變積分析之數理及其應用於殘缺觀測值之推算

魏 應 澤

一、緒 論

在舉行試驗時，用以表示處理效應之觀測值常受其他與其有密切關係之共軛變值 (Concomitant Variates) 之影響，以致試驗結果之變異性 (Experimental Variability) 增大而無法獲得精確之結論。此時我們可應用變積分析 (Analysis of Covariance) 剔除由共軛變值所導致之變異性，以期能够精確地探知處理效應間眞正之差異。

對於適合變方分析 (Analysis of Variance) 資料之一般化數學模式(Mathematical Model)中介量直線函數 (Linear Function of the Parameters) 之可估性 (Estimability)，其最適直線無偏估值 (The Best Linear Unbiased Estimate) 以及其一般化統計擬說之顯著性測驗 (Testing Significance of a General Statistical Hypothesis) 等問題已有較詳盡之論著，諸如 Scheffé, H. (1959)，Rao, C. R. (1965)，Graybill, F. A. (1961) 等，但對於適合變積分析資料之一般化數學模式中類似諸問題却未盡詳細，尙有硏討之必要。當變積分析之數理硏究闡明淸晰後，對其應用於殘缺觀測值 (Missing Observations) 之推算問題，則不難瞭解。

二、變積分析之數學模式 (Mathematical Model of the Analysis of Covariance)

適合於變積分析資料之數學模式係由迴歸變值，試驗因子效應及試驗機差 (Experimental Error) 等三部份所組成。玆以 z 表示共軛變值 (Concomitant Variate)，以 β 表示某效應介量 (Parameter) 而以 x 表示其係數；當某效應介量出現於某一試驗單位時 x=1 不出現時 x=0, 以 e 表示試驗機差，則試驗結果觀測值 y 可用下列之直線數學模式表示之：

$$y=X\beta+Z\theta+e \qquad (1)$$

式中 y 係 $n\times1$ 之觀測值向量 (Vector)，β 係 $p\times1$ 之效應介量，X 係 $n\times p$ 之效應介量的係數行列 (Matrix)，Z 係 $n\times q$ 之共軛變值行列，θ 係 $q\times1$ 之迴歸係數向量，e 係 $n\times1$ 之試驗機差向量。今設這一直線數學模式滿足 Gauss-Markoff 之前提 (Assumption)，即

$$E(y)=X\beta+Z\theta$$
$$E(e)=0$$
$$E(ee')=\sigma^2 I_n$$

上列諸式中之 E 表示期望 (Expectation) 符號，I_n 係 $n\times n$ 之單位行列 (Unit Matrix)。在一般試驗結果資料中，Z 之階數 (Rank) 大都爲滿階 (Full Rank) 而 X 之階數爲不滿階 (Non-full Rank)。本硏究所用之 X 及 Z 的階數分別設定爲 $\mathrm{rank}(X)=t$ $(t\leq p)$ 及 $\mathrm{rank}(Z)=q$。

現在我們欲求未知介量 β 及 θ 之最適直線無偏估值 (The Best Linear Unbiased Estimate)。因爲 (1) 式滿足 Gauss-Markoff 之前提，我們可利用最小自乘法求之。從 (1) 式得機差平方和 (Error Sum of Squares) 如次：

$$F(\beta,\theta)=(y-X\beta-Z\theta)'(y-X\beta-Z\theta) \qquad (2)$$

將上式分別對 β 及 θ 偏微分並令其結果等於零，則得下列之常規方程式 (Normal Equations)：

$$X'X\beta+X'Z\theta=X'y \qquad (3)$$

$$Z'X\beta+Z'Z\theta=Z'y \qquad (4)$$

因為 X 的階數為不滿階之故 $X'X$ 之逆行列 (Inverse Matrix) 不存在。欲使 $X'X$ 之逆行列存在起見，我們需對 β 另附加條件如 $H\beta=0$，式中 H 係 $m\times p$ 行列，$m\geq p-t$，$t=\text{rank}(X)$，參閱 Scheffé H. (1959) 第一章。例如在逢機區集設計 (Randomized Block Design) 中僅有一種共軛變值的變積分析數學模式為 $y_{ij}=\mu+\alpha_i+\tau_j+\theta z_{ij}+e_{ij}$，一般所採用之條件為 $\Sigma\alpha_i=0$ 及 $\Sigma\tau_j=0$。玆令 $(X'X)^*$ 附加 $H\beta=0$ 之條件後所得的附件逆行列 (Conditional Inverse)。此附件逆行列具有下列性質：

$$(X'X)\,(X'X)^*(X'X)=X'X$$

有關附件逆行列之諸定理，可參閱 Rao, C. R. (1965)第一章。當 X 為滿階行列時，$(X'X)^*=(X'X)^{-1}$。

將 (4) 式減去以 $Z'X(X'X)^*$ 乘 (3) 式等號兩邊後之式子，則得

$$Z'Z\theta-Z'X(X'X)^*X'Z\theta=Z'y-Z'X(X'X)^*X'y$$

令 $M=X(X'X)^*X'$，則上式可寫成如次：

$$Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y \qquad (5)$$

從 (3) 及 (5) 兩式，我們可求出能够使 $F(\beta,\theta)$ 為最小之一組 β 及 θ 的估值。玆因 $I-M$ 係對稱且自乘不變行列 (Symmetric and Idempotent Matrix)，故我們可將 (5) 式寫成如下式：

$$[(I-M)Z]'[(I-M)Z]\theta=[(I-M)Z]'y \qquad (6)$$

查上式仍係屬於常規方程式，所以恒有解。設 $\hat{\theta}_1$ 及 $\hat{\theta}_2$ 兩向量為 (6) 式之兩種解，則我們可證明下式成立：

$$[(I-M)Z]\hat{\theta}_1=[(I-M)Z]\hat{\theta}_2 \qquad (7)$$

因為 $\hat{\theta}_1$ 及 $\hat{\theta}_2$ 均為 (6) 式之解，故

$$[(I-M)Z]'[(I-M)Z]\hat{\theta}_1=[(I-M)Z]'y=[(I-M)Z]'[(I-M)Z]\hat{\theta}_2$$

即 $$[(I-M)Z]'[(I-M)Z]\;(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)=0$$

上式等號兩邊乘以 $(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)'$，則得

$$(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)'\,[(I-M)Z]'[(I-M)Z](\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)=0$$

或 $$[(I-M)Z(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)]'\,[(I-M)Z(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)]=0$$

因上式係一種平方和而現在這一平方和等於零，故其每一元素都必等於零，即

$$(I-M)Z(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)=0$$

故 $$[(I-M)Z]\hat{\theta}_1=[(I-M)Z]\hat{\theta}_2$$

我們將上述之結果歸納於下列之定理。

〔定理一〕 設 $\hat{\theta}_1$ 及 $\hat{\theta}_2$ 兩向量為常規方程式 $[(I-M)Z]'\,[(I-M)Z]\theta=(I-M)Z]'y$ 之兩個解，則 $[(I-M)Z]\hat{\theta}_1=[(I-M)Z]\hat{\theta}_2$。

這個定理說明了一件有趣的事實，就是雖然有無窮多的向量 $\hat{\theta}_1$ 能滿足 (6) 式之常規方程式，但介量 θ 的直線函數 $[(I-M)Z]\theta$ 之函數值却僅有唯一的一個數值而已。

至於最小殘差平方和，我們可將 $\hat{\beta}$ 及 $\hat{\theta}$ 替代 $F(\beta,\theta)$ 式中之 β 及 θ 而獲得如下：

$$\begin{aligned}F(\hat{\beta},\hat{\theta})&=(y-X\hat{\beta}-Z\hat{\theta})'\,(y-X\hat{\beta}-Z\hat{\theta})\\&=y'y-\hat{\beta}'X'y-\hat{\theta}'Z'y \qquad (8)\end{aligned}$$

玆令 $\tilde{\beta}$ 係由直線數學模式 $y=X\beta+e$ 經最小自乘法求得之 β 的估值，即

$$X'X\tilde{\beta}=X'y$$

然而 $$X\tilde{\beta}=X(X'X)^*X'y=My$$

從 (3) 式得

$$\begin{aligned}X\hat{\beta}&=X(X'X)^*X'[y-Z\hat{\theta}]\\&=X\tilde{\beta}-MZ\hat{\theta}\end{aligned}$$

因此，(8)式可寫成如次：

$$
\begin{aligned}
F(\beta,\hat{\theta}) &= y'y-\beta'X'y-\hat{\theta}'Z'y \\
&= y'y-(\bar{\beta}'X'-\hat{\theta}'Z'M)y-\hat{\theta}'Z'y \\
&= (y'y-\bar{\beta}'X'y)-\hat{\theta}'Z'(I-M)y \qquad\qquad (9)
\end{aligned}
$$

從上式可見 (1) 式之最小幾差平方和等於 $y=X\beta+e$ 之最小幾差平方和減去 $y=(I-M)Z\theta+e$ 之廻歸平方和 (Regression Sum of Squares)。

三、可估性及最適直線無偏估值 (Estimability and The Best Linear Unbiased Estimate)

玆為簡單易作說明計，設觀測值 y 之直線數學模式為 $y=X\beta+e$，$E(e)=0$，並設介量 β 之直線函數為 $\lambda'\beta$，式中 λ 係 $p\times1$ 之常數向量。現在我們欲利用觀測值之直線函數 $a'y$ 以估算該介量直線函數 $\lambda'\beta$ 並希望 $a'y$ 為 $\lambda'\beta$ 之無偏估值，即 $E(a'y)=\lambda'\beta$。我們很容易想像得到，對於任何可能的介量直線函數 $\lambda'\beta$ 不一定都有無偏的觀測值直線函數存在。例如設有三個觀測值，其數學模式如次：

$$
\begin{aligned}
y_{11} &= \mu+\beta_1+e_{11} \\
y_{12} &= \mu+\beta_1+e_{12} \\
y_{21} &= \mu+\beta_2+e_{21}
\end{aligned}
$$

式中 $E(e_{ij})=0$。在本例中 $\beta'=(\mu,\beta_1,\beta_2)$。玆設 $\lambda'=(1,0,0)$，則我們不可能找出期望值等於 $\lambda'\beta=\mu$ 之觀測值直線函數。相反地，若 $\lambda'=(0,1,-1)$，則介量函數 $\lambda'\beta=\beta_1-\beta_2$ 之無偏直線估算式為 $y_{11}-y_{21}$，或用效率較高之無偏直線估算式 $\frac{1}{2}(y_{11}+y_{21})-y_{21}$。因此，假如介量函數 $\lambda'\beta$ 沒有無偏估算式存在時，$\lambda'\beta$ 稱為不可估介量函數，相反地，若其無偏估算式存在時，$\lambda'\beta$ 稱為可估介量函數。

〔定義一〕對於某一直線介量函數 $\lambda'\beta$，若能够設立某一種直線觀測值函數 $a'y$ 而使其期望值 (Expected Value) 等於 $\lambda'\beta$ 時，我們稱 $\lambda'\beta$ 為可估直線介量函數，否則 $\lambda'\beta$ 為不可估直線介量函數。

現在欲利用上述定義先討論滿足 Gauss-Markoff 前提之數學模式 $y=X\beta+e$ 之介量函數 $\lambda'\beta$ 的可估性 (Estimability) 以及有關諸定理，然後推論到變積分析之數學模式。

設介量直線函數 $\lambda'\beta$ 為可估介量函數，則根據定義一我們可找出能滿足下列關係的常數向量 a：

$$\lambda'\beta=E(a'y)=E[a'(X\beta+e)]=a'X\beta$$

因此，　$\lambda'=a'X$

故假如 $\lambda'\beta$ 是可估介量函數，則 λ' 必定是 X 行列之橫向量 (Row Vectors) 的直線函數，也就是說 λ' 必須屬於由 X 行列之橫向量所構成的向量空間 (Vector Space) 內。相反地，假如 λ' 屬於X行列之橫向量所構成的向量空間之一向量，則我們可找出能滿足 $\lambda'=a'X$ 之向量 a。因此，對於任何 β，我們有 $\lambda'\beta=a'X\beta=a'E(y)=E(a'y)$ 之關係，故按定義一 $\lambda'\beta$ 是可估介量函數。至此為止，我們已經證明了下列定理：

〔定理二〕對於某一種直線介量函數 $\lambda'\beta$ 成為可估之必要且充分條件是 λ' 必屬於X行列之橫向量所構成的向量空間，以 $\mathfrak{X}_R$ 表示此向量空間，而 X 是數學模式 $y=X\beta+e$ 中 β 之係數行列。換言之，$\lambda'\beta$ 成為可估的必要且充分條件是 $\lambda'=a'X$。

〔系 2•1〕 直線獨立的可估介量函數 (Linearly Independent Estimable Parametric Function) $\lambda'\beta$ 之數目等於 X 行列之階數 (Rank)。所謂直線獨立係指從 $\mathfrak{X}_R$ 向量空間求出的 p 種 (p係X行列之階數) λ' 向量所組成的直線函數 $c_1\lambda_1'+c_2\lambda_2'+\cdots+c_p\lambda_p'$ 除所有係數 c_i's 皆等於零外，該直線函數恒不等於零之意也。

因為 X 行列之階數等於 p，故 $\mathfrak{X}_R$ 含有 p 個直線獨立的根基向量 (Basis)。現因可估介量函數之 λ' 屬於 $\mathfrak{X}_R$ 之故，直線獨立的 λ' 數目必等於 p。

〔系2•2〕任何可估介量函數之直線函數仍是可估的。

設 $\lambda_1'\beta$ 及 $\lambda_2'\beta$ 為兩個可估介量函數，則 λ_1' 及 λ_2' 都屬於 $\mathfrak{X}_R$，因而 $c_1\lambda_1'+c_2\lambda_2'$ 亦必屬於 $\mathfrak{X}_R$。

故 $(c_1\lambda_2'+c_2\lambda_2')\beta$ 是可估的，亦即 $c_1\lambda_1'\beta+c_2\lambda_2'\beta$ 是可估的。一般言之，設 $\lambda_1'\beta, \lambda_2'\beta,\cdots,\lambda_p'\beta$ 爲可估介量函數，則其直線函數 $c_1\lambda_1'\beta+c_2\lambda_2'\beta+\cdots+c_p\lambda_p'\beta$ 亦是可估的。

〔系2·3〕設 $n\times p$ 之 X 行列的階數爲 p，則任何直線介量函數都是可估的。因而 $p\times 1$ 向量 β 之每一元素也都是可估的。

因爲 X 是滿階行列之故，任何 $p\times 1$ 向量都可用 X 的橫向量的直線函數表示之，所以任何直線介量函數都是可估的。在 β 向量中之任一元素 β_i 可以 $u_i'\beta$ 表示之，u_i 係 $p\times 1$ 向量，其元素除第 i 個元素等於1外其他都等於零。現因 u'_i 是屬於 $\mathfrak{X}_R$ 之故，β_i 爲可估介量。

〔系2·4〕直線介量函數 $\lambda'\beta$ 成爲可估之必要且充分條件是 $\lambda'\beta$ 可用觀測值之期望值直線函數表示之。

根據定理二，$\lambda'\beta$ 成爲可估之必要且充分條件是：我們可尋求一向量 a 使 λ' 可用 $a'X$ 表示之，但

$$\lambda'\beta=a'X\beta=a'E(y)=\Sigma a_i E(y_i)$$

所以系 2·4 可成立。

假設某一直線介量函數爲可估的函數，則可能有無窮多的直線觀測值函數之期望值都等於該直線介量函數。在前所舉之例中，$\beta_1-\beta_2$ 之無偏估算式有 $y_{11}-y_{21}$，$\frac{1}{2}(y_{11}+y_{12})-y_{21}$，或 $py_{11}+qy_{12}-y_{21}$；式中 $p+q=1$。因此，我們需要在這無窮多之無偏估算式中挑選具有最小變方 (Variance) 之估算式。

〔定義二〕當可估直線介量函數 $\lambda'\beta$ 之直線無偏估算值 $a'y$ 的變方小於其他任何 $\lambda'\beta$ 之直線無偏估算值的變方時，我們稱 $a'y$ 爲最適直線無偏估算式 (The Best Linear Unbiased Estimator)。

我們從定理二得知直線介量函數 $\lambda'\beta$ 成爲可估的必要且充分條件是 λ' 可用 X 行列之橫向量直線函數表示之，即 $\lambda'=a'X$。在此，我們有一個有趣的疑問：就是我們可否發現以 X 行列之列向量 (Column Vector) 爲直線函數之向量 c 使 $E(c'y)=\lambda'\beta$？假設這種向量存在，則因其爲 X 行列的列向量之直線函數的緣故，我們有 $c=X\rho$ 之關係成立，ρ 係 $p\times 1$ 向量。由於無偏性之要求，下列之關係式必須成立：

$$\lambda=X'c=X'X\rho$$

但因 $\lambda=X'a$ 之故，ρ 必須滿足下式：

$$X'X\rho=\lambda=X'a \qquad\cdots\cdots(10)$$

上式仍屬於常規方程式，所以恒有解。設 ρ_1 及 ρ_2 兩向量爲 (10) 式之兩種解，則 $X\rho_1=X\rho_2$。因而，若 $\lambda'\beta$ 爲可估介量函數，則僅僅有唯一的向量 $c=X\rho$ 能使 $c'y$ 之期望值等於 $\lambda'\beta$。現在我們欲證明 $\lambda'\beta$ 之所有可能直線無偏估算式中以 $c'y$ 之變方爲最小。設 $E(a'y)=\lambda'\beta$，則 $X'a=\lambda$。然而，這一向量 a 可寫成下列之形式：

$$a=c+d=X\rho+d$$

將上式等號兩邊乘以 X'，則得

$$\lambda=X'X\rho+X'd$$

但由 (10) 式得 $X'X\rho=\lambda$，故 $X'd=0$。玆求 $a'y$ 之變方於次：

$$Var(a'y)=Var(c'y)+Var(d'y)+2Cov(c'y, d'y)$$

但　$Cov(c'y, d'y)=\sigma^2c'd=\sigma^2\rho'X'd=0$

故　$Var(a'y)=Var(c'y)+Var(d'y)$

因此，$Var(a'y)\geq Var(c'y)$，其等號成立之條件爲 $d=0$。

由此可見，$\lambda'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $c'y=\rho'X'y$，式中 ρ 係常規方程式 $X'X\rho=\lambda$ 之任一解。

以上所論係先挑選無偏估算式 $c'y$ 以後才證明其有最小變方。Kempthorne, O (1952) 曾在其著書 §6.2 節中敍述求最適直線無偏估值之方法，其步驟雖異，但其結果與本文所求得者相同。設 $a'y$ 爲 $\lambda'\beta$ 之直線無偏估值，則必有 $X'a=\lambda$ 之條件。然而我們要從滿足該條件之所有的直線無偏估值中尋求具有最小變方之估值。$a'y$ 之變方如下：

$$Var(a'y)=\sigma^2a'a$$

現在我們必需在 $X'a=\lambda$ 之條件下求出能使 $a'a$ 爲最小的 a。利用 Lagrange 氏法，我們先構成下列函數：

$$F=a'a-2\rho'(X'a-\lambda)$$

然後將上式對 a 偏微分並令其結果等於零，則得

$$\frac{\partial F}{\partial a}=2a'-2\rho X'=0$$

$$\therefore \qquad a=X\rho$$

但因 $X'a=\lambda$，故得

$$X'X\rho=\lambda$$

此式與前法誘導所得之 (10) 式相同。玆將以上所討論結果歸納於下列之定理：

〔定理三〕可估介量函數 $\lambda'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲唯一的直線觀測值函數 $a'y$，式中向量 a 是 X 行列之列向量直線函數；即 $a=X\rho$ 而 ρ 是常規方程式 $X'X\rho=\lambda$ 之任一解。

〔系3·1〕介量函數 $\lambda'\beta$ 成爲可估的必要且充分條件是能够找出滿足 $X'X\rho=\lambda$ 之向量 ρ。當此向量 ρ 存在時，$\lambda'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\rho'X'y$。

〔系3·2〕可估介量函數 $\lambda'\beta$ 之最適直線無偏估值的變方等於 $\sigma^2\rho'X'X\rho=\sigma^2\rho'\lambda$。兩種可估介量函數 $\lambda_1'\beta$ 及 $\lambda_2'\beta$ 之最適直線無偏估值之變積 (Covariance) 等於 $\sigma^2\rho_1'X'X\rho_2=\sigma^2\rho_1'\lambda_2=\sigma^2\rho_2'\lambda_1$。

從定理三，我們很容易地證明下列之 Gauss-Markoff 定理：

〔定理四〕可估介量函數 $\lambda'\beta$ 之最適直線無偏估算式僅僅有唯一的一種，以 $\lambda'\hat{\beta}$ 表示之，式中 $\hat{\beta}$ 係能够使剩餘殘差平方和 (Residual Sum of Squares) $(y-X\beta)'(y-X\beta)$ 爲最小之任一向量，亦即 $\hat{\beta}$ 係常規方程式 $X'X\beta=X'y$ 之任一解。

證明：從定理三，可估介量函數 $\lambda'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\rho'X'y$，式中 ρ 係常規方程式 $X'X\rho=\lambda$ 之任一解。再者，若 $\hat{\beta}$ 爲常規方程式 $X'X\beta=X'y$ 之任一解，則 $X'X\hat{\beta}=X'y$。因此 $\rho'X'y=\rho'X'X\hat{\beta}=[(X'X)\rho]'\hat{\beta}=\lambda'\hat{\beta}$。Q.E.D.

〔系4·1〕數個可估介量函數之直線結合式的最適直線無偏估算式等於這數個可估介量函數之個別最適直線無偏估算式的同一直線結合式。即設數個可估介量函數之直線結合式爲 $\Sigma c_i\lambda_i'\beta$ 且各 $\lambda_i'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\lambda_i'\hat{\beta}$，則 $\Sigma c_i\lambda'_i\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\Sigma c_i\lambda_i'\hat{\beta}$。

〔系4·2〕假如在直線數學模式 $y=X\beta+e$ 中 $n\times p$ 之 X 行列爲滿階卽 $\text{rank}(X)=p$ 時，則 β 向量內之每一元素的最適直線無偏估算式等於解該數學模式之常規方程式所得 $\hat{\beta}$ 向量之相對應的元素。

綜合以上討論結果，我們可歸納於下列之定理：

〔定理五〕設直線數學模式爲 $y=X\beta+e$，式中 $E(e)=0$，$E(ee')=\sigma^2I$，則該模式之常規方程式 $X'X\beta=X'y$ 與可估介量函數的最適直線無偏估算式之關係如次：

(i) $\lambda'\beta$ 成爲可估的必要且充分條件是能够尋求一個向量 ρ 使下列之關係成立：

$$\lambda'\beta=\rho'X'X\beta \quad \text{或} \quad X'X\rho=\lambda$$

(ii) 若 $\lambda'\beta$ 爲可估介量函數，則其最適直線無偏估算式如下：

$$\lambda'\hat{\beta}=\rho'X'X\hat{\beta}=\rho'X'y$$

式中 $\hat{\beta}$ 爲 $X'X\beta=X'y$ 之任一解。

此定理可解釋如次：介量函數 $\lambda'\beta$ 成爲可估的必要且充分條件爲該函數可用常規方程式 $X'X\beta=X'y$ 等號左邊之直線函數表示之。假如 $\lambda'\beta$ 可如此表示，則其最適直線無偏估算式爲常規方程式等號右邊之同一直線函數。

現在欲利用以上諸定理討論變積分析之數學模式中所含介量函數之可估性以及其最適直線無偏估算式。我們擬先討論僅含有 θ 之直線介量函數 $\lambda'\theta$。(1) 式之變積分析數學模式可寫成如次：

$$y=(X\ Z)\begin{pmatrix}\beta\\ \theta\end{pmatrix}+e$$

而其常規方程式 (3) 及(4) 兩式可合併成爲

$$\begin{pmatrix} X'X & X'Z \\ Z'X & Z'Z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \beta \\ \theta \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} X' \\ Z' \end{pmatrix}y$$

然而根據定理三之系 3·1 直線介量函數 $\lambda'\theta=(0'\ \lambda')\begin{pmatrix} \beta \\ \theta \end{pmatrix}$ 成為可估的必要且充分條件為

$$X'X\pi+X'Z\rho=0$$
$$Z'X\pi+Z'Z\rho=\lambda$$

將上兩式消除 π 後可得

$$Z'(I-M)Z\rho=\lambda$$

因此，假如 $\lambda'\theta$ 爲可估函數，則 λ 可用 $Z'(I-M)Z$ 之列向量的直線函數表示之。另一方面，假如 λ 可用 $Z'(I-M)Z$ 之列向量的直線函數表示，則我們可尋求能够滿足 $Z'(I-M)Z\rho=\lambda$ 之向量 ρ，且觀測値之直線函數 $\rho'Z'(I-M)y$ 的期望値爲 $E[\rho'Z'(I-M)y]=\rho'Z'(I-M)(X\beta+Z\theta)=\rho'Z'(I-M)Z\theta=\lambda'\theta$，故 $\lambda'\theta$ 爲可估介量函數。由此可見，$\lambda'\theta$ 成爲可估的必要且充分條件爲可用 (5) 式之常規方程式$Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 等號左邊之直線函數表示 $\lambda'\theta$。根據 Gauss-Markoff 定理，可估介量函數 $\lambda'\theta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\lambda'\hat{\theta}$；式中 $\hat{\theta}$ 係常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 之任一解。現因 $\lambda'\hat{\theta}$ 有下列關係

$$\lambda'\hat{\theta}=\rho'Z'(I-M)Z\hat{\theta}=\rho'Z'(I-M)y$$

故我們可說 $\lambda'\theta$ 之最適直線無偏估算式爲常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 等號右邊之直線函數。

至於 $\lambda'\hat{\theta}$ 之變方可求之如次：因估算値 $\lambda'\hat{\theta}$ 之誤差爲 $\rho'Z'(I-M)e$ 之故，

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\lambda'\hat{\theta})&=E[\rho'Z'(I-M)ee'(I-M)Z\rho]\\&=\sigma^2\rho'Z'(I-M)Z\rho\\&=\sigma^2\rho'\lambda\end{aligned}$$

玆將以上所得結果歸納於下列之定理：

〔定理六〕在直線數學模式 $y=X\beta+Z\theta+e$ 中 θ 的常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 與可估介量函數 $\lambda'\theta$ 的最適直線無偏估算式之關係如次：

(i) $\lambda'\theta$ 成爲可估的必要且充分條件是能够找出一向量 ρ 滿足下列之關係：

$$\lambda'\theta=\rho'Z'(I-M)Z\theta$$

(ii) 若 $\lambda'\theta$ 爲可估介量函數，則其最適直線無偏估算式如次：

$$\lambda'\hat{\theta}=\rho'Z'(I-M)Z\hat{\theta}=\rho'Z'(I-M)y$$

式中 $\hat{\theta}$ 係常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 之任一解。

(iii) $\lambda'\hat{\theta}$ 之變方爲$\mathrm{Var}(\lambda'\hat{\theta})=\sigma^2\rho'\lambda=\sigma^2\rho'Z'(I-M)Z\rho$

現在我們擬討論直線數學模式 $y=X\beta+Z\theta+e$ 中介量函數 $\mu'\beta$ 之可估性及其最適直線無偏估算式。設 $\mu'\beta$ 爲該數學模式之可估介量函數，則根據定理二這個可估介量函數在數學模式爲 $y=X\beta+e$ 之下仍爲可估的。從定理三之系 3·1 知悉我們可尋求滿足 $X'X\nu=\mu$ 之向量 ν。然而，利用 Gauss-Markoff定理，$\mu'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\mu'\hat{\beta}=\nu'X'X\hat{\beta}$，式中 $\hat{\beta}$ 係數學模式 $y=X\beta+Z\theta+e$ 之常規方程式的任一解，即 (3) 及 (4) 兩式之任一解，或 (3) 及 (5) 兩式之任一解。因此

$$X'X\hat{\beta}=X'(y-Z\hat{\theta})=X'X\bar{\beta}-X'Z\hat{\theta}$$

式中 $\bar{\beta}$ 爲常規方程式 $X'X\beta=X'y$ 之任一解，而 $\hat{\theta}$ 係常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 之任一解。因此，$\mu'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲

$$\begin{aligned}\mu'\hat{\beta}&=\nu'X'X'\bar{\beta}-\nu'X'Z\hat{\theta}\\&=\mu'\bar{\beta}-\nu'X'Z\hat{\theta}\\&=\nu'X'y-\nu'X'Z\hat{\theta}\\&=a'y-a'Z\hat{\theta}\\&=a'y-\Sigma\hat{\theta}_i(a'Z_i)\end{aligned}\tag{12}$$

式中 $\hat{\theta}_i$ 係 $\hat{\theta}$ 向量之第 i 個元素，Z_i 係 Z 行列之第 i 直列向量。由此可知，在 $y=X\beta+Z\theta+e$ 下

之 $\mu'\beta$ 的最適直線無偏估値係在 $y=X\beta+e$ 下之 $\mu'\beta$ 的最適直線無偏估値 $a'y$ 減去 $\hat{\theta}_i$ 和係數向量 a' 與 Z 行列之第 i 直列向量內積 (Inner Product) 之相乘積的和。例如在 $y_{ij}=\mu+\beta_i+\tau_j+e_{ij}$ 下 $\tau_j-\tau_k$ 的最適直線無偏估值爲 $\tilde{\tau}_j-\tilde{\tau}_k=\bar{y}_{.j}-\bar{y}_{.k}$ 而在 $y_{ij}=\mu+\beta_i+\tau_j+\theta_1 Z_{1ij}+\theta_2 Z_{2ij}+e_{ij}$ 下 $\tau_j-\tau_k$ 的最適直線無偏估值爲 $\tilde{\tau}_j-\tilde{\tau}_k=(\bar{y}_{.j}-\bar{y}_{.k})-\hat{\theta}_1(\bar{Z}_{1.j}-\bar{Z}_{1.k})-\hat{\theta}_2(\bar{Z}_{2.j}-\bar{Z}_{2.k})$。

繼之，我們欲求 $\mu'\beta$ 之變方。現因 $E(\nu'X'y-\mu'\beta)=\nu'X'Z\theta$ 之故，$\nu'X'Z\theta$ 爲可估介量函數，從定理六得 $\nu'X'Z\theta$ 之最適直線無偏估值爲 $\nu'X'Z\hat{\theta}$ 而該估值可用常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 等號右邊之直線函數表示之，即

$$\nu'X'Z\hat{\theta}=\eta'Z'(I-M)y$$

式中 $\quad \eta'=\nu'X'Z$

因此，$\mu'\beta$ 之變方可求如次：

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\mu'\beta)&=\mathrm{Var}[\nu'X'y-\eta'Z'(I-M)y]\\&=\mathrm{Var}(\nu'X'y)+\mathrm{Var}(\eta'Z'(I-M)y)-2\mathrm{Cov}(\nu'X'y,\ \eta'Z'(I-M)y)\end{aligned}$$

因 $\quad \mathrm{Cov}(\nu'X'y,\ \eta'Z'(I-M)y)=\sigma^2\eta'Z'(I-M)X\nu=0$

故
$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\mu'\beta)&=\mathrm{Var}(\mu'\bar{\beta})+\mathrm{Var}(\nu'X'Z\hat{\theta})\\&=\mathrm{Var}(a'y)+\mathrm{Var}(a'Z\hat{\theta})\\&=\sigma^2a'a+\mathrm{Var}(a'Z\hat{\theta})\qquad\cdots\cdots(13)\end{aligned}$$

從上式可見在 $y=X\beta+Z\theta+e$ 中 $\mu'\beta$ 之變方等於無共軛變值之數學模式 $y=X\beta+e$ 中 $\mu'\bar{\beta}$ 的變方加上參與共軛變值所導致的變方。

玆將上列所得結果歸納於下列之定理：

〔定理七〕在直線數學模式 $y=X\beta+Z\theta+e$ 中介量函數 $\mu'\beta$ 成爲可估的必要且充分條件是能够找出滿足 $X'X\nu=\mu$ 之向量 ν。然而 $\mu'\beta$ 之最適直線無偏估算式爲 $\mu'\beta=\nu'X'X\beta$，式中 β 爲 $y=X\beta+Z\theta+e$ 之常規方程式的任一解。此估算式可說是 $y=X\beta+e$ 中 $\mu'\beta$ 的最適直線無偏估算式 $a'y$ 減去 $\hat{\theta}_i$ 和向量 a' 與 Z 行列之第 i 直列向量內積之相乘積的和，式中 $\hat{\theta}$ 爲常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)y$ 之任一解。$\mu'\beta$ 之變方如次：

$$\mathrm{Var}(\mu'\beta)=\sigma^2a'a+\mathrm{Var}(a'Z\hat{\theta})$$

四、統計擬說之顯著性測驗 (Testing Significance of Statistical Hypothesis)

在未舉行統計擬說之顯著性測驗以前，我們對於變積分析之數學模式 $y=X\beta+Z\theta+e$ 所設定之前提除了在第二章已申明者外，尚需要有試驗機差 (Experimental Error) e 之分布爲常態 (Normal) 之前提。現在欲要測驗之統計擬說有兩種，分別敍述於次。

(A) 部份試驗因子效應之呈現與否之測驗

玆將變積分析之數學模式中效應成份劃分爲兩部份如下：

$$\begin{aligned}y&=X\beta+Z\theta+e\\&=X_1\beta_1+X_2\beta_2+Z\theta+e\qquad\cdots\cdots(14)\end{aligned}$$

式中 $(X_1,X_2)=X$, β_1 爲 $k\times1$ 向量，β_2 爲 $(p-k)\times1$ 向量。

我們所要測驗之擬說爲 $H_0:\beta_2=0$ 而其相對之擬說爲 $H_1:\beta_2\neq0$。一般所採用之測驗範式係用下列之F值：

$$F=\frac{(\min S.S.H_0-\min S.S.H_1)/(p-k)}{\min. S.S.H_1/(n-p)}\qquad\cdots\cdots(15)$$

式中 $\min. S.S.H_0$ 係在 H_0 下之最小機差平方和而 $\min. S.S.H_1$ 係在 H_1 下之最小機差平方和。在 $H_0:\beta_2=0$ 下之數學模式爲

$$y=X_1\beta_1+Z\theta+e$$

做照 (9) 式我們可得在 H_0 下之最小機差平方和如次：

$$\min. \text{S.S. } H_0 = y'y - \bar{\beta}_1'X_1'y - \theta'Z'(I-M_1)y \cdots\cdots (16)$$

式中 $\bar{\beta}_1$ 係常規方程式 $X_1'X_1\beta_1 = X_1'y$ 之任一解，θ 係常規方程式 $Z'(I-M_1)Z\hat{\theta} = Z'(I-M_1)y$ 之任一解，而 $M_1 = X_1(X_1'X_1)^*X_1'$。再者，因爲在 $H_1: \beta_1 \neq 0$ 下之數學模式

$$y = X_1\beta_1 + X_2\beta_2 + Z\theta + e$$

就是未將效應成份劃分爲兩部份之原來的數學模式，所以，其最小機差平方和由 (9) 式得如次：

$$\min. \text{S.S } H_1 = y'y - \bar{\beta}'X'y - \hat{\theta}'Z'(I-M)y \cdots\cdots (17)$$

式中 $\bar{\beta}$ 及 $\hat{\theta}$ 分別爲常規方程式 $X'X\beta = X'y$ 及 $Z'(I-M)Z\theta = Z'(I-M)y$ 之任一解。

玆因(15)式之F値的分子遵循自由度等於 $(p-k)$ 之 $\sigma^2\chi^2_{(p-k)}$ 分布而其分母遵循自由度等於 $(n-p)$ 之 $\sigma^2\chi^2_{(n-p)}$ 分布，故F值之分布屬於 Snedecor 氏F分布。因此我們可根據顯著機率水準 (Significance Level) 爲 $\alpha\%$ 和自由度爲 $(p-k)$ 及 $(n-p)$ 之理論F值測驗統計擬說 $H_0: \beta_2 = 0$ 之顯著性。

(B) 可估介量函數之顯著性測驗

玆設有 r 個直線獨立的可估介量函數 $\lambda_1'\beta, \lambda_2'\beta, \cdots, \lambda_r'\beta$，則由其組成的向量如下：

$$\Lambda'\beta = \begin{pmatrix} \lambda_1'\beta \\ \lambda_2'\beta \\ \vdots \\ \lambda_p'\beta \end{pmatrix}$$

令 $A'y$ 爲該可估介量函數之最適無偏估算式，則因 A' 之每一橫行屬於 X' 之橫行空間 (Row Space) 又因 r 個可估介量函數爲直線獨立的關係 A' 之橫行向量也必互相獨立，故 A' 之橫行向量構成 X' 之橫行空間的 r 次元副空間 (r-dimensional Subspace)。令 R_1 代表 $r\times n$ 行列，其橫行向量構成上述 r 次元副空間之直交正規根基 (Orthonormal Basis)。玆因 A' 之橫行係 R_1 之橫行的直線函數，故有 $r\times r$ 之B行列滿足 $A' = BR_1$ 之關係。由於 A 及 R_1 之階數 (Rank) 都等於 r 的緣故，B 之階數亦是 r。因此，B是行列式值不等於零之行列 (Non-singular Matrix)。再者，因爲

$$E(BR_1y) = E(A'y) = A'X\beta = \Lambda'\beta$$

故

$$\Lambda' = BR_1X = A'X \cdots\cdots (18)$$

令 R_2 代表 $(p-r)\times n$ 行列，其與 R_1 組成的行列 $\begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \end{pmatrix}$ 構成 X' 之橫行空間的直交正規根基。再令 R_3 代表 $q\times n$ 行列，其橫行構成 Z' 之橫行空間的直交正規根基，又令 R_4 代表 $(n-p-q)\times n$ 行列，其橫行構成 $(n-p-q)$ 次元空間並與 X' 及 Z' 之橫行空間成直交 (Orthogonal)，則

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \end{pmatrix}$$

爲直交行列而利用其所得之變換 (Transformation) $w = R(y - X\beta_0 - Z\theta_0)$ 可寫成下列之三角形型式 (Canonical Form)：

$$w = \begin{pmatrix} w_{(1)} \\ w_{(2)} \\ w_{(3)} \\ w_{(4)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{(1)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \delta_{(2)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \delta_{(3)} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_{(1)} \\ u_{(2)} \\ u_{(3)} \\ u_{(4)} \end{pmatrix} \cdots\cdots (19)$$

式中

$$\delta_{(1)} = R_1X(\beta - \beta_0)$$

$$\delta_{(2)} = R_2X(\beta - \beta_0)$$

$$\delta_{(3)} = R_3Z(\theta - \theta_0)$$

$$\begin{pmatrix} u_{(1)} \\ u_{(2)} \\ u_{(3)} \\ u_{(4)} \end{pmatrix} = Re$$

從 (18) 式之關係得

$$B\delta_{(1)} = BR_1X\beta - BR_1X\beta_0 = \Lambda'\beta - \Lambda'\beta_0 = \Lambda'\beta - c_0$$

因此，由於 B 是行列式值不等於零之行列的緣故，$\Lambda'\beta = c_0$ 之必要且充分條件爲 $\delta_{(1)} = 0$。再者，因

$$\begin{aligned}Bw_{(1)}&=BR_1(y-X\beta_0-Z\theta_0)=BR_1(y-X\beta_0)\\&=A'y-A'X\beta_0\\&=\Lambda'\hat\beta-c_0\end{aligned}$$

故 $Bw_{(1)}$ 爲 $\Lambda'\beta$ 之最適直線無偏估值與擬說設定值 c_0 之差異值。

今我們欲要測驗之統計擬說爲 $H_0:\Lambda'\beta=c_0$。爲了要測驗此擬說起見，我們需要先求 $\Lambda'\beta$ 之最適直線無偏估值的分散行列 (Dispersion Matrix)，以 $Cov(\Lambda'\hat\beta)$ 表示之，則

$$\begin{aligned}Cov(\Lambda'\hat\beta)&=Cov(A'y)=\sigma^2A'A\\&=\sigma^2BR_1R_1'B'=\sigma^2BB'\end{aligned}$$

故 $$\left[\frac{Cov(\Lambda'\hat\beta)}{\sigma^2}\right]^{-1}=(BB')^{-1}$$

又平方和 $w_{(1)}'w_{(1)}$ 之期望值如下：

$$\begin{aligned}E[w_{(1)}'w_{(1)}]&=E[\partial_{(1)}+u_{(1)}]'[\partial_{(1)}+u_{(1)}]\\&=E[u_{(1)}'u_{(1)}]+\partial_{(1)}'\partial_{(1)}\\&=r\sigma^2+(B\partial_{(1)})'(BB')^{-1}(B\partial_{(1)})\\&=r\sigma^2+(\Lambda'\beta-c_0)'\left[\frac{Cov(\Lambda'\hat\beta)}{\sigma^2}\right]^{-1}(\Lambda'\beta-c_0)\end{aligned}\qquad\cdots\cdots(20)$$

再者，平方和 $w_{(1)}'w_{(1)}$ 可改寫成下列之形式：

$$\begin{aligned}w_{(1)}'w_{(1)}&=[R_1(y-X\beta_0-Z\theta_0)]'[R_1(y-X\beta_0-Z\theta_0)]\\&=[R_1(y-X\beta_0)]'[R_1(y-X\beta_0)]\\&=[R_1(y-X\beta_0)]'BB'^{-1}B^{-1}B[R_1(y-X\beta_0)]\\&=[BR_1(y-X\beta_0)]'(BB')^{-1}[BR_1(y-X\beta_0)]\\&=(\Lambda'\hat\beta-c_0)'\left[\frac{Cov(\Lambda'\hat\beta)}{\sigma^2}\right]^{-1}(\Lambda'\hat\beta-c_0)\end{aligned}\qquad\cdots\cdots(21)$$

從 (8) 式可得 σ^2 之無偏估值如下：

$$s_e^2=(y-X\hat\beta-Z\hat\theta)'(y-X\hat\beta-Z\hat\theta)/(n-p-q)\qquad\cdots\cdots(22)$$

因此，欲測驗統計擬說 $H_0:\Lambda'\beta=c_0$ 或 $H_0:\partial_{(1)}=0$ 之顯著性，我們可採用下式行之：

$$\frac{w_{(1)}'w_{(1)}/r}{s_e^2}=\frac{(\Lambda'\hat\beta-c_0)'\left[\frac{Cov(\Lambda'\hat\beta)}{\sigma^2}\right]^{-1}(\Lambda'\hat\beta-c_0)/r}{(y-X\hat\beta-Z\hat\theta)'(y-X\hat\beta-Z\hat\theta)/(n-p-q)}\qquad\cdots\cdots(23)$$

當 $H_0:\Lambda'\beta=c_0$ 屬實時，上式之分布爲 F 分布，其自由度爲 r 與 $(n-p-q)$。

五、應用變積分析原理於推算殘缺觀測值

至少有五十篇以上之論文研究各種不同情況下所產生之殘缺觀測值的推算問題。原始而具有創作性之論文諸如， Allen, F. E. and Wishart, J. (1930), Yates, F. (1933), Bartlett, M. S. (1937) 等等。後來經精細研究而闡明其推算理論的文章諸如 Yates, F. (1936), Delury, D. B. (1946), Quenouille, M. H. (1948), Coons, I. (1957), Wilkinson, G.N. (1958) 等等。

一般試驗結果觀測值之數學模式爲

$$y=X\beta+e=\begin{pmatrix}X_1\\X_2\end{pmatrix}\beta+\begin{pmatrix}e_1\\e_2\end{pmatrix}$$

玆設對應於含有 m 個成份的向量 $X_1\beta$ 之觀測值殘缺，則所要配合的數學模式變成爲 $y_2=X_2\beta+e_2$ 其常規方程式爲 $X_2'X_2\beta=X_2'y_2$，而最小機差平方和爲 $(y_2-X_2\hat\beta)'(y_2-X_1\hat\beta)=y_2'y_2-\hat\beta'X_2'y_2$。

現在欲應用變積分析原理以推算殘缺觀測值。爲了應用變積分析原理，我們需要在原來之數學模式 $y_2=X_2\beta+e_2$ 中參入共軛變值。若在某一試驗單位上之觀測值殘缺，則在該試驗單位上設立一種共軛變值並令其等於－1而在其他試驗單位上均等於零。此種技術係 Bartlett, M.S. (1937)首創。如此我們可

設立下列之變積分析數學模式如次：

$$\begin{pmatrix}0\\ y_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}X_1\\ X_2\end{pmatrix}\beta+\begin{pmatrix}-I_m\\ 0\end{pmatrix}\theta+e$$

或 $$u=X\beta+Z\theta+e \quad\cdots\cdots(24)$$

式中 $Z=\begin{pmatrix}-I_m\\ 0\end{pmatrix}$， I_m 係 $m\times m$ 之單位行列

我們可證明從數學模式 $y_2=X_2\beta+e_2$ 所得之最小殘差平方和 $y_2'y_2-\beta'X_2'y_2$ 與從 (24) 之變積分析數學模式所得之最小殘差平方和相等。應用 (3) 及 (4) 兩式得 (24) 式之常規方程式如下：

$$\begin{pmatrix}X_1'X_1+X_2'X_2 & -X_1'\\ -X_1 & I_m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\beta\\ \theta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}X_2'y_2\\ 0\end{pmatrix}$$

解上列常規方程式則得

$$-X_1\beta+I_m\hat{\theta}=0 \quad 即 \quad \hat{\theta}=X_1\beta \quad\cdots\cdots(25)$$

及 $$X_1'X_1\beta+X_2'X_2\beta+-X_1'\hat{\theta}=X_2'y_2$$

或 $$X_2'X_2\beta=X_2'y_2 \quad\cdots\cdots(26)$$

故 (24) 式之最小殘差平方和如次：

$$\begin{aligned}(y-X\beta-Z\hat{\theta})'(y-X\beta-Z\hat{\theta})&=y'y-\beta'X'y-\hat{\theta}'Z'y\\ &=\begin{pmatrix}0\\ y_2\end{pmatrix}'\begin{pmatrix}0\\ y_2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\beta\\ \hat{\theta}\end{pmatrix}'\begin{pmatrix}X_1 & Z\\ X_2 & \end{pmatrix}'\begin{pmatrix}0\\ y_2\end{pmatrix}\\ &=y_2'y_2-(\beta'\ \hat{\theta}')\begin{pmatrix}X_1' & X_2'\\ -I_m & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ y_2\end{pmatrix}\\ &=y_2'y_2-\beta'X_2'y_2\end{aligned}$$

由上可知：配合數學模式 $y_2=X_2\beta+e_2$ 所得之最小殘差平方和與配合 (24) 式之變積分析數學模式所得之最小殘差平方和相等。在實際應用上，$\hat{\theta}$ 可從常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)u$ 求得之，式中 $M=X(X'X)^*X'$。茲令 $I-M=H$ 並將 H 劃分成如下之四個行列：

$$H=\begin{pmatrix}H_1 & H_2\\ H_2' & H_3\end{pmatrix}, \quad H_1 \text{ 爲 } m\times m \text{ 行列}$$

然而常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)u$ 可寫成如次：

$$H_1\theta=-H_2y_2 \quad\cdots\cdots(27)$$

因此，$\hat{\theta}$ 可解上式而得之。繼之，所需要之推算值 β 可解 $X'X\beta=X'(u-Z\hat{\theta})$ 而得之。我們可獲得 $X\beta=X\bar{\beta}-MZ\hat{\theta}$ 之關係，式中 $X'X\bar{\beta}=X'u$。當 H_1 爲行列式值不等於零之行列 (Non-singular Matrix) 時，我們很容易證明 $\hat{\theta}=X_1\beta=-H_1^{-1}H_2y_2$ 關係成立而 $\hat{\theta}$ 之變方爲 $Var(\hat{\theta})=(H_1^{-1}-I_m)\sigma^2$。

茲舉一例說明殘缺觀測值之推算法於下：設採用逢機區集設計法 (Randomized Block Design) 舉行試驗，參加處理數有 t 個而區集數有 r 個。今假定在第一區集之A處理及第二區集之B處理發生殘缺現像，欲利用變積分析原理來推算這兩個殘缺觀測值，則觀測值 y_{ij} 之數學模式可寫成如次：

$$y_{ij}=\mu+\beta_i+\tau_j+\theta_1Z_{1ij}+\theta_2Z_{2ij}+e_{ij}$$

式中 y_{11} 及 y_{22} 爲殘缺觀測值

$Z_{111}=-1$，$Z_{1ij}=0$ 若 $(ij)\neq(11)$

$Z_{222}=-1$，$Z_{2ij}=0$ 若 $(ij)\neq(22)$

令 R_i 表示第 i 區集之觀測值總計

A表示A處理之觀測值總計

B表示B處理之觀測值總計

G表示整個試驗之觀測值總計

則我們可得下列之變積分析結果表：

<table>
<tr><th rowspan="2">變異原因</th><th colspan="6">平方和及乘積和 (Sum of Squares and Sum of Products)</th></tr>
<tr><th>y^2</th><th>z_1y</th><th>z_2y</th><th>z_1^2</th><th>z_1z_2</th><th>z_2^2</th></tr>
<tr><td>區　集</td><td></td><td>$-\frac{R_1}{t}+\frac{G}{rt}$</td><td>$-\frac{R_2}{t}+\frac{G}{rt}$</td><td>$\frac{1}{t}-\frac{1}{rt}$</td><td>$-\frac{1}{rt}$</td><td>$\frac{1}{t}-\frac{1}{rt}$</td></tr>
<tr><td>處　理</td><td></td><td>$-\frac{A}{r}+\frac{G}{rt}$</td><td>$-\frac{B}{r}+\frac{G}{rt}$</td><td>$\frac{1}{r}-\frac{1}{rt}$</td><td>$-\frac{1}{rt}$</td><td>$\frac{1}{r}-\frac{1}{rt}$</td></tr>
<tr><td>機　差</td><td></td><td>$\frac{R_1}{t}+\frac{A}{r}-\frac{G}{rt}$</td><td>$\frac{R_2}{t}+\frac{B}{r}-\frac{G}{rt}$</td><td>$\frac{(r-1)(t-1)}{rt}$</td><td>$\frac{1}{rt}$</td><td>$\frac{(r-1)(t-1)}{rt}$</td></tr>
<tr><td>總　計</td><td></td><td>$\frac{G}{rt}$</td><td>$\frac{G}{rt}$</td><td>$1-\frac{1}{rt}$</td><td>$-\frac{1}{rt}$</td><td>$1-\frac{1}{rt}$</td></tr>
</table>

常規方程式 $Z'(I-M)Z\theta=Z'(I-M)u$ 或即 (27) 式 $H_1\theta=-H_2y_2$ 就是將上表中機差平方和及乘積和排列而成如下：

$$\begin{pmatrix} \frac{(r-1)(t-1)}{rt} & \frac{1}{rt} \\ \frac{1}{rt} & \frac{(r-1)(t-1)}{rt} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{R_1}{t}+\frac{A}{r}-\frac{G}{rt} \\ \frac{R_2}{t}+\frac{B}{r}-\frac{G}{rt} \end{pmatrix}$$

令

$$\begin{pmatrix} \frac{(r-1)(t-1)}{rt} & \frac{1}{rt} \\ \frac{1}{rt} & \frac{(r-1)(t-1)}{rt} \end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{1} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}$$

則殘缺觀測値之推算值 $\hat{y}_{11}=\hat{\theta}_1$ 及 $\hat{y}_{22}=\hat{\theta}_2$ 分別爲

$$\hat{y}_{11}=C_{11}\left(\frac{R_1}{t}+\frac{A}{r}-\frac{G}{rt}\right)+C_{12}\left(\frac{R_2}{t}+\frac{B}{r}-\frac{G}{rt}\right)$$

$$\hat{y}_{22}=C_{21}\left(\frac{R_1}{t}+\frac{A}{r}-\frac{G}{rt}\right)+C_{22}\left(\frac{R_2}{t}+\frac{B}{r}-\frac{G}{rt}\right)$$

假若該試驗僅有一個觀測值殘缺，譬如 y_{11} 殘缺，則其推算值從上列變積分析表可得如下：

$$\hat{y}_{11}=\frac{\frac{R_1}{t}+\frac{A}{r}-\frac{G}{rt}}{\frac{(r-1)(t-1)}{rt}}=\frac{rR_1+tA-G}{(r-1)(t-1)}$$

上式與一般常用之參考書上所列公式完全相一致。至於統計擬說之測驗方法仍可利用前章所論方法進行，在此不再多贅。

六、參考文獻

1. Allen, F.E. and Wishart, J. A method of estimating the yield of a missing plot in field experimental work. Journal of Agriculture Science 20:399-406, 1930.
2. Bartlett, M.S. Some examples of statistical methods of research in agriculture and applied biology. Journal of Royal Statistical Society, Series B, 4:137~170, 1937.
3. Coons, I. The analysis of covariance as a missing plot technique. Biometrics 13: 387~405, 1957.
4. Delury, D.B. The analysis of Latin squares when some observations are missing. Journal of American Statistical Association 41: 370~389, 1946.
5. Graybill, F.A. Introduction to Linear Statistical Models, Volume I. McGraw-Hill, New York. 1961.
6. Kempthorne, O. The Design and Analysis of Experiments. Wiley, New York. 1952.
7. Quenouille, M, H. The analysis of covariance and non-orthogonal comparisons. Biometrics 4: 240~246, 1948.

8. Rao, C.R. Linear Statistical Inference and its Application. Wiley, New York. 1965.
9. Scheffe, H. The Analysis of Variance. Wiley, New York. 1959.
10. Wilkinson, G.N. Estimation of missing values for the analysis of incomplete data. Biometrics 14:257~286, 1958.
11. Wilkinson, G.N. The analysis of variance and derivation of standard errors for incomplete data. Biometrics 14: 360-384, 1958.
12. Yates, F. The analysis of replicated experiments when the field results are incomplete. The Empire Journal of Eperimental Agriculture 1:129-142, 1933.
13. Yates, F. Incomplete Latin squares. Journal of Agriculture Science 26:301-315, 1936.

Mathematics of Analysis of Covariance and its Application to the Estimation of Missing Observations

By

Ing-Tzer Wey

Summary

Some theorems are derived for calculating the best linear unbiased estimator of any estimable function of the parameters in a mathematical model of the analysis of covariance. Two expressions are also given for the F-values required respectively, in testing a subhypothesis and a general linear hypothesis. A brief consideration of the application of the analysis of covariance technique to the case of missing observations is presented.