiteks faktortunnus pole oluline), siis F-test eksib ja otsustab keerukama mudeli kasuks tõenäosusega α, tõenäosusega $1-\alpha$ jääme nullhüpoteesi juurde. Aga jäädes nullhüpoteesi juurde jääme nullhüpoteesi juurde ka kõikide vaid seda faktortunnust puudutavate hinnatavate parameeterfunktsioonide Scheffé meetodil testimisel.

NB! Kontrollides vaid lõplikku arvu hüpoteese Scheffé meetodil on tegelik I-liiki vea tegemise tõenäosus enamasti märkimisväärselt madalam kui α, ehk sellisel juhul on tegemist üleliia konservatiivse meetodiga.

Näide. Vaatame lihtsat dispersioonanalüüsi mudelit:

$$y_{kj} = \mu + \alpha_k + \varepsilon_{kj},$$

kus $k = 1,2,3,4$ ja $j = 1, \ldots, N$. Soovime testida järgmiseid hüpoteese:

$$\begin{aligned}
\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 &= 0 \quad (\boldsymbol{\lambda}_1^T\boldsymbol{\beta} = 0)\\
\alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_4 &= 0 \quad (\boldsymbol{\lambda}_2^T\boldsymbol{\beta} = 0)\\
\alpha_1 - \alpha_4 &= 0 \quad (\boldsymbol{\lambda}_3^T\boldsymbol{\beta} = 0)
\end{aligned}$$

Variant 1: Kui $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4$ siis kõik testitavad hüpoteesid kehtivad. Seega võime püstitatud hüpoteeside paikapidavust Scheffé meetodil kontrollida järgmiste testide abil:

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\boldsymbol{\lambda}_i\boldsymbol{\lambda}_i^T\hat{\boldsymbol{\beta}}/3}{MSE\boldsymbol{\lambda}_i^T(X^TX)^-\boldsymbol{\lambda}_i} > f_{1-\alpha;3;4N-4}.$$

Veidi võimsama testi saaksime, kui märkaksime, et $\boldsymbol{\lambda}_3 = (\boldsymbol{\lambda}_1 + \boldsymbol{\lambda}_2)/2$. Seega esitavad vaadeldud kolm hüpoteesi lisanõudeid vaid vektorruumi $\mathcal{C}(\mathbf{X})$ kahe ruumimõõtme kohta. Seega võiksime ka vaadeldud hüpoteese kontrollides võtta vastu alternatiivse hüpoteesi siis, kui:

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{\lambda}_i \boldsymbol{\lambda}_i^T \hat{\boldsymbol{\beta}}/2}{MSE \boldsymbol{\lambda}_i^T (X^T X)^- \boldsymbol{\lambda}_i} > f_{1-\alpha;2;4N-4}.$$

Ka taoline otsustuskriteerium tagab, et I-liiki viga kõigi vaadeldavate hüpoteeside peale kokku ei tehta suurema tõenäosusega kui α.

6.1.3 Usalduspiirid Scheffé meetodil

Soovime leida samaaegseid $(1-\alpha)$ usalduspiire kõigile parameetervektorit β_1-te puudutavaile hinnatavaile lineaarkombinatsioonidele. Teisisõnu öeldes — soovime et tõenäosusega $(1-\alpha)$ oleksid õiged (sisaldaksid tegelikku parameetrite lineaarkombinatsiooni väärtust) kõik leitud usalduspiirid.

Samaaegsete usalduspiiride konstrueerimiseks vaatame vektorit $\mathbf{y}_* := \mathbf{y} - \mathbf{X}_1\boldsymbol{\beta}_1$. Võime vektorit $\mathbf{y}_*$ käsitleda kui vaatlusvektorit ja testida F-testi abil mudeleid mudelimaatriksitega $\mathbf{X}$ ja $\mathbf{X}_0$. Kuna vaatlusvektori $\mathbf{y}_*$ jaoks sobib ka lihtsam mudel, siis

$$\frac{\mathbf{y}_*{}^T (\mathbf{P}_{\mathbf{X}} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}) \mathbf{y}_*/(p-p_0)}{MSE} \sim F_{p-p_0;n-p}.$$

Seega

$$P\left(\frac{\mathbf{y}_*{}^T (\mathbf{P}_{\mathbf{X}} - \mathbf{P}_{\mathbf{X}_0}) \mathbf{y}_*/(p-p_0)}{MSE} \le f_{1-\alpha}\right) = 1-\alpha,$$

kus $f_{1-\alpha}$ tähistab $F_{p-p_0;n-p}$-jaotuse $(1-\alpha)$-kvantiili.

Kasutades teoreemi 6.1 ja tähistades $\hat{\boldsymbol{\beta}}_* = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\mathbf{X}^T\mathbf{y}_*$ saame, et

$$P\left(\bigcap_{\{\boldsymbol{\lambda}|\boldsymbol{\lambda}^T = \mathbf{v}^T\mathbf{X};\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0 = 0\}} \left\{\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}_*^T \boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T \hat{\boldsymbol{\beta}}_*/(p-p_0)}{MSE\, \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^- \boldsymbol{\lambda}} \le f_{1-\alpha}\right\}\right) = 1-\alpha.$$

Märkame, et

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\lambda}^T \hat{\boldsymbol{\beta}}_* &= \mathbf{v}^T \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}_* \\
&= \mathbf{v}^T \mathbf{P}_{\mathbf{X}} \mathbf{y}_* \\
&= \mathbf{v}^T \mathbf{P}_{\mathbf{X}} \mathbf{y} - \mathbf{v}^T \mathbf{P}_{\mathbf{X}} \mathbf{X}_1 \boldsymbol{\beta}_1 \\
&= \boldsymbol{\lambda}^T \hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\beta}
\end{aligned}$$

ja seega

$$P\left(\bigcap_{\{\boldsymbol{\lambda}|\boldsymbol{\lambda}^T=\mathbf{v}^T\mathbf{X};\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0=0\}}\left\{\frac{|\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}|^2/(p-p_0)}{MSE\,\boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^-\lambda}\leq f_{1-\alpha}\right\}\right)=1-\alpha.$$

Edasi võime liikuda lihtsate algebraliste teisenduste abil:

$$P\left(\bigcap_{\{\boldsymbol{\lambda}|\boldsymbol{\lambda}^T=\mathbf{v}^T\mathbf{X};\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0=0\}}\left\{|\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}|^2\leq(p-p_0)\widehat{\mathrm{D}\left(\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)}f_{1-\alpha}\right\}\right)=1-\alpha.$$

$$P\left(\bigcap_{\{\boldsymbol{\lambda}|\boldsymbol{\lambda}^T=\mathbf{v}^T\mathbf{X};\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0=0\}}\left\{|\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}|\leq\sqrt{(p-p_0)\widehat{\mathrm{D}\left(\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)}f_{1-\alpha}}\right\}\right)=1-\alpha.$$

$$P\left(\bigcap_{\{\boldsymbol{\lambda}|\boldsymbol{\lambda}^T=\mathbf{v}^T\mathbf{X};\mathbf{v}^T\mathbf{X}_0=0\}}\left\{\lambda^T\hat{\boldsymbol{\beta}}-\sqrt{(p-p_0)\widehat{\mathrm{D}\left(\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)}f_{1-\alpha}}\leq\right.\right.$$

$$\left.\left.\leq\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\beta}\leq\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}+\sqrt{(p-p_0)\widehat{\mathrm{D}\left(\boldsymbol{\lambda}^T\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)}f_{1-\alpha}}\right\}\right)=1-\alpha.$$

Saadud tulemust võib kasutada näiteks regressioonikõverale usaldusriba konstrueerimiseks. Kirjeldagu näiteks vaatlusandmeid järgmine regressioonmudel:

$$y_i=\beta_0+\beta_1x_i+\beta_2{x_i}^2+\varepsilon.$$

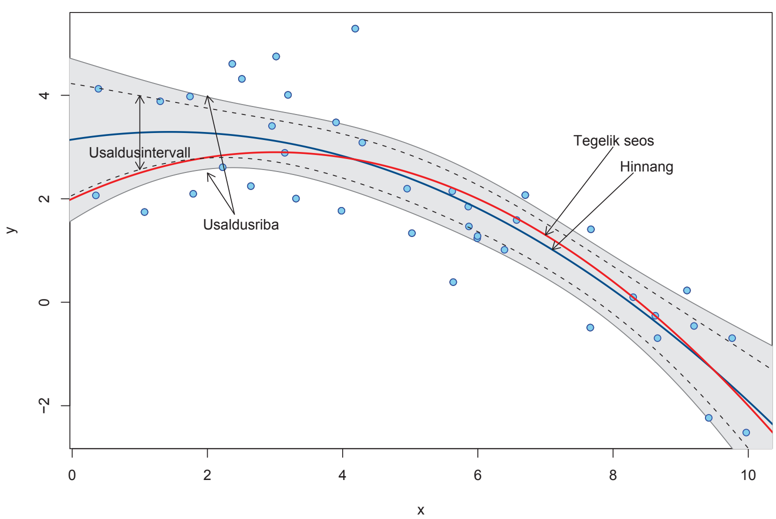
Eeldame, et parameetrite hindamiseks kasutatavas andmestikus leidub vähemalt 3 erinevat tunnuse X väärtust. Sellisel juhul on parameetervektor $\boldsymbol{\beta}^T=(\beta_0;\beta_1;\beta_2)^T$ hinnatav ja $p(=\mathrm{rank}(\mathbf{X}))=3$.

Soovime hinnatud regressioonijoont kujutaval joonisel näidata ka 0,95-usaldusriba — riba, kuhu vahele tegelik regressioonikõver jääb tõenäosusega 0,95 (keskmiselt 95% valimite korral ei kaldu tegelik seost iseloomustav regresioonijoon kasvõi korrakski — mitte ühegi x-i väärtuse korral — joonisele kantud usaldusribast välja).

Usaldusriba konstrueerimiseks tahame leida usaldusintervalle parameetrite lineaarkombinatsioonidele kujul $\beta_0+\beta_1x+\beta_2x^2$. Sealjuures soovime, et tõenäosusega 0,95 saaksime valimi, kus kõigi vaadeldud lineaarkombinatsioonide peale kokku — ükskõik kui palju x-i väärtuseid me ka joonise tegemiseks läbi ei vaataks — ei esineks ühtegi viga (alati kuuluks tegelik parameetrite lineaarkombinatsiooni väärtus väljapakutud vahemikku). Paneme tähele, et antud juhul hõlmavad meid huvitavad lineaarkombinatsioonid kõiki parameetervektori elemente, seega $p_0 = 0$. Soovitud usaldusvahemikud on seega kujul

$$\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x + \hat{\beta}_2 x^2 \pm \sqrt{3\widehat{\mathrm{D}}\left(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x + \hat{\beta}_2 x^2\right) f_{0,95}},$$

Joonis 6.1: Usaldusriba Scheffe meetodil



kus $f_{0,95}$ on $F_{3;n-3}$-jaotuse 0,95-kvantiil. Saadud usaldusriba iseloomustab joonis 6.1, kus on ära toodud nii Scheffé meetodil konstrueeritud 0,95-usaldusriba kui ka iga x-i väärtuse korral leitud „tavalised“ nn punktiviisilised 0,95-usaldusintervallid.