Στατιστικοί Έλεγχοι Υποθέσεων στο Γραμμικό Μικτό Μοντέλο

Δημήτριος Ρωσσικόπουλος

Εργαστήριο Γεωδαιτικών Μεθόδων και Δορυφορικών Εφαρμογών
Τομέας Γεωδαισίας και Τοπογραφίας, Πολυτεχνική Σχολή, ΤΑΤΜ - ΑΠΘ.

Περίληψη: Στην εργασία αυτή αναλύεται το ζήτημα του ελέγχου των στατιστικών υποθέσεων που αναφέρονται στις παραμέτρους των σταθερών καθώς και των τυχαίων επιδράσεων των γραμμικών μικτών μοντέλων. Έμφαση δίνεται στην περίπτωση που εκτός από την εκτίμηση και των έλεγχο των αγνώστων παραμέτρων, προκύπτει και το πρόβλημα της εκτίμησης και του ελέγχου των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς. Στην περίπτωση αυτή και μάλιστα όταν οι βαθμοί ελευθερίας είναι μικροί, εμφανίζεται το πρόβλημα υπολογισμού των βαθμών ελευθερίας των κατανομών που χρησιμοποιούνται στους στατιστικούς αυτούς ελέγχους, τόσο των σταθερών όσο και των τυχαίων επιδράσεων. Αναλύεται επίσης και το πρόβλημα της αξιολόγησης των παρατηρήσεων χρησιμοποιώντας τις τεχνικές του ελέγχου των ακραίων τιμών, που στην περίπτωση των μικτών μοντέλων παρουσιάζει ιδιαίτερες δυσκολίες.

Λέξεις κλειδιά: Μικτά γραμμικά μοντέλα, στατιστικοί έλεγχοι υποθέσεων, εκτίμηση των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς, βαθμοί ελευθερίας.

Abstract: The matter of the statistical hypothesis testing, referred to the parameters of fixed and random effects of a linear mixed model, is analyzed in this article. Emphasis is given to the case in which the problem of variance component estimation and testing arises, in addition to the estimation and testing of unknown parameters. In this case, especially when the degrees of freedom are small, the estimation problem of degrees of freedom of the distributions, used in statistical tests, appears. The problem of observation assessments, using the statistical methods for the detection of outliers, is also analyzed. In the case of mixed models, the application of these methods involves particular difficulties especially in its interpretation.

Keywords: Mixed linear models, hypothesis testing, variance component estimation, degrees of freedom, residual analysis.

1. Εισαγωγή

Λέγοντας γραμμικό μικτό μοντέλο στη στατιστική εννοούμε ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων που περιέχει ως άγνωστες σταθερών επιδράσεων (ντετερμινιστικές) παραμέτρους καθώς και τυχαίων επιδράσεων (στοχαστικές ή τυχαίες) παραμέτρους, για τις οποίες θεωρείται ότι ακολουθούν την κανονική κατανομή με προσδοκία μηδέν. Τα μοντέλα αυτά αποτελούν γενίκευση των μεθόδων ανάλυσης της μεταβλητότητας (ANOVA), ανάλυσης κυρίων συνιστωσών, καθώς και των μεθόδων γραμμικής παλινδρόμησης. Είναι χρήσιμα δε σε ένα ευρύ φάσμα επιστημονικών κλάδων, στο σύνολο των επιστημών που βασίζονται στην παρατήρηση και στη μέτρηση ή που απαιτούν μεθόδους για την αξιολόγηση των αβεβαιοτήτων των μετρήσεων, όπως π.χ. στη φυσική, στη βιολογία, στη φαρμακευτική, στις οικονομικές και ιατρικές γενικότερα επιστήμες, στη διακρίβωση οργάνων και συστημάτων μετρήσεων, στη δημιουργία διαστημάτων ανοχής σε βιομηχανικές εφαρμογές και γενικότερα σε εργαστηριακές συγκρίσεις στον τομέα της μετρολογίας, στην ανάλυση χωρικών δεδομένων, ταξινομημένων και κατηγοριοποιημένων δεδομένων, καθώς και δεδομένων που προκύπτουν από διαχρονικές και επαναλαμβανόμενες μετρήσεις όπως π.χ. στη γεωδαισία, στην τοπογραφία και στη φωτογραμμετρία, κλπ.

Την έννοια των τυχαίων επιδράσεων την εισήγαγε ο Ronald Fisher για να μελετήσει τις συσχετίσεις των διαφόρων χαρακτηριστικών μεταξύ συγγενών ανθρώπων ενός πληθυσμού (Fisher, 1918, βλ. π.χ. Ρωσσικόπουλος, 2015). Στη δεκαετία του 1950, ο Charles Roy Henderson διεύρυνε το γραμμικό μοντέλο Gauss-Markov ώστε να συμπεριλάβει σ' αυτό και τις τυχαίες επιδράσεις και έδωσε τη βέλτιστη ανεπηρέαστη γραμμική εκτίμηση (BLUE) των σταθερών επιδράσεων και τη βέλτιστη ανεπηρέαστη γραμμική πρόβλεψη (BLUP) των τυχαίων επιδράσεων (Henderson, 1953, Henderson at al., 1959). Στη συνέχεια, το μικτό γραμμικό μοντέλο αποτέλεσε σημαντικό τμήμα της στατιστικής έρευνας, κυρίως στην κατεύθυνση των μεθόδους εκτίμησης, όπως π.χ. με εφαρμογές των Μπεϋζιανών εκτιμήσεων ή των εκτιμήσεων μέγιστης πιθανοφάνειας, καθώς και σε περιπτώσεις όπως των μη γραμμικών μικτών μοντέλων, ή των μικτών μοντέλων με ελλιπή δεδομένα, κλπ. (βλ. π.χ. McLean et all., 1991, Breslow and Clayton, 1993, Witkovsky, 2012).

Παρά το γεγονός ότι τα γραμμικά μικτά μοντέλα και οι μέθοδοι για τη στατιστική συμπερασματολογία που βασίζονται σε αυτά έχουν αναπτυχθεί και χρησιμοποιούνται εδώ και πάρα πολλά χρόνια από τους ερευνητές στους διάφορους τομείς των επιστημών τους, φαίνεται ότι κάποια παρεξήγηση των αρχών που διέπουν την εφαρμογή τους ή η αγνόηση κάποιων λεπτομερειών στις χρησιμοποιούμενες τεχνικές μπορούν να οδηγήσουν σε μη σωστή χρήση των εφαρμοζόμενων μεθόδων και αλγορίθμων. Επιπλέον, εξακολουθούν να υπάρχουν κάποια ανοιχτά θεωρητικά προβλήματα, όπως π.χ. οι μέθοδοι για τον έλεγχο υποθέσεων και την κατασκευή διαστημάτων εμπιστοσύνης για τις τυχαίες επιδράσεις και τις εκτιμήσεις των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς, ένα θέμα άμεσα συνδεδεμένο με τα μικτά μοντέλα, ή ο έλεγχος των λεγόμενων υπολοίπων καθώς δεν μπορούν να διαχωριστούν εύκολα και να ελεγχθούν χωριστά τα σφάλματα των παρατηρήσεων από τις άλλες στοχαστικές παραμέτρους.

Ειδική περίπτωση των μικτών μοντέλων αποτελεί η γνωστή στις γεωδαιτικές εφαρμογές μέθοδος με τον όρο σημειακή προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων, απόδοση στα ελληνικά του όρου Collocation. Στα μοντέλα αυτά της σημειακής προσαρμογής οι στοχαστικές παράμετροι δεν είναι κάποιες τυχαίες μεταβλητές, αλλά οι τιμές στοχαστικών συναρτήσεων. Αντίστοιχα με τις τυχαίες μεταβλητές, οι στοχαστικές συναρτήσεις είναι ένα σύνολο από "δειγματικές" συναρτήσεις που οι εμφανίσεις της κάθε μιας κατά τις επαναλήψεις ενός πειράματος διέπονται από ορισμένους νόμους των πιθανοτήτων (Δερμάνης, 1987). Η αρχική ιδέα ξεκίνησε από την εφαρμογή στοχαστικών τεχνικών σε προβλήματα πρόγνωσης σε συνδυασμό με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων που αναπτύχθηκαν κατά τον δεύτερο παγκόσμιο πόλεμο, πριν από την εργασία του Henderson, ταυτόχρονα και ανεξάρτητα από τους δύο διάσημους μαθηματικούς, τον Αμερικανό Norbert Wiener και τον Ρώσο Andrey Kolmogorov.

Με τον αλγόριθμο της σημειακής προσαρμογής, εκτός από το πρόβλημα της ανάλυσης δεδομένων που σχετίζονται με το γήινο πεδίο βαρύτητας καλύπτεται και το πρόβλημα της παρεμβολής και της πρόγνωσης νέων μεγεθών που σχετίζονται με το γήινο πεδίο βαρύτητας, από ήδη γνωστά μεγέθη. Πέρα όμως από την εφαρμογή του σε προβλήματα σχετικά με το πεδίο βαρύτητας, ο αλγόριθμος αυτός μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε άλλα επιστημονικά προβλήματα, για την ανάλυση παρατηρήσεων που εξαρτώνται από μεγέθη που σχετίζονται με μια άγνωστη συνάρτηση, όπως για παράδειγμα μεγέθη που σχετίζονται με την άγνωστη συνάρτηση που περιγράφει τις κινήσεις των σημείων ενός γεωδαιτικού δικτύου εξαιτίας τεκτονικών διεργασιών ή τις διαχρονικές μεταβολές των τιμών του πεδίου βαρύτητας. Εφαρμογές των στατιστικών υποθέσεων σε σχετικά γεωδαιτικά προβλήματα δόθηκαν από τους Wei (1987), Schaffrin (1987, 1988), Krakiwsky and Biacs (1990), Schaffrin and Bock (1994) και Dermanis and Rossikopoulos (1997).

Ο κύριος στόχος της εργασίας αυτής είναι να παρουσιάσει καταρχάς μια σύντομη επισκόπηση των μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση των διαστημάτων εμπιστοσύνης των αγνώστων παραμέτρων και τον έλεγχο στατιστικών υποθέσεων, που αναφέρονται σε γραμμικές συναρτήσεις των σταθερών επιδράσεων ή των σταθερών και τυχαίων επιδράσεων ταυτόχρονα, ή των τυχαίων επιδράσεων, στα γραμμικά μικτά μοντέλα. Έμφαση δίνεται στην περίπτωση που εκτός από τις άγνωστες παραμέτρους των σταθερών και τυχαίων επιδράσεων, προκύπτει και το πρόβλημα της εκτίμησης των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς. Τότε, και μάλιστα όταν οι βαθμοί ελευθερίας είναι μικροί, προκύπτει το πρόβλημα υπολογισμού των βαθμών ελευθερίας των κατανομών που χρησιμοποιούνται στους στατιστικούς ελέγχους, τόσο των σταθερών όσο και των τυχαίων επιδράσεων, οι οποίοι μάλιστα είναι συνδεδεμένοι με τους ελέγχους των συνιστωσών των μεταβλητοτήτων αναφοράς (βλ. π.χ. McLean and Sanders, 1988, Elston, 1998, You et all., 2016).

2. Το γραμμικό μικτό μοντέλο

Το γραμμικό μικτό μοντέλο έχει τη μορφή

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\,\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{1}$$

όπου $\mathbf{y}$ το $n \times 1$ διάνυσμα των παρατηρήσεων, $\boldsymbol{\beta}$ το $r \times 1$ διάνυσμα των σταθερών επιδράσεων, $\mathbf{u}$ το $q \times 1$ διάνυσμα των τυχαίων επιδράσεων ($E\{\mathbf{u}\} = \mathbf{0}$) που συνοδεύονται από τον πίνακα των συμμεταβλητοτήτων $\mathbf{K}$ και $\boldsymbol{\varepsilon}$ το $n \times 1$ διάνυσμα των τυχαίων σφαλμάτων ($E\{\boldsymbol{\varepsilon}\} = \mathbf{0}$) που συνοδεύονται από τον πίνακα των συμμεταβλητοτήτων $\mathbf{Q}$. Ο $n \times r$ πίνακας $\mathbf{X}$ και ο $n \times q$ πίνακας $\mathbf{Z}$ είναι οι γνωστοί πίνακες των συντελεστών των αγνώστων παραμέτρων.

Αν ονομάσουμε $\mathbf{v} = \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}$ το στοχαστικό μέρος των εξισώσεων των παρατηρήσεων, ή αλλιώς το $n \times 1$ διάνυσμα των ολικών υπολοίπων, ο πίνακας των συμμεταβλητοτήτων τους είναι $\mathbf{M} = \mathbf{Z}\mathbf{K}\,\mathbf{Z}^T + \mathbf{Q}$ και το σύστημα των παραπάνω εξισώσεων γράφεται

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{v} \tag{2}$$

Η βέλτιστη γραμμική ανεπηρέαστη εκτίμηση (Best Linear Unbiased Estimation, BLUE) των ντετερμινιστικών παραμέτρων $\boldsymbol{\beta}$ δίνεται από τη σχέση

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{y} \tag{3}$$

η οποία, αν θεωρήσουμε ότι οι τυχαίες παράμετροι u_i και τα σφάλματα ε_i ακολουθούν την κανονική κατανομή, ταυτίζεται με το κριτήριο των ελαχίστων τετραγώνων

$$\mathbf{v}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{v} = \mathbf{u}^T\mathbf{K}^{-1}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}^T\mathbf{Q}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon} = \min. \tag{4}$$

Η βέλτιστη ανεπηρέαστη γραμμική πρόγνωση (Best Linear Unbiased Prediction, BLUP) των τυχαίων (ή στοχαστικών) παραμέτρων $\mathbf{u}$ προκύπτει ότι είναι

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{u}} &= \mathbf{K}\mathbf{Z}^T\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{K}\mathbf{Z}^T(\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T + \mathbf{Q})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ &= (\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{K}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})\end{aligned} \tag{5}$$

καθώς εύκολα αποδεικνύεται ότι $\mathbf{K}\mathbf{Z}^T(\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T + \mathbf{Q})^{-1} = (\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{K}^{-1})^{-1}\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}$, ενώ η βέλτιστη ανεπηρέαστη γραμμική πρόγνωση των σφαλμάτων των παρατηρήσεων είναι

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Q}\,\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{Q}\,(\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T + \mathbf{Q})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{Z}\,\hat{\mathbf{u}} \tag{6}$$

Οι πίνακες των συντελεστών των συμμεταβλητοτήτων των εκτιμήσεων των παραμέτρων $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, $\hat{\mathbf{u}}$ και $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$, δίνονται από τις σχέσεις

$$\mathbf{Q}_{\hat{\beta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-} = \left[(\mathbf{X}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{X}) - (\mathbf{X}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z})(\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z}+\mathbf{K}^{-1})^{-1}(\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{X})\right]^{-}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}_{\hat{u}} &= \mathbf{K}\ \mathbf{Z}^T\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{M}-\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T)\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Z}\ \mathbf{K} = \\ &= \mathbf{K}\ \mathbf{Z}^T\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\ \mathbf{Z}\ \mathbf{K} = \mathbf{K}\ \mathbf{W}_{uu}\ \mathbf{K} = \\ &= (\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z}+\mathbf{K}^{-1})^{-1}\left[\mathbf{I}+(\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{X})\mathbf{Q}_{\hat{\beta}}(\mathbf{X}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z})\,(\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z}+\mathbf{K}^{-1})^{-1}\right]\end{aligned}$$

$$\mathbf{Q}_{\hat{\beta}\hat{u}} = -\mathbf{Q}_{\hat{\beta}}(\mathbf{X}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z})\,(\mathbf{Z}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Z}+\mathbf{K}^{-1})^{-1} \tag{7}$$

και

$$\mathbf{Q}_{\hat{\varepsilon}} = \mathbf{Q}\ \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{M}-\mathbf{X}\ (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T)\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q} = \mathbf{Q}\ \mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\ \mathbf{Q}$$

όπου $\mathbf{W}_{uu} = \mathbf{Z}^T\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\ \mathbf{Z}$ και ο πίνακας $\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}$ ορίζεται από τη σχέση $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{M}\,\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\ \mathbf{v}$ και δίνεται για το γενικό γραμμικό μοντέλο $\mathbf{y} = \mathbf{X}\,\boldsymbol{\beta}+\mathbf{v}$, $\mathbf{v}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{v} = \min$.

$$\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon} = \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1} \tag{8}$$

Στα γραμμικά μικτά μοντέλα, εκτός από την εκτίμηση των αγνώστων παραμέτρων $\boldsymbol{\beta}$, παίζει σημαντικό ρόλο και η εκτίμηση των συνιστωσών των μεταβλητοτήτων αναφοράς των πινάκων συμμεταβλητοτήτων $\mathbf{Q}$ και $\mathbf{K}$. Με την εφαρμογή μεθόδων εκτίμησης των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς, εκτιμάται η συμβολή της κάθε τυχαίας επίδραση στη μεταβλητότητα της κάθε παρατήρησης καθώς και η σημαντικότητάς της. Αυτή η διαδικασία είναι ιδιαίτερα σημαντική και κύρια στην ανάλυση των μικτών μοντέλων, καθώς μπορεί κανείς να προσδιορίσει που πρέπει να εστιάσει την προσοχή του προκειμένου να περιγραφεί σωστά η συμπεριφορά των τυχαίων παραμέτρων και να επιλεγεί σωστά ο πίνακας βάρους των τιμών των παρατηρήσεων.

3. Οι συνιστώσες της μεταβλητότητας αναφοράς

Το πρόβλημα της εκτίμησης των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς περιγράφηκε για πρώτη φορά στην πιο απλοποιημένη του μορφή από τον γερμανό γεωδαίτη F. R. Helmert στο βιβλίο του *Die Ausgleichungsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadrate* που εκδόθηκε το 1907, όπου και ανέπτυξε μια μέθοδο υπολογισμού των βαρών ασυσχέτιστων μεταξύ τους παρατηρήσεων βασισμένη στη μέθοδο της μέγιστης πιθανοφάνειας. Η πρωτοποριακή αυτή εργασία του Helmert δυστυχώς αγνοήθηκε στη σχετική βιβλιογραφία και έτσι, ορόσημο στην ιστορία του προβλήματος αυτού θεωρείται η εργασία του R. Fisher που δημοσίευσε το 1918, *The correlation between relatives on the supposition of Mendelian inheritance*, στην οποία χρησιμοποιήθηκαν για πρώτη φορά οι όροι *variance* (*με-*

ταβλητότητα) και *analysis of variance* (*ανάλυση μεταβλητότητας*) και τέθηκε το θέμα της εκτίμησης των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς, οι οποίες ονομάζονται *components of variation*. Ο όρος *components of variance* εμφανίστηκε για πρώτη φορά το 1939 στην εργασία *The estimation of components of variance* του H. Daniels.

Αν υποθέσουμε ότι έχουμε m διαφορετικές επιδράσεις στην τελική ακρίβεια των παρατηρήσεων, ο πίνακας Σ των μεταβλητοτήτων και συμμεταβλητοτήτων των παρατηρήσεων γράφεται

$$E\{\mathbf{v}\mathbf{v}^T\} = \mathbf{\Sigma} = \sigma_1^2\mathbf{V}_1 + \sigma_2^2\mathbf{V}_2 + \ldots + \sigma_m^2\mathbf{V}_m \tag{9}$$

όπου $\sigma_i^2, i = 1,2,\ldots,m$, είναι οι άγνωστες συνιστώσες (οι μεταβλητότητες αναφοράς της κάθε επίδρασης) και $\mathbf{V}_i$ είναι οι γνωστοί πίνακες των συντελεστών βάρους.

Αντίστοιχα με τη βέλτιστη γραμμική ανεπηρέαστη εκτίμηση των αγνώστων παραμέτρων, στην περίπτωση των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς έχουν προταθεί διάφορα κριτήρια βελτιστοποίησης που οδηγούν π.χ. στη *βέλτιστη τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση* (Best Quadratic Unbiased Estimator - BQUE, Drygas 1977), ή στην *ανεπηρέαστη τετραγωνική εκτίμηση ελάχιστης μεταβλητότητας* (Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimator - MIVQUE, Townsend 1968, Harville 1969 και Townsend and Searle 1971), ή στη *τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση ελάχιστης νόρμας* (Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimation - MINQUE, Rao 1971), κ.ά. Τα κριτήρια αυτά διαφέρουν ως προς την εισαγωγή της έννοιας του βέλτιστου, ελαχιστοποιώντας π.χ. μια μεταβλητότητα ή κάποια ευκλείδεια νόρμα, κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις όμως οδηγούν στις ίδιες λύσεις.

Σε κάθε περίπτωση, οι εκτιμήσεις

$$\hat{\boldsymbol{\vartheta}} = [\hat{\vartheta}_1 \ \hat{\vartheta}_2 \ \ldots \ \hat{\vartheta}_m]^T = [\hat{\sigma}_1^2 \ \hat{\sigma}_2^2 \ \ldots \ \hat{\sigma}_m^2]^T \tag{10}$$

των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς δίνονται από τη λύση ενός συστήματος “κανονικών εξισώσεων”

$$\mathbf{J}\,\hat{\boldsymbol{\vartheta}} = \boldsymbol{\varphi} \tag{11}$$

Σύμφωνα με την *τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση ελάχιστης νόρμας*, η οποία αποτελεί την πιο γενική μέθοδο υπολογισμού των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς και θα μπορούσε να θεωρηθεί ως μία γενίκευση της εκτίμησης της μεταβλητότητας αναφοράς, τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{J}$ των συντελεστών των αγνώστων υπολογίζονται από τη σχέση

$$J_{ij} = tr\{\mathbf{W}\ \mathbf{V}_i\ \mathbf{W}\ \mathbf{V}_j\}\ , \qquad i,j = 1,2,\ldots,m \tag{12}$$

και τα στοιχεία του πίνακα $\boldsymbol{\varphi}$ των γνωστών όρων, από τη σχέση

$$\hat{\varphi}_i = \hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}_i \mathbf{V}^{-1} \hat{\mathbf{v}} \ , \quad i = 1,2,...,m \tag{13}$$

όπου $\mathbf{V} = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2 + ... + \mathbf{V}_m$. Ο πίνακας $\mathbf{W}$ ορίζεται από τη σχέση $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{V}\,\mathbf{W}\,\mathbf{v}$

$$\mathbf{W} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1} \tag{14}$$

Από το άθροισμα των στοιχείων του πίνακα **J** προκύπτουν οι βαθμοί ελευθερίας f του μικτού μοντέλου

$$\sum_{i=1}^{m} J_{ii} + 2\sum_{i=1}^{m}\sum_{j>i}^{m} J_{ij} = n - r = f \tag{15}$$

όπου n είναι ο αριθμός των παρατηρήσεων και r ο βαθμός του πίνακα $\mathbf{X}$. Στην περίπτωση που ο πίνακας $\mathbf{X}$ είναι πλήρους βαθμού, ο αριθμός αυτός είναι ίσος με τον αριθμό των αγνώστων παραμέτρων β_i. Γενικά, οι βαθμοί ελευθερίας υπολογίζονται ως

$$f = n - r = n - rank(\mathbf{X}) = tr\{\mathbf{WM}\} \tag{16}$$

Από το σύστημα των εξισώσεων της σχέσης (11), αν ο πίνακας **J** είναι ομαλός, προκύπτει η μοναδικά καθορισμένη εκτίμηση των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς και ο πίνακας των συμμεταβλητοτήτων τους

$$\hat{\boldsymbol{\vartheta}} = \mathbf{J}^{-1}\,\boldsymbol{\varphi} \ , \quad \Sigma_{\hat{\vartheta}} = 2\mathbf{J}^{-1} \tag{17}$$

των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς και του πίνακα των συμμεταβλητοτήτων τους, που στη γεωδαιτική βιβλιογραφία είναι γνωστή ως εκτίμηση Helmert, όρος που δόθηκε από τους Grafarend and Schaffrin (1979). Σχετικά με την εκτίμηση αυτή και τη σχέση της με τις άλλες εκτιμήσεις που αναφέρονται στη βιβλιογραφία, σημειώνουμε τα εξής:

- Όταν ο πίνακας συμμεταβλητοτήτων έχει τη δομή της σχέσης (9), η λύση (17) ταυτίζεται με τη *βέλτιστη τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση*, όπως εμφανίζεται στην αντίστοιχη γεωδαιτική ορολογία (Best Quadratic Unbiased Estimation - BQUE), με τη *βέλτιστη αναλλοίωτη τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση* (Best Invariant Quadratic Unbiased Estimation - BIQUE) καθώς και με τη *τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση ελάχιστης νόρμας* (Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimation - MINQUE).
- Η λύση (17) είναι *αναλλοίωτη* εκτίμηση επειδή παραμένει αμετάβλητη κάτω από οποιονδήποτε γραμμικό μετασχηματισμό των παραμέτρων $\boldsymbol{\beta}$. Κατά συνέπεια, είναι αμετάβλητη και κάτω από οποιονδήποτε γραμμικό μετασχηματισμό των παρατηρήσεων **y**.
- Αν οι παρατηρήσεις ακολουθούν την πολυδιάστατη κανονική κατανομή, με τις παραπάνω εκτιμήσεις ταυτίζεται και η εκτίμηση των ελαχίστων τετραγώνων (Seely 1970) καθώς και οι εκτιμήσεις που βασίζονται στο κριτήριο της μέγιστης

πιθανοφάνειας (Maximum Likelihood - ML, Hartley and Rao 1967) και Restricted Maximum Likelihood - RENL, Patterson and Thompson 1971).

- Επειδή η εκτίμηση που προκύπτει από τη σχέση (17) εξαρτάται από τον αρχικό πίνακα βάρους των παρατηρήσεων, ονομάζεται *τοπικά βέλτιστη αναλλοίωτη τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση*. Η εξάρτηση αυτή γίνεται πρακτικά ασήμαντη με τις συνεχείς επαναλήψεις λύσεων, όπου σε κάθε επανάληψη διορθώνονται οι πίνακες $\mathbf{V}_i$, αφού πολλαπλασιαστούν με την αντίστοιχη εκτίμηση της μεταβλητότητας σ_i^2 της προηγούμενης λύσης.

Μια άλλη προσέγγιση που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση των άγνωστων συνιστωσών συμμεταβλητοτήτων σε γραμμικά μοντέλα είναι η εφαρμογή της μεθόδου του Bayes. Τόσο οι μέθοδοι της μέγιστης πιθανοφάνειας όσο και οι “μπεϊζιανές” μέθοδοι ανήκουν στην οικογένεια των μεθόδων των βασισμένων στη γνώση της κατανομής των δεδομένων. Η βασική διαφορά είναι ότι οι μπεϊζιανές μέθοδοι απαιτούν κάποια αρχική πληροφορία σχετικά με τις άγνωστες συνιστώσες των μεταβλητοτήτων στη μορφή μιας γνωστής συνάρτησης πυκνότητας της κατανομής. Για να βρεθούν οι εκτιμήσεις Bayes, εφαρμόζονται κλασικές τεχνικές, όπως π.χ. της μέγιστης πιθανοφάνειας, στην εκ των υστέρων συνάρτηση πυκνότητας της κατανομής. Η αρχή της a-posteriori μέγιστης πιθανοφάνειας (MAP), ή αλλιώς της γενικευμένης μέγιστης πιθανοφάνειας (Generalized Maximum Likelihood - GML) βασίζεται στη μεγιστοποίηση της a-posteriori συνάρτησης της κατανομής (για την εφαρμογή της μπεϊζιανής μεθοδολογίας στην εκτίμηση των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς βλ. π.χ. Box and Tiao, 1973).

Στην περίπτωση των τυχαίων επιδράσεων οι εκτιμήσεις που αναφέραμε παραπάνω μπορούν να οδηγήσουν σε αρνητικές τιμές των συνιστωσών σ_i^2. Οι αρνητικές τιμές οφείλονται συνήθως σε λανθασμένες επιλογές του στοχαστικού μοντέλου των παρατηρήσεων, όπως π.χ. λανθασμένη επιλογή του πίνακα $\mathbf{V}_i$, ή σε μη ικανό αριθμό παρατηρήσεων. Στη σχετική βιβλιογραφία δόθηκαν διάφορες τροποποιημένες μέθοδοι εκτίμησης που οδηγούν σε μη αρνητικές τιμές των συνιστωσών μεταβλητοτήτων, αλλά οι εκτιμήσεις αυτές δεν είναι συνήθως ανεπηρέαστες (βλ. π.χ. Rao, 1972).

Μια εκτίμηση που βασίζεται στα κριτήρια μέγιστης πιθανοφάνειας και οδηγεί πάντοτε σε θετικές τιμές για τις συνιστώσες $\hat{\sigma}_i^2$, αναφέρεται ως *βέλτιστη τετραγωνική ανεπηρέαστη θετική εκτίμηση* (*Best Quadratic Unbiased Nonnegative Estimation, BQUNE*) και εφαρμόζεται με τον τύπο

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{\hat{\varphi}_i}{tr\{\mathbf{W}\ \mathbf{V}_i\}} = \frac{\hat{\mathbf{v}}_i^T \mathbf{V}^{-1}\ \mathbf{V}_i\ \mathbf{V}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}}_i}{tr\{\mathbf{W}\ \mathbf{V}_i\}}\ , \qquad i = 1,2,...,m \tag{18}$$

όπου ο παρονομαστής

$$f^{(i)} = tr\{\mathbf{W}\ \mathbf{V}_i\} \tag{19}$$

εκφράζει τους *βαθμούς ελευθερίας*, ή καλύτερα τον *αριθμό πλεονασμού* των n_i παρατηρήσεων και προκύπτει από το άθροισμα των αριθμών πλεονασμού των παρατηρήσεων αυτών. Αθροίζοντας τους αριθμούς $f^{(i)}$ για τις m ομάδες

$$f^{(1)} + f^{(2)} + ... + f^{(m)} = f \tag{20}$$

προκύπτουν οι "συνολικοί" βαθμοί ελευθερίας στη συγκεκριμένη ανάλυση των παρατηρήσεων.

Συνήθως, επειδή στην ανάλυση των παρατηρήσεων όλη η διαθέσιμη πληροφορία σχετικά με τις ακρίβειές τους περιέχεται στους πίνακες $\mathbf{V}_i$, μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι αρχικές τιμές των συνιστωσών σ_i^2 είναι ίσες με τη μονάδα. Με την υπόθεση αυτή, η απλοποιημένη σχέση (18) μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε κάθε περίπτωση, αρκεί η τελική λύση να προκύψει από τη σύγκλιση της επαναληπτικής εφαρμογής, καθώς η επαναληπτική εφαρμογή του τύπου αυτού δίνει τα ίδια αποτελέσματα με την εκτίμηση της σχέσης (17).

Ακολουθώντας την παραπάνω εκτίμηση, αν θεωρήσουμε δύο άγνωστες συνιστώσες της μεταβλητότητας αναφοράς σ_ε^2 και σ_u^2, των τυχαίων σφαλμάτων και των στοχαστικών παραμέτρων αντίστοιχα ($\mathbf{v} \sim (\mathbf{0}, \sigma_\varepsilon^2\, \mathbf{Q} \;+ \sigma_u^2\, \mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T)$), τότε αυτές υπολογίζονται από τους τύπους

$$\hat{\sigma}_\varepsilon^2 = \frac{\hat{\varphi}_\varepsilon}{f_\varepsilon} = \frac{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{Q}^{-1}\; \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^T}{tr\{\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\; \mathbf{Q}\}} \quad , \quad \hat{\sigma}_u^2 = \frac{\hat{\varphi}_u}{f_u} = \frac{\hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{K}^{-1}\; \hat{\mathbf{u}}}{tr\{\mathbf{W}_{uu}\; \mathbf{K}\}} \tag{21}$$

όπου $f_\varepsilon = tr\{\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\; \mathbf{Q}\}$ και $f_u = tr\{\mathbf{W}_{uu}\; \mathbf{K}\}$ είναι ο αριθμός πλεονασμού των τυχαίων σφαλμάτων και της στοχαστικής πληροφορίας των παραμέτρων $\mathbf{u}$ αντίστοιχα, και

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon} &= \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1} \\ \mathbf{W}_{uu} &= \mathbf{Z}^T\left(\mathbf{M}^{-1} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\right)\mathbf{Z} \end{aligned} \tag{22}$$

Οι ολικοί βαθμοί πλεονασμού προκύπτουν ότι είναι $f = f_\varepsilon + f_u = n - r$.

Σε μια πιο σύνθετη περίπτωση οι τυχαίες επιδράσεις μπορεί έχουν τη μορφή

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i^{(1)}\mathbf{u}^{(1)} + ... + \mathbf{Z}_i^{(m-1)}\mathbf{u}^{(m-1)} + \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{X}_i\boldsymbol{\beta} + \sum_{i=1}^{m-1}\mathbf{Z}^{(i)}\,\mathbf{u}^{(i)} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{23}$$

και κάθε διάνυσμα $\mathbf{u}^{(i)}$ συνοδεύεται από μία μεταβλητότητα αναφοράς σ_i^2

$$E\{\mathbf{v}\mathbf{v}^T\} = \sum_{i=1}^{m-1}\sigma_i^2\,\mathbf{Z}_i\mathbf{K}_i\mathbf{Z}_i^T + \sigma_\varepsilon^2\,\mathbf{Q} \tag{24}$$

Οι $m-1$ συνιστώσες σ_i^2 υπολογίζονται από τις σχέσεις

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{\hat{\mathbf{u}}_i^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{K}_i \, \mathbf{K}^{-1} \hat{\mathbf{u}}_i}{tr\{\mathbf{W}_{uu} \, \mathbf{K}_i\}} \,, \qquad i = 1,\ 2,\ ...,\ m-1 \tag{25}$$

όπου $f_i = tr\{\mathbf{W}_{uu} \, \mathbf{K}_i\}$ είναι ο αριθμός πλεονασμού της i τυχαίας επίδρασης, ενώ η μεταβλητότητα $\sigma_m^2 = \sigma_\varepsilon^2$ των σφαλμάτων από τη σχέση (21). Το άθροισμα των α-ριθμών f_i δίνει τους βαθμούς ελευθερίας $f_u = f_1 + f_2 + ... + f_{m-1}$. Σε μια πιο ειδική περίπτωση οι τυχαίες επιδράσεις έχουν τη μορφή

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}_i^{(1)} \mathbf{u}_i^{(1)} + \mathbf{Z}_i^{(2)} \mathbf{u}_i^{(2)} + ... + \mathbf{Z}_i^{(m-1)} \mathbf{u}_i^{(m-1)} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{26}$$

και η σχέση (25) απλοποιείται ακόμα περισσότερο

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{\hat{\mathbf{u}}_i^T \mathbf{K}_i^{-1} \, \hat{\mathbf{u}}_i}{tr\{\mathbf{W}_{uu} \, \mathbf{K}_i\}}$$

Για να εκτιμηθούν οι συνιστώσες των μεταβλητοτήτων των παρατηρήσεων σύμφωνα με όσα αναπτύχθηκαν παραπάνω, θα πρέπει αφενός μεν τα σφάλματα των παρατηρήσεων να έχουν τυχαίο χαρακτήρα, αφετέρου δε εξισώσεις του μικτού μοντέλου να είναι ορισμένες σωστά. Από την άλλη μεριά όμως, για να εντοπιστούν πιθανά σφάλματα ή ακραίες τιμές στις παρατηρήσεις, θα πρέπει να γνωρίζουμε τη σχετική ακρίβειά τους. Το πρόβλημα αυτό αντιμετωπίζεται με διαδοχικές επαναλήψεις λύσεων, σύμφωνα με το παρακάτω σχήμα:

1. Αρχική επίλυση του μικτού μοντέλου
2. Έλεγχος σημαντικότητας των στοχαστικών παραμέτρων
3. Εκτίμηση των συνιστωσών των μεταβλητοτήτων και διόρθωση των πινάκων μεταβλητοτήτων και συμμεταβλητοτήτων των παρατηρήσεων, σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\mathbf{Q}^{(k)} = \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \mathbf{Q}^{(k-1)},\ \mathbf{K}^{(k)} = \hat{\sigma}_u^2 \ \mathbf{K}^{(k-1)},\ \mathbf{M}^{(k)} = \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \mathbf{Q}^{(k-1)} + \hat{\sigma}_u^2 \mathbf{Z} \mathbf{K}^{(k-1)} \mathbf{Z}^T \tag{27}$$

ή

$$\mathbf{K}^{(k)} = \sum_{i=1}^{m-1} \hat{\sigma}_i^2 \mathbf{K}_i^{(k-1)} \quad \text{και} \quad \mathbf{M}^{(k)} = \hat{\sigma}_\varepsilon^2 \mathbf{Q}^{(k-1)} + \sum_{i=1}^{m-1} \hat{\sigma}_i^2 \mathbf{Z}_i \mathbf{K}_i^{(k-1)} \mathbf{Z}_i^T \tag{28}$$

Επαναλαμβάνονται η λύση και η διαδικασία των ελέγχων του βήματος (2) και, αν χρειάζεται το βήμα (3). Οι τελικές τιμές των συνιστωσών των μεταβλητοτήτων, μετά την τελευταία επανάληψη θα πρέπει να είναι $\sigma_i^2 \approx 1$. Ως κριτήριο για την α-ποδοχή της τελικής λύσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η αποδοχή του ελέγχου της σάρωση δεδομένων για όλες τις παρατηρήσεις.

Οι τελικές εκτιμήσεις των πινάκων συμμεταβλητοτήτων $\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}}, \hat{\Sigma}_{\hat{u}}$ και $\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}\hat{u}}$ προκύπτουν από τους πίνακας των συντελεστών συμμεταβλητοτήτων των σχέσεων (7) αν αντικατασταθούν οι πίνακες $\mathbf{Q}$, $\mathbf{K}$ και $\mathbf{M}$ από τους αντίστοιχους διορθωμένους της τελευταίας επανάληψης.

4. Η επιλογή των παραμέτρων και ο έλεγχος της γενικής υπόθεσης

Το ουσιαστικό πρόβλημα στην εφαρμογή του γραμμικού μικτού μοντέλου είναι καταρχάς η επιλογή από το αρχικό σύνολο εκείνων των σταθερών και τυχαίων παραμέτρων, οι οποίες θα αποτελέσουν τις άγνωστες παραμέτρους στο πρόβλημα της εκτίμησης. Ο στόχος είναι να επιλεγούν εκείνες οι παράμετροι οι οποίες είναι πρακτικά ασήμαντες, έτσι ώστε όλες οι υπόλοιπες να ικανοποιούν όσο γίνεται καλύτερα το γραμμικό μικτό μοντέλο της σχέσης (1). Αυτό συμβαίνει όταν τα υπόλοιπα $\hat{\varepsilon}_i$ που προκύπτουν από τους σχετικούς υπολογισμούς είναι μικρά, ή, ισοδύναμα, όταν η ολική μεταβλητότητα $\hat{\sigma}^2$ δεν ξεπερνά ένα αποδεκτό όριο. Για να επιτευχθεί ο στόχος αυτός εφαρμόζονται διάφορες τεχνικές που βασίζονται σε κριτήρια, όπως π.χ. του Akaike (Akaike, 1973) ή του Bayes (π.χ. Fan and Li, 2012), τα οποία βασίζονται στο να γίνουν όλοι οι δυνατοί k συνδυασμοί επιλογής από τις m αρχικές παραμέτρους, να γίνει η εκτίμηση όλων των υπολοίπων $m-k$, και να εξετασθεί για κάθε μία η τιμή του κριτηρίου αποδοχής του γραμμικού μοντέλου. Αρχικά επιλέγεται $k=m-1$, στη συνέχεια $k=m-2$, και ούτω καθεξής, μέχρις ότου φθάσουμε σε ένα αριθμό $k-1$ για τον οποίο κανένας συνδυασμός ανεξάρτητων μεταβλητών δεν ικανοποιεί το κριτήριο "επιτυχίας" του γραμμικού μοντέλου για όλες τις υπόλοιπες παραμέτρους. Από τις k παραμέτρους του προηγούμενου βήματος επιλέγεται ο συνδυασμός ανεξάρτητων παραμέτρων που δίνει τη μικρότερη τιμή στο σχετικό κριτήριο. Για μια ολοκληρωμένη ανασκόπηση των διαφόρων προσεγγίσεων στο πρόβλημα της επιλογής των παραμέτρων στα γραμμικά μικτά μοντέλα θα μπορούσε κανείς να ανατρέξει στην εργασία των Müller et all. (2013).

Το ζήτημα της επιλογής των παραμέτρων στα προβλήματα εκτίμησης αποτελεί πρόκληση στη σχετική βιβλιογραφία και μελετάται συστηματικά τα τελευταία χρόνια. Ωστόσο, κανένα κριτήριο από αυτά που προτείνονται στη σχετική βιβλιογραφία δεν ξεχωρίζει ως βέλτιστο ώστε να χρησιμοποιηθεί για την επιλογή του μοντέλου και θα λέγαμε ότι ο ρόλος που διαδραματίζουν τα κριτήρια αυτά στην επιλογή των αγνώστων παραμέτρων δεν είναι τόσο κατανοητός. Από την άλλη μεριά, η παραπάνω διαδικασία απαιτεί ένα τεράστιο όγκο υπολογισμών που πολλές φορές δημιουργεί προβλήματα κατά την εφαρμογή της στην πράξη. Ορθότερο λοιπόν είναι να ακολουθείται μία σχετικά απλούστερη και αυστηρότερη διαδικασία όπου γίνεται μία αρχική ικανοποιητική επιλογή των ντετερμινιστικών παραμέτρων $\boldsymbol{\beta}$ και στοχαστικών $\mathbf{u}$ και στη συνέχεια προσδιορίζονται με τη βοήθεια ενός στατιστικού ελέγχου οι παράμετροι που θεωρούνται ασήμαντες και είναι δυνατόν να αφαιρεθούν, ή άλλες που είναι σημαντικές και δεν έχουν συμπεριληφθεί στην αρχική επιλογή.

Σχετικά με την εφαρμογή του ελέγχου της γενικής υπόθεσης, οι υποθέσεις που ελέγχονται μπορεί να αφορούν μόνο στις ντετερμινιστικές παραμέτρους $\boldsymbol{\beta}$

$$H_o : \mathbf{H}\,\boldsymbol{\beta} = \mathbf{z} \tag{29}$$

ή στις ντετερμινιστικές παραμέτρους $\boldsymbol{\beta}$ και τις στοχαστικές $\mathbf{u}$

$$H_o : \mathbf{H}\,\boldsymbol{\beta} + \mathbf{G}\,\mathbf{u} = \mathbf{z} \tag{30}$$

Η δεύτερη αυτή περίπτωση αποτελεί μια ιδιόμορφη διατύπωση στατιστικών υποθέσεων που περιλαμβάνουν τυχαίες παραμέτρους, η οποία βρίσκεται εκτός της τυπικής διατύπωσης υποθέσεων στην παραδοσιακή στατιστική, που αφορά μόνο στα μη τυχαία τμήματα του μοντέλου (τις σταθερές επιδράσεις και τους πίνακες των μεταβλητοτήτων και συμμεταβλητοτήτων τους). Ο έλεγχος εφαρμόζεται ακριβώς κατά τον ίδιο τρόπο, διαφοροποιείται όμως όχι εξαιτίας του στοχαστικού χαρακτήρα των τυχαίων παραμέτρων, αλλά στις περιπτώσεις που οι βαθμοί ελευθερίας είναι μικροί και ταυτόχρονα είναι άγνωστες οι συνιστώσες της μεταβλητότητας αναφοράς.

Η μηδενική υπόθεση που θέλουμε να ελέγξουμε γίνεται αποδεκτή ή απορρίπτεται σε σύγκριση με μία εναλλακτική υπόθεση. Παραδείγματος χάριν, η μηδενική υπόθεση $\mathbf{H}\,\boldsymbol{\beta} = \mathbf{z}$, που αναφέρεται στις ντετερμινιστικές παραμέτρους $\boldsymbol{\beta}$, ελέγχεται σε σχέση με την εναλλακτική της $\mathbf{H}\,\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{z}$. Ο έλεγχος μπορεί να γίνει είτε χρησιμοποιώντας μόνο τα αποτελέσματα των αδέσμευτων εξισώσεων $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\,\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}$, είτε τα αποτελέσματα των δεσμευμένων εξισώσεων, ή συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των δύο αυτών διαφορετικών λύσεων, με βάση τη σχέση

$$F = \frac{f}{k}\frac{\delta\hat{\varphi}}{\hat{\varphi}} = \frac{f}{k}\frac{\delta\hat{\varphi}}{\hat{\varphi}_H - \delta\hat{\varphi}} \sim F_{k,f} \tag{31}$$

όπου $f + k = f_H$, $\delta\hat{\varphi} = \hat{\varphi}_H - \hat{\varphi}$ και $\hat{\varphi}_H$ είναι το κριτήριο που ελαχιστοποιείται όταν συμπεριλαμβάνονται στους υπολογισμούς και οι εξισώσεις των υποθέσεων που ελέγχονται ως δεσμεύσεις και f_H είναι οι αντίστοιχοι βαθμοί ελευθερίας, και $\hat{\varphi}$, f είναι το κριτήριο που ελαχιστοποιείται χωρίς τις παραπάνω δεσμεύσεις και οι βαθμοί ελευθερίας αντίστοιχα.

Στην πρώτη περίπτωση από τις εκτιμήσεις $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ και $\hat{\mathbf{u}}$ υπολογίζονται τα σφάλματα κλεισίματος $\hat{\mathbf{e}}$ των δεσμεύσεων και ο πίνακας των συμμεταβλητοτήτων τους $\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{e}}$

$$\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{H}\,\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{z}\,,\ \ \Sigma_{\hat{e}} = \mathbf{H}^T\Sigma_{\hat{\beta}}\,\mathbf{H} \tag{32}$$

$$\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{H}\,\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{G}\,\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{z}\,,\ \ \Sigma_{\hat{e}} = \mathbf{H}^T\Sigma_{\hat{\beta}}\,\mathbf{H} - \mathbf{H}^T\Sigma_{\hat{\beta}\hat{u}}\,\mathbf{G} - \mathbf{G}^T\Sigma^T_{\hat{\beta}\hat{u}}\,\mathbf{H} - \mathbf{G}^T\Sigma_{\hat{u}}\,\mathbf{G} \tag{33}$$

Ο έλεγχος βασίζεται στη σχέση

$$F = \frac{1}{k}\hat{\mathbf{e}}^T\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{e}}^{-1}\,\hat{\mathbf{e}} \sim F_{k,v} \tag{34}$$

όπου k είναι ο αριθμός των δεσμεύσεων που ελέγχονται και οι βαθμοί ελευθερίας v εξαρτώνται από την αρχική παραδοχή που γίνεται σχετικά με την ακρίβεια των στοχαστικών παραμέτρων. Αν θεωρήσουμε την ακρίβεια γνωστή ή αν οι βαθμοί ελευθερίας f είναι μεγάλοι (π.χ. $f > 100$), τότε $\nu \to \infty$ και ο έλεγχος παίρνει τη μορφή

$$F = \frac{1}{k}\hat{\mathbf{e}}^T \Sigma_{\hat{e}}^{-1}\, \hat{\mathbf{e}} = \frac{1}{k}\hat{\mathbf{e}}^T \mathbf{Q}_{\hat{e}}^{-1}\, \hat{\mathbf{e}} \sim F_{k,\infty} \quad \text{ή} \quad \chi = \hat{\mathbf{e}}^T \Sigma_{\hat{e}}^{-1}\, \hat{\mathbf{e}} \sim \chi_k^2 \tag{35}$$

Στη μορφή αυτή δόθηκε από τον πολωνό στατιστικό Abraham Wald (1943) και ονομάσθηκε Wald Test από τον S. D. Silvey (1959).

Στην περίπτωση που αγνοήσουμε τις συνιστώσες της μεταβλητότητας αναφοράς και θεωρήσουμε μία κοινή μεταβλητότητα για όλες τις στοχαστικές παραμέτρους σύμφωνα με τη σχέση

$$\mathbf{v} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2(\mathbf{Q} + \mathbf{ZKZ}^T)) \quad \text{ή} \quad \mathbf{v} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{M}) \tag{36}$$

(θεωρούμε δηλαδή ότι $\sigma_\varepsilon^2 = \sigma_u^2 = \sigma^2$), της οποίας η εκτίμηση υπολογίζεται από τον τύπο

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\hat{\varphi}}{f} = \frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{M}^{-1}\, \hat{\mathbf{v}}}{tr\{\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\, \mathbf{M}\}} = \frac{\hat{\varepsilon}^T \mathbf{Q}^{-1}\, \hat{\varepsilon} + \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{K}^{-1}\, \hat{\mathbf{u}}}{tr\{\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\, \mathbf{M}\}} \tag{37}$$

τότε, οι βαθμοί ελευθερίας υπολογίζονται ως $\nu = f - k$ και ο έλεγχος βασίζεται στη σχέση

$$F = \frac{1}{k}\hat{\mathbf{e}}^T \hat{\Sigma}_{\hat{e}}^{-1}\, \hat{\mathbf{e}} = \frac{\hat{\mathbf{e}}^T \mathbf{Q}_{\hat{e}}^{-1}\, \hat{\mathbf{e}}}{k\, \hat{\sigma}^2} \sim F_{k,f-k} \tag{38}$$

όπου $f = tr\{\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\, \mathbf{M}\}$ οι βαθμοί ελευθερίας και k ο αριθμός των δεσμεύσεων που ελέγχονται.

Ο έλεγχος καθίσταται πολυπλοκότερος στην περίπτωση της άγνωστης απόλυτης ακρίβειας των στοχαστικών παραμέτρων και της αποδοχής του μοντέλου των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς. Οι σχετικοί υπολογισμοί των βαθμών ελευθερίας ν που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία είναι προσεγγιστικοί.

Στην ειδική περίπτωση, όταν ελέγχεται μία υπόθεση μόνο, π.χ. η

$$\mathbf{h}_i^T \boldsymbol{\beta} = z_i \tag{39}$$

η στατιστική ποσότητα που ελέγχεται προκύπτει ότι είναι

$$F = \frac{\hat{e}_i^2}{\mathbf{h}_i^T \hat{\Sigma}_{\hat{\beta}}\, \mathbf{h}_i} = \frac{\hat{e}_i^2}{\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2} \sim F_{1,\nu} \quad \text{ή} \quad t = \frac{\hat{e}_i}{\sqrt{\mathbf{h}_i^T \hat{\Sigma}_{\hat{\beta}}\, \mathbf{h}_i}} = \frac{\hat{e}_i}{\hat{\sigma}_{\hat{e}}} \sim t_\nu \tag{40}$$

όπου $\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2 = \mathbf{h}_i^T \hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} \mathbf{h}_i$ είναι η μεταβλητότητα του σφάλματος κλεισίματος της δέσμευσης $\hat{e}_i = \mathbf{h}_i^T \hat{\boldsymbol{\beta}} - z_i$ και οι βαθμοί ελευθερίας $\nu = \nu_i$ προκύπτουν με πολύ καλή προσέγγιση ότι είναι (Satterthwaite, 1946, Giesbrecht and Burns, 1985)

$$\nu_i \approx \frac{2(\mathbf{h}_i^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\beta}} \mathbf{h}_i)^2}{Var(\mathbf{h}_i^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\beta}} \mathbf{h}_i)} = \frac{2\hat{\sigma}_{\hat{e}}^4}{\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2)} \tag{41}$$

όπου $\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2) = Var(\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2)$ είναι η μεταβλητότητα της εκτίμησης της μεταβλητότητας $\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2$ και προκύπτει ανάλογα με τον τρόπο υπολογισμού των συνιστωσών των μεταβλητοτήτων $\hat{\sigma}_u^2$ και $\hat{\sigma}_\varepsilon^2$ ή $\hat{\sigma}_i^2$ και $\hat{\sigma}_\varepsilon^2$. Η μεταβλητότητα αυτή προκύπτει με την εφαρμογή του νόμου μετάδοσης συμμεταβλητοτήτων σε αναπτύγματα της σειράς Taylor (βλ. Παράρτημα Α).

Αντίστοιχα υπολογίζονται οι βαθμοί ελευθερίας

$$\nu_i \approx \frac{2\hat{\sigma}_{\hat{e}}^4}{\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2)} \tag{42}$$

του ελέγχου της υπόθεσης $\mathbf{h}_i^T \boldsymbol{\beta} + \mathbf{g}_i^T \mathbf{u} = z$ και ο έλεγχος βασίζεται στη σχέση

$$F = \frac{\hat{e}^2}{\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2} \sim F_{1,\nu} \quad ή \quad t = \frac{\hat{e}}{\hat{\sigma}_{\hat{e}}} \sim t_\nu \tag{43}$$

όπου $\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2 = \mathbf{h}_i^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\beta}} \mathbf{h}_i - \mathbf{h}_i^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\beta}\hat{u}} \mathbf{g}_i - \mathbf{g}_i^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\beta}\hat{u}}^T \mathbf{h}_i - \mathbf{g}_i^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{u}} \mathbf{g}_i$

Γενικεύοντας τον έλεγχο για το σύνολο των k δεσμεύσεων, οι βαθμοί ελευθερίας ν της κατανομής $F_{k,\nu}$ υπολογίζονται από τον τύπο (Fai and Cornelius, 1996)

$$\nu = \frac{2E}{E-k}\ , \quad E = \sum_{i=1}^{k} \frac{\nu_i}{\nu_i - 2} \ell_{[\nu_i > 2]} \tag{44}$$

όπου ν_i οι βαθμοί ελευθερίας για την i δέσμευση που υπολογίζονται σύμφωνα με τον προηγούμενο τύπο (41) ή (42) και ο συντελεστής $\ell_{[\nu_i > 2]}$ δηλώνει ότι αθροίζονται μόνο οι όροι για $\nu_i > 2$.

5. Ο έλεγχος των τυχαίων παραμέτρων

Εκτός από τον έλεγχο σημαντικότητας των παραμέτρων β_i, μία άλλη χρήσιμη εφαρμογή των στατιστικών ελέγχων υποθέσεων είναι ο εντοπισμός ενός ή και περισσότερων παρατηρήσεων y_i, που δεν ακολουθούν το μοντέλο και που η απομάκρυνσή τους θα οδηγήσει σε επιτυχέστερη εφαρμογή του για τις υπόλοιπες μόνο τιμές. Γενικότερα, τα ολικά υπόλοιπα v_i ή τα σφάλματα ε_i χρησιμοποιούνται συχνά για να αξιολογηθεί η εγκυρότητα των υποθέσεων των στατιστικών μοντέλων και μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν ως εργαλεία για την τον εντοπισμό πιθανών ακραίων τιμών ή επιδράσεων που χρειάζονται μεγαλύτερη προσοχή.

Γενικά, για τον εντοπισμό "προβληματικών παρατηρήσεων", τέτοιων που πιθανώς πρέπει να απομακρυνθούν από τους σχετικούς υπολογισμούς γιατί περιέχουν ακραίες τιμές, διαχωρίζουμε τρία είδη υπολοίπων που μπορούν να ελεγχθούν σχετικά με την ύπαρξη πιθανών διαταραχών. Αυτά είναι (βλ. π.χ. Nobre and Singer 2007):

α. τα σφάλματα των παρατηρήσεων: $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}$

β. οι τυχαίες επιδράσεις: $\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$, και

γ. τα ολικά υπόλοιπα: $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$.

Ο έλεγχος γενικά για την ύπαρξη ακραίων τιμών αποτελεί εφαρμογή του ελέγχου της γενικής υπόθεσης στις στοχαστικές παραμέτρους του γραμμικού μοντέλου και προκύπτει από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων των αρχικών εξισώσεων

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{45}$$

οι οποίες στην περίπτωση αυτή είναι οι δεσμευμένες εξισώσεις ως προς τη μηδενική υπόθεση που ελέγχεται, με τις διευρυμένες εξισώσεις, οι οποίες π.χ. στην περίπτωση του ελέγχου μιας μόνο παρατήρησης ύποπτης ότι είναι επηρεασμένη από ένα σφάλμα, της y_i, έχουν τη μορφή

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \mathbf{e}_i\psi_i + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{46}$$

ή ισοδύναμα

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{v} \\ \mathbf{y} &= \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{e}_i\psi + \mathbf{v} \end{aligned} \tag{47}$$

όπου ψ_i είναι "σφάλμα" της y_i παρατήρησης που αγνοήθηκε στους προηγούμενους υπολογισμούς και $\mathbf{e}_i$ η i στήλη του μοναδιαίου πίνακα $\mathbf{I}_n$. Η σύγκριση αυτή μπορεί να προκύψει από τα αποτελέσματα της λύσης μόνο του δεσμευμένου συστήματος των γραμμικών εξισώσεων (45), ή μπορεί να προκύψει από τη λύση μόνο των διευρυμένων εξισώσεων (46) ή από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων των λύσεων των δύο συστημάτων.

Στην πρώτη περίπτωση και όταν ελέγχονται τα ολικά υπόλοιπα $\mathbf{v}$, υπολογίζονται τα τροποποιημένα ολικά υπόλοιπα

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{v}} \tag{48}$$

όπου $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{M}\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\mathbf{v}$ και $\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon} = \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}$.

Από την παραπάνω σχέση, αν εφαρμοσθεί ο νόμος μετάδοσης των συμμεταβλητοτήτων και γίνουν οι πράξεις, προκύπτει ο πίνακας των συντελεστών των συμμεταβλητοτήτων των ποσοτήτων $\hat{\boldsymbol{\xi}}$

$$\mathbf{Q}_{\hat{\xi}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q}_{\hat{v}}\,\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{M} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T)\,\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon} \tag{49}$$

όπου $\mathbf{Q}_{\hat{v}} = \mathbf{M} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$. Ο έλεγχος της i παρατήρησης βασίζεται στο ομαλοποιημένο σφάλμα

$$\tau_i = \frac{\hat{\xi}_i}{\hat{\sigma}(\hat{\xi}_i)} \sim \tau_\nu \quad , \quad \hat{\sigma}(\hat{\xi}_i) = \sqrt{(\hat{\mathbf{W}}_{\varepsilon\varepsilon})_{ii}} \tag{50}$$

που ακολουθεί την κατανομή τ_ν με ν βαθμούς ελευθερίας. Η κατανομή τ_ν συνδέεται με την κατανομή $t_{\nu-1}$ μέσω της σχέσης

$$\tau_\nu^{\alpha/2} = \sqrt{\frac{\nu\ (t_{\nu-1}^{\alpha/2})^2}{\nu - 1 + (t_{\nu-1}^{\alpha/2})^2}} = \sqrt{\frac{\nu\ F_{1,\nu-1}^{\alpha}}{\nu - 1 + F_{1,\nu-1}^{\alpha}}} \tag{51}$$

Όπως και στον έλεγχο της γενικής υπόθεσης οι βαθμοί ελευθερίας ν υπολογίζονται:

α. Για πολύ μεγάλους βαθμούς ελευθερίας (π.χ. $f > 100$) ή για γνωστή απόλυτη ακρίβεια, τότε μπορεί να θεωρηθεί ότι $\nu \to \infty$ και η κατανομή τ_ν ταυτίζεται με την τυπική κανονική κατανομή.

β. Για μικρούς βαθμούς ελευθερίας και για μία κοινή μεταβλητότητα αναφοράς, οι βαθμοί ελευθερίας υπολογίζονται $\nu = f - 1$.

γ. Για μικρούς βαθμούς ελευθερίας και για την πιο σύνθετη περίπτωση των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς από τη σχέση (42) που γράφεται

$$\nu \approx \frac{2\hat{\sigma}_\xi^4}{\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_\xi^2)} \tag{52}$$

όπου $\hat{\sigma}_\xi^2 = \hat{\sigma}^2(\hat{\xi}_i)$ και $\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_\xi^2) = Var(\hat{\sigma}_\xi^2)$ η μεταβλητότητα της μεταβλητότητας $\hat{\sigma}_\xi^2$ που υπολογίζεται από την εφαρμογή της μετάδοσης των μεταβλητοτήτων στις σχέσεις υπολογισμού των συνιστωσών των μεταβλητοτήτων.

Για τον παραπάνω έλεγχο χρησιμοποιείται εναλλακτικά και η κατανομή

$$\tau_i = \frac{\hat{\xi}_i}{\hat{\sigma}(\hat{\xi}_i)}, \quad t_i = \tau_i \sqrt{\frac{\nu - 1}{\nu - \tau_i^2}} \sim t_{\nu-1} \tag{53}$$

όπου η ποσότητα t_i ονομάζεται εξωτερικά ομαλοποιημένο σφάλμα, επειδή μπορεί να προκύψει και από τη σχέση

$$t_i = \frac{\tilde{\xi}_i}{\tilde{\sigma}_{(i)}(\tilde{\xi}_i)} \sim t_\nu \tag{54}$$

όπου $\tilde{\xi}_i$ είναι η πρόγνωση της ποσότητας ξ_i που υπολογίζεται από τα αποτελέσματα των υπολογισμών του γραμμικού μικτού μοντέλου, αν οι υπολογισμοί αυτοί επαναληφθούν χωρίς τη συμμετοχή της y_i παρατήρησης.

Ο έλεγχος αυτός μπορεί να εφαρμοσθεί και για ομάδα παρατηρήσεων ταυτόχρονα. Αντίστοιχα με τα παραπάνω, ο έλεγχος των παρατηρήσεων της μιας ομάδας συνολικά $\mathbf{y}_1 = \mathbf{X}_1 \boldsymbol{\beta} + \mathbf{v}_1$ σε σχέση με τις παρατηρήσεις της άλλης ομάδας $\mathbf{y}_2 = \mathbf{X}_2 \boldsymbol{\beta} + \mathbf{v}_2$ μπορεί να γίνει ή από τα αποτελέσματα της ταυτόχρονης ανάλυσης των παρατηρήσεων των δύο ομάδων, ή από τα αποτελέσματα της ανάλυσης των παρατηρήσεων της μιας ομάδας και την εφαρμογή μεθόδων πρόγνωσης για τον υπολογισμό των στατιστικών στοιχείων της δεύτερης ομάδας. Οι δύο μέθοδοι είναι ισοδύναμες μεταξύ τους. Στην πρώτη περίπτωση υπολογίζονται τα τροποποιημένα σφάλματα

$$\hat{\xi}_2 = (\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{v}})_2 \tag{55}$$

όπου ο δείκτης (2) αναφέρεται στη δεύτερη ομάδα των παρατηρήσεων και ο έλεγχος βασίζεται στις σχέσεις:

α. Για πολύ μεγάλους βαθμούς ελευθερίας (π.χ. $f > 100$) ή για γνωστή απόλυτη ακρίβεια

$$\chi^2 = \hat{\xi}_2^T \mathbf{W}_{22}^{-1}\, \hat{\xi}_2 \sim \chi^2_{n_2} \tag{56}$$

όπου ο πίνακας $\mathbf{W}_{22} = [\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}]_{22}$ είναι ο υποπίνακας του $\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}$ που αντιστοιχεί στις παρατηρήσεις της ομάδας (2).

β. Για μικρούς βαθμούς ελευθερίας και για μία κοινή μεταβλητότητα αναφοράς, οι βαθμοί ελευθερίας

$$T^2 = \frac{\hat{\xi}_2^T \mathbf{W}_{22}^{-1}\, \hat{\xi}_2}{n_2\, \hat{\sigma}^2} \sim T^2_{n_2, f-n_2} \tag{57}$$

όπου ονομάζουμε την $T^2_{n_2, f-n_2}$ γενικευμένη κατανομή Hotelling, η οποία αποτελεί γενίκευση της κατανομής τ_f και κατά συνέπεια και της t_{f-1} στην ανάλυση πολλών μεταβλητών, ή εναλλακτικά

$$T^2 = \frac{\hat{\xi}_2^T \mathbf{W}_{22}^{-1}\, \hat{\xi}_2}{n_2\, \hat{\sigma}^2} \quad , \quad F = T^2 \, \frac{f - n_2}{f - n_2\, T^2} \sim F_{n_2, f-n_2} \tag{58}$$

γ. Για μικρούς βαθμούς ελευθερίας και για την πιο σύνθετη περίπτωση των αγνώστων συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς

$$T^2 = \frac{\hat{\xi}_2^T \hat{\mathbf{W}}_{22}^{-1}\, \hat{\xi}_2}{n_2} \sim T^2_{n_2, \nu} \tag{59}$$

όπου ο πίνακας $\hat{\mathbf{W}}_{\varepsilon\varepsilon}$ προκύπτει μετά από επαναλήψεις λύσεων για την εκτίμηση των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς, ή εναλλακτικά

$$T^2 = \frac{\hat{\xi}_2^T \hat{\mathbf{W}}_{22}^{-1}\, \hat{\xi}_2}{n_2} \quad , \quad F = T^2 \, \frac{\nu}{\nu + n_2 - n_2\, T^2} \sim F_{n_2, \nu} \tag{60}$$

Η κατανομή $T^2_{n_2,\nu}$ συνδέεται με την κατανομή $F_{n_2,\nu}$ μέσω της σχέσης

$$T^{2(\alpha)}_{n_2,f-n_2} = \frac{f\,F^{\alpha}_{n_2,f-n_2}}{f-n_2+n_2\,F^{\alpha}_{n_2,f-n_2}} \quad \text{ή} \quad T^{2(\alpha)}_{n_2,\nu} = \frac{(\nu+n_2)\,F^{\alpha}_{n_2,\nu}}{\nu+n_2\,F^{\alpha}_{n_2,\nu}} \tag{61}$$

Για τη δεύτερη περίπτωση, αν υποθέσουμε ότι θέλουμε να ελέγξουμε τη δεύτερη ομάδα των παρατηρήσεων από τη λύση της πρώτης ομάδας, ο έλεγχος βασίζεται στον εναλλακτικό τύπο

$$F = \frac{\tilde{\mathbf{v}}_2^T \mathbf{Q}_{\tilde{v}}^{-1} \tilde{\mathbf{v}}_2}{n_2\ \hat{\sigma}_1^2} \sim F_{n_2,f-n_2} \tag{62}$$

όπου $\hat{\sigma}_1^2$ είναι η μεταβλητότητα αναφοράς της πρώτης ομάδας και $\tilde{\mathbf{v}}_2 = \tilde{\mathbf{v}}_2^{(1)}$ είναι η πρόγνωση των ολικών υπολοίπων της δεύτερης ομάδας από τη λύση της πρώτης

$$\tilde{\mathbf{v}}_2^{(1)} = \mathbf{y}_2 - \tilde{\mathbf{y}}_2^{(1)} = \mathbf{y}_2 - \mathbf{X}_2 \hat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)} - \mathbf{M}_{12}^T \mathbf{M}_{11}^{-1} \hat{\mathbf{v}}_1^{(1)} \tag{63}$$

και $\mathbf{Q}_{\hat{v}} = \mathbf{M}_{22} - \mathbf{R}(\mathbf{X}_1^T \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{R}^T$ είναι ο πίνακας των συντελεστών των συμμεταβλητοτήτων τους, όπου $\mathbf{R} = \mathbf{X}_2 - \mathbf{M}_{12}^T \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{X}_1$. Από την ανάλυση της πρώτης ομάδας προκύπτει

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)} = (\mathbf{X}_1^T \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T \mathbf{M}_{11}^{-1}\ \mathbf{y}_1 \tag{64}$$

$$\mathbf{Q}_{\hat{\beta}}^{(1)} = (\mathbf{X}_1^T \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{X}_1)^{-1} \tag{65}$$

και $\mathbf{M}_{11}$, $\mathbf{M}_{22}$, $\mathbf{M}_{12}$ είναι οι αντίστοιχοι υποπίνακες του πίνακα $\mathbf{M}$.

Αποδεικνύεται (Dermanis and Rossikopoulos, 1991) ότι αυτός ο στατιστικός έλεγχος είναι ισοδύναμος με τον έλεγχο των λεγόμενων στοχαστικών γραμμικών υποθέσεων, μιας ιδέας που εισήχθη από τον Schaffrin (1987).

Η παραπάνω τεχνική του ελέγχου θα μπορούσε να εφαρμοστεί ακριβώς με τον ίδιο τρόπο και για τα σφάλματα $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$, ή στις τυχαίες επιδράσεις $\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}$. Όμως σε κάθε περίπτωση, είτε ελέγχονται τα ολικά υπόλοιπα $\hat{\mathbf{v}}$ είτε τα σφάλματα $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ είτε οι στοχαστικές παράμετροι $\hat{\mathbf{u}}$, εφαρμόζοντας τη διαδικασία που περιγράψαμε παραπάνω, ελέγχεται η σημαντικότητα των νέων παραμέτρων $\boldsymbol{\psi}$ συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των διευρυμένων εξισώσεων

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\psi} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{66}$$

με τα αποτελέσματα των αρχικών εξισώσεων $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}$. Καταλήγουμε δηλαδή και στις τρεις περιπτώσεις στην ίδια ποσότητα $\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\psi}}$ που αποδεικνύεται ότι είναι

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1} \hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\mathbf{e}}^T \mathbf{Q}_{\hat{e}}^{-1} \hat{\mathbf{e}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{Q}_{\hat{\varepsilon}}^{-1} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{Q}_{\hat{v}}^{-1} \hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{Q}_{\hat{u}}^{-1} \hat{\mathbf{u}} \tag{67}$$

και προκύπτουν τρεις εναλλακτικές μορφές του ιδίου ελέγχου. Οι σχετικές αποδείξεις δίδονται στο παράρτημα Β.

Στο θέμα αυτό υπάρχει γενικά σύγχυση στη διεθνή βιβλιογραφία. Αν για παράδειγμα αποτύχει ο στατιστικός έλεγχος της σημαντικότητας των στοχαστικών παραμέτρων

$$\chi^2 = \hat{\mathbf{u}}^T \mathbf{Q}_{\hat{u}}^{-1} \hat{\mathbf{u}} \sim \chi_q^2 \tag{68}$$

όπου q είναι ο αριθμός των στοχαστικών παραμέτρων, που εμφανίζεται στη βιβλιογραφία για την απλή περίπτωση των υψηλών βαθμών ελευθερίας (π.χ. $f > 100$) ή της γνωστής απόλυτης ακρίβειας, τότε αυτό δεν δείχνει υποχρεωτικά κακή επιλογή των τυχαίων επιδράσεων ή του πίνακα συμμεταβλητοτήτων τους, σύμφωνα με τους Waternaux at. al. (1989), αλλά μπορεί να οφείλεται π.χ. σε χονδροειδή σφάλματα που επηρεάζουν κάποια ή κάποιες παρατηρήσεις. Κατά τον ίδιο τρόπο η πιθανή ύπαρξη ακραίων τιμών κατά την εφαρμογή του στατιστικού ελέγχου που αναφέρεται στα σφάλματα $\boldsymbol{\varepsilon}$ δεν μπορεί να ερμηνευτεί ως ύπαρξη χονδροειδών σφαλμάτων σε κάποια ή σε κάποιες παρατηρήσεις.

6. Ο έλεγχος των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς

Για την ειδική περίπτωση όπου κάποιος θέλει να δει αν θα πρέπει να περιλαμβάνονται τυχόν τυχαίες επιδράσεις ο έλεγχος μπορεί να αναφέρεται και στις συνιστώσες της μεταβλητότητας αναφοράς. Για παράδειγμα αν γίνει αποδεκτή η μηδενική υπόθεση H_o: $\sigma_i^2 = 0$ σε σχέση με την εναλλακτική H_a: $\sigma_i^2 > 0$, τότε μπορεί να θεωρηθεί ότι οι τυχαίες επιδράσεις της i ομάδας που αναφέρονται στη μεταβλητότητας αναφοράς σ_i^2 είναι ασήμαντες, ότι δηλαδή $\mathbf{u}_i = \mathbf{0}$. Στη γενική όμως περίπτωση, οι ταυτόχρονοι έλεγχοι πολλαπλών τυχαίων επιδράσεων μέσω της σημαντικότητας των συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς δεν είναι γενικά αξιόπιστοι.

Όταν οι βαθμοί ελευθερίας είναι υψηλοί και με την προϋπόθεση ότι οι παρατηρήσεις ακολουθούν την κανονική κατανομή, ο έλεγχος της γενικής υπόθεσης H_a : $\mathbf{H}\,\boldsymbol{\vartheta} = \mathbf{z}$ σε σύγκριση με την εναλλακτική της, H_a : $\mathbf{H}\,\boldsymbol{\vartheta} \neq \mathbf{z}$, όπου $\mathbf{H}$ είναι $s \times m$ πίνακας πλήρους βαθμού, βασίζεται στην "κλασική" σχέση (Rao and Kleffe 1988, Kleffe and Seifert 1988 και Khuri at al. 1998)

$$F = \frac{1}{2m} (\mathbf{H}\,\hat{\boldsymbol{\vartheta}} - \mathbf{z})^T (\mathbf{H}\mathbf{J}^{-1}\mathbf{H}^T)^{-1} (\mathbf{H}\,\hat{\boldsymbol{\vartheta}} - \mathbf{z}) \sim F_{m,\infty} \tag{69}$$

ή ισοδύναμα

$$F = \frac{1}{2}(\mathbf{H}\,\hat{\vartheta} - \mathbf{z})^T (\mathbf{H}\mathbf{J}^{-1}\mathbf{H}^T)^{-1}(\mathbf{H}\,\hat{\vartheta} - \mathbf{z}) \sim \chi_m^2 \tag{70}$$

αντίστοιχη του ελέγχου της γενικής υπόθεσης, που αναφέρεται στις άγνωστες παραμέτρους $\boldsymbol{\beta}$. Στην παραπάνω σχέση, $\hat{\vartheta}$ είναι εκτίμηση δεύτερης τάξης (επανάληψης), καθώς μετά την πρώτη εκτίμηση διορθώνεται ο πίνακας βάρους και ακολουθεί η επανάληψη των σχετικών υπολογισμών.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η ειδική περίπτωση όπου οι άγνωστες συνιστώσες ϑ ελέγχονται αν είναι ίσες με συγκεκριμένες τιμές ϑ_o. Η μηδενική υπόθεση παίρνει τη μορφή $H_a : \vartheta = \vartheta_o$ και ο έλεγχος βασίζεται στη σχέση

$$F = \frac{1}{2m}(\hat{\vartheta} - \vartheta_o)^T \mathbf{J}\,(\hat{\vartheta} - \vartheta_o) \sim F_{m,\infty} \tag{71}$$

Για τον έλεγχο ενός μεγέθους $\sigma^2 = \mathbf{h}^T \vartheta$, π.χ. αν η (ολική) μεταβλητότητα μιας παρατήρησης είναι ίση με μια συγκεκριμένη τιμή, η μηδενική υπόθεση διατυπώνεται ως $H_a : \mathbf{h}^T \vartheta = \sigma_o^2$ και ελέγχεται σύμφωνα με τη σχέση

$$F = \frac{(\hat{\sigma}^2 - \sigma_o^2)^2}{Var(\hat{\sigma}^2)} \sim F_{1,\infty} \quad \text{ή} \quad z = \frac{\hat{\sigma}^2 - \sigma_o^2}{Sd(\hat{\sigma}^2)} \sim N(0,1) \tag{72}$$

όπου $\hat{\sigma}^2 = \mathbf{h}^T \hat{\vartheta}$, $Var(\hat{\sigma}^2) = 2\mathbf{h}^T \mathbf{J}^{-1}\mathbf{h}$ και $Sd(\hat{\sigma}^2) = \sqrt{Var(\hat{\sigma}^2)} = \sqrt{2\mathbf{h}^T \mathbf{J}^{-1}\mathbf{h}}$.

Τέλος, στην απλούστερη περίπτωση $H_a : \sigma_i^2 = \sigma_{oi}^2$, όπου ελέγχεται μία μόνο συνιστώσα, η σ_i^2, ο έλεγχος βασίζεται στη σχέση

$$F = \frac{(\hat{\sigma}_i^2 - \sigma_{oi}^2)^2}{Var(\hat{\sigma}_i^2)} \sim F_{1,\infty} \quad \text{ή} \quad z = \frac{\hat{\sigma}_i^2 - \sigma_{oi}^2}{Sd(\hat{\sigma}_i^2)} \sim N(0,1) \tag{73}$$

όπου $\hat{\sigma}_i^2$ είναι η τετραγωνική ανεπηρέαστη εκτίμηση ελάχιστης νόρμας της σ_i^2 και $Var(\hat{\sigma}_i^2) = (2\mathbf{J}^{-1})_{ii}$ η μεταβλητότητά της.

Στην τελευταία αυτή περίπτωση, όπου ελέγχεται κάθε συνιστώσα χωριστά, ο έλεγχος μπορεί να πάρει την ίδια μορφή με τον ολικό έλεγχο της μεταβλητότητας αναφοράς, όταν όμως η αρχική γνωστή τιμή σ_o^2 είναι κοινή για όλες τις συνιστώσες. Στην περίπτωση αυτή αποδεικνύεται ότι ο έλεγχος των υποθέσεων

$$H_o:\ \sigma_i^2 = \sigma_o^2\,, \ \text{έναντι των εναλλακτικών}\ H_a:\ \sigma_i^2 \neq \sigma_o^2 \tag{74}$$

για $i = 1,2,\ldots,m$, μπορεί να αναχθεί στον έλεγχο των υποθέσεων

$$H_o : \frac{\varphi_i}{tr\{\mathbf{W}\,\mathbf{Q}_i\}\sigma_o^2} = \frac{\varphi_i}{f_i\ \sigma_o^2} = 1 \ \ \text{έναντι των εναλλακτικών}\ H_a :\ \frac{\varphi_i}{f_i\ \sigma_o^2} \neq 1$$

Η μηδενική υπόθεση $H_o: \ \sigma_i^2 = \sigma_o^2$ γίνεται αποδεκτή, αν ισχύει η σχέση

$$F = \frac{\hat{\varphi}_i}{f_i \, \sigma_o^2} \ \sim \ F_{f_i, \infty} \tag{75}$$

όπου η τιμή του κριτηρίου βελτιστοποίησης $\hat{\varphi}_i$ δίνεται στις σχέσεις (13) και (21) και οι βαθμοί ελευθερίας f_i υπολογίζονται από τη σχέση $f_i = tr\{\mathbf{W}\,\mathbf{Q}_i\}$. Στη γεωδαιτική βιβλιογραφία αυτός ο έλεγχος δόθηκε από τους Remmer (1971), Persson (1982) και Koch (1987) και αποτελεί γενίκευση του ελέγχου της εσωτερικής ακρίβειας ενός δείγματος.

Στην περίπτωση των διαφορετικών επιδράσεων στην ακρίβεια της κάθε παρατήρησης, είναι χρήσιμος ο μονόπλευρος έλεγχος της σημαντικότητας κάποιων συνιστωσών της μεταβλητότητας αναφοράς

$$H_o: \ \sigma_i^2 = 0 \ \text{, σε σχέση με την εναλλακτική } H_a: \ \sigma_i^2 > 0 \tag{76}$$

με σκοπό να αποφασισθεί αν η επίδραση του συγκεκριμένου σφάλματος στην τελική ακρίβεια των μετρήσεων είναι σημαντική ή όχι. Ο έλεγχος, όταν ο αριθμός των παρατηρήσεων είναι μεγάλος, μπορεί να βασισθεί στη σχέση (72), θέτοντας $\sigma_{oi}^2 = 0$

$$F = \frac{\hat{\sigma}_i^4}{Var(\hat{\sigma}_i^2)} \ \sim \ F_{1,\infty} \quad \text{ή} \quad z = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\sqrt{Var(\hat{\sigma}_i^2)}} \ \sim \ N(0,1) \tag{77}$$

ανεξάρτητα του ότι η μηδενική υπόθεση βρίσκεται στο όριο του παραμετρικού της χώρου.

Σε διαφορετική περίπτωση, όταν οι βαθμοί ελευθερίας είναι μικροί, το θέμα του ελέγχου της σημαντικότητας κάποιας συνιστώσας της μεταβλητότητας αναφοράς διαφέρει και οι παραπάνω κλασικοί έλεγχοι δεν ισχύουν πια. Για τον λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί διάφοροι στατιστικοί έλεγχοι (βλ. π.χ Sirkkova and Whitkovsky, 2000) με σημαντικότερο ίσως τον έλεγχο του Seifert (1985), που βασίζεται στην ανάλυση κατά Cholesky του αντίστροφου πίνακα συμμεταβλητοτήτων

$$\mathbf{C}_{\hat{\vartheta}}^{-1} = \frac{1}{2}\mathbf{J} = \mathbf{L}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L} \tag{78}$$

όπου L είναι ο πάνω τριγωνικός πίνακας με μονάδα τα διαγώνια στοιχεία και $\mathbf{D}$ είναι διαγώνιος πίνακας. Αν ορίσουμε το διάνυσμα των ασυσχέτιστων στοιχείων z_i

$$\mathbf{z} = \mathbf{L}\,\hat{\vartheta} \tag{79}$$

με πίνακα μεταβλητοτήτων $\mathbf{C}_z = \mathbf{L}\,\mathbf{C}_{\hat{\vartheta}}\,\mathbf{L}^T = \mathbf{D}$, τότε ο έλεγχος βασίζεται στη σχέση

$$F = \frac{z_i}{z_i - \hat{\sigma}_i} = \frac{\sum_{j=1}^{m} J_{ji}\, \hat{\sigma}_j^2}{\sum_{j \neq i} J_{ji}\, \hat{\sigma}_j^2} \;\sim\; F_{f_1, f_2} \tag{80}$$

όπου οι βαθμοί ελευθερίας f_1 και f_2 δίνονται από τις σχέσεις

$$f_1 \approx 2\frac{z_i^2}{d_i} \;,\quad f_2 \approx 2\frac{(z_i - \vartheta_{oi})^2}{(2\mathbf{J}^{-1})_{ii} - d_i} \tag{81}$$

d_i είναι το διαγώνιο στοιχείο του πίνακα $\mathbf{D}$ και $\boldsymbol{\vartheta}_o$ είναι το διάνυσμα των αρχικών τιμών του $\boldsymbol{\vartheta}$. Για την περίπτωση όπου οι αρχικές τιμές θεωρούνται ίσες με τη μονάδα, οι παραπάνω τύποι γίνονται

$$f_1 \approx \frac{2}{d_i}\left[\sum_{k=1}^{i} L_{ik}\right]^2 \;,\quad f_2 \approx \frac{2}{(2\mathbf{J}^{-1})_{ii} - d_i}\left[\sum_{k=1}^{i} L_{ik} - 1\right]^2 \tag{82}$$

όπου L_{ik} είναι το στοιχείο της i σειράς και της k στήλης του πίνακα $\mathbf{L}$.

Για παράδειγμα, στην περίπτωση των τριών συνιστωσών

$$\boldsymbol{\Sigma} = \sigma_1^2 \mathbf{V}_1 + \sigma_2^2 \mathbf{V}_2 + \sigma_3^2 \mathbf{V}_3$$

η μηδενική υπόθεση H_o: $\sigma_3^2 = 0$ σε σχέση με την εναλλακτική H_a: $\sigma_3^2 > 0$, ή ισοδύναμα H_o: $\mathbf{u}_3 = \mathbf{0}$ σε σχέση με την εναλλακτική H_a: $\mathbf{u}_3 \neq \mathbf{0}$, γίνεται αποδεκτή αν ισχύει η σχέση

$$F = \frac{J_{13}\, \hat{\sigma}_1^2 + J_{23}\, \hat{\sigma}_2^2 + J_{33}\, \hat{\sigma}_3^2}{J_{13}\, \hat{\sigma}_1^2 + J_{23}\, \hat{\sigma}_2^2} \leq F_{f_1, f_2}^{\alpha/2} \tag{83}$$

όπου οι βαθμοί ελευθερίας f_1 και f_2 δίνονται από τις σχέσεις

$$f_1 = \frac{(J_{13} + J_{23} + J_{33})^2}{J_{33}} \,,\quad f_2 = \frac{2J_{13}^2}{J_{33}\, D}\left[\frac{Var(\hat{\sigma}_2^2)}{Var(\hat{\sigma}_1^2)\, Var(\hat{\sigma}_2^2) + Cov(\hat{\sigma}_1^2, \hat{\sigma}_2^2)}\right] \tag{84}$$

και οι μεταβλητότητες των $\hat{\sigma}_1^2$, $\hat{\sigma}_2^2$ δίνονται από τις σχέσεις

$$Var(\hat{\sigma}_1^2) = \frac{2}{D}\left(J_{22}\, J_{33} - J_{23}^2\right) \,,\quad Var(\hat{\sigma}_2^2) = \frac{2}{D}\left(J_{11}\, J_{33} - J_{13}^2\right) \tag{85}$$

ενώ η μεταξύ τους συμμεταβλητότητα από τη σχέση

$$Cov(\hat{\sigma}_1^2, \hat{\sigma}_2^2) = \frac{2}{D}\left(J_{23}\, J_{13} - J_{33}\, J_{12}\right) \tag{86}$$

όπου D είναι η ορίζουσα του πίνακα $\mathbf{J}$. Αν γίνει αποδεκτή η μηδενική υπόθεση, τότε οι τυχαίες επιδράσεις $\mathbf{u}_3$ μπορούν να θεωρηθούν ασήμαντες.

***Πίνακας 1**. Πίνακας ανάλυσης μεταβλητότητας (ANOVA) για τον έλεγχο των σταθερών και τυχαίων επιδράσεων.*

Μεταβολή	Άθροισμα τετραγώνων ($SS_{\#}$)	Βαθμοί ελευθερίας	Μέση μεταβολή ($s_{\#}^2$)	F
Μεταξύ δειγμάτων (A)	$am\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i*}-\bar{y})^2$	$a-1$	$\frac{SS_A}{a-1}$	$\frac{s_A^2}{s_E^2}$
Μεταξύ δειγμάτων (B)	$bm\sum_{i=1}^{b}(\bar{y}_{*i}-\bar{y})^2$	$b-1$	$\frac{SS_B}{b-1}$	$\frac{s_B^2}{s_E^2}$
Αλληλεπίδρασης (AB)	$m\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij*}-\bar{y}_{i*}-\bar{y}_{*j}+\bar{y})^2$	$(a-1)(b-1)$	$\frac{SS_{AB}}{(a-1)(b-1)}$	$\frac{s_{AB}^2}{s_E^2}$
Υπόλοιπη ή τυχαία (E)	$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{m}(y_{ijk}-\bar{y}_{ij*})^2$	$ab(m-1)$	$\frac{SS_E}{ab(m-1)}$	
Ολική (T)	$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{m}(y_{ijk}-\bar{y})^2$	$abm-1$	$\frac{SS_T}{abm-1}$	
$\bar{y}_{i*}=\frac{1}{bm}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{m}y_{ijk}$, $\bar{y}_{*j}=\frac{1}{am}\sum_{j=1}^{a}\sum_{k=1}^{m}y_{ijk}$, $\bar{y}_{ij*}=\frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}y_{ijk}$, $\bar{y}=\frac{1}{abm}\sum_{j=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{m}y_{ijk}$				

7. Παραδείγματα – Εφαρμογές

Παράδειγμα 1. Ένα παράδειγμα γραμμικού μικτού μοντέλου είναι αυτό της ανάλυσης μεταβλητότητας με δύο παράγοντες με αλληλεξάρτηση, όπου τα δεδομένα y_{ijk} τακτοποιούνται σε m υποπίνακες ($k=1, ..., m$), διαστάσεων $a\times b$ ($i=1,..., a,\ \ j=1, ..., b$). Το σύστημα των σχετικών εξισώσεων γράφεται

$$y_{ijk}=\mu+A_i+B_j+AB_{ij}+\varepsilon_{ijk} \tag{87}$$

όπου οι τιμές B_j του παράγοντα B και κατά συνέπεια οι AB_{ij} της αλληλοεπίδρασης AB θεωρούνται τυχαίοι αριθμοί που ακολουθούν την κανονική κατανομή

$$B_j\sim N(0,\sigma_B^2),\ \ AB_{ij}\sim N(0,\sigma_{AB}^2),\ \ \varepsilon_{ijk}\sim N(0,\sigma_\varepsilon^2) \tag{88}$$

(βλ. π.χ., P. Rao, 1997). Για τον έλεγχο σημαντικότητας των σταθερών επιδράσεων διατυπώνεται η μηδενική υπόθεση

$$H_o: A_1=A_2=\ldots=A_a=0 \tag{89}$$

και συγκρίνονται οι ανηγμένες μικτές εξισώσεις

$$y_{ijk} = \mu + A_i + e_{ijk} \quad , \quad e_{ijk} \sim N(0, \sigma_e^2) \tag{90}$$

όπου $\sigma_e^2 = \sigma_\varepsilon^2 + \sigma_B^2 + \sigma_{AB}^2$, με τις δεσμευμένες εξισώσεις $y_{ijk} = \mu + e_{ijk}$, από τις οποίες προκύπτει ως βέλτιστη ανεπηρέαστη εκτίμηση ο μέσος όρος των τιμών y_{ijk}

$$\hat{\mu} = \bar{y} = \frac{1}{abm} \sum_{j=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} \sum_{k=1}^{m} y_{ijk} \tag{91}$$

Η σύγκριση γίνεται με βάση σχέση

$$F = \frac{ab(m-1)}{a-1} \frac{\hat{\varphi}_H - \hat{\varphi}}{\hat{\varphi}} \sim F_{a-1, ab(m-1)} \tag{92}$$

ή, αν πάρουμε υπόψη μας ότι $\hat{\varphi}_H = SS_T$ και $\hat{\varphi} = SS_E$ σύμφωνα με τους συμβολισμούς της ανάλυσης μεταβλητότητας όπως δίνεται στον πίνακα (1), η παραπάνω σχέση γίνεται

$$F = \frac{ab(m-1)}{a-1} \frac{SS_T - SS_E}{SS_E} = \frac{ab(m-1)}{a-1} \frac{SS_A}{SS_E} \sim F_{a-1, ab(m-1)} \tag{93}$$

όπου λάβαμε επίσης υπόψη μας ότι $SS_T = SS_A + SS_E$ και τελικά καταλήγουμε στον γνωστό τύπο της ανάλυσης μεταβλητότητας με έναν παράγοντα σταθερών επιδράσεων

$$F_A = \frac{s_A^2}{s_E^2} \sim F_{a-1, ab(m-1)} \tag{94}$$

Οι προσδοκίες των δειγματικών μεταβλητοτήτων δίνονται στον πίνακα (2). Από τις προσδοκίες αυτές προκύπτουν οι εκτιμήσεις των μεταβλητοτήτων

$$\hat{\sigma}_B^2 = \frac{s_B^2 - s_E^2}{am} \quad , \quad \hat{\sigma}_{AB}^2 = \frac{s_{AB}^2 - s_E^2}{m} \quad \text{και} \quad \hat{\sigma}_\varepsilon^2 = s_E^2 \tag{95}$$

Πίνακας 2. *Προσδοκώμενες τιμές $E\{s_\#^2\}$ στην ανάλυση μικτών επιδράσεων με δύο παράγοντες*

s_A^2	s_B^2	s_{AB}^2	s_E^2
$\sigma_\varepsilon^2 + \frac{bm}{a-1} \sum_{i=1}^{a} A_i^2 + m\sigma_{AB}^2$	$\sigma_\varepsilon^2 + am\sigma_B^2$	$\sigma_\varepsilon^2 + m\sigma_{AB}^2$	σ_ε^2

Ο έλεγχος της σημαντικότητας των τυχαίων επιδράσεων γίνεται με τον έλεγχο της αντίστοιχης μεταβλητότητας, $H_o: \ \sigma_B^2 = 0$, που σύμφωνα με την παραπάνω σχέση είναι ισοδύναμος με τον έλεγχο $H_o: \ E\{s_B^2\} = E\{s_E^2\}$, ο οποίος βασίζεται στη σχέση

$$F_B = \frac{s_B^2}{s_E^2} \sim F_{b-1,ab(m-1)} \tag{96}$$

και έχει την ίδια μορφή που στην περίπτωση των σταθερών επιδράσεων ελέγχονται οι επιδράσεις B_j, δηλαδή με τον έλεγχο της μηδενικής υπόθεσης

$$H_o: \; B_1 = B_2 = \ldots = B_b = 0 \tag{97}$$

Παράδειγμα 2. Οι συνιστώσες που επηρεάζουν την εσωτερική ακρίβεια των παρατηρήσεων ενός θεοδολίχου είναι αυτές που προέρχονται από το σφάλμα ανάγνωσης (u_1), το σφάλμα κέντρωσης του θεοδολίχου και του στόχου (u_2), το σφάλμα σκόπευσης (u_3) και το σφάλμα οριζοντίωσης (u_4).

$$y_{ij} = f(\mathbf{x}) + u^{(1)} + \frac{\sin\gamma}{S_{ij}} u_{ij}^{(2)} + \frac{1}{S_{ij}} u_{ij}^{(3)} + \frac{\delta h_{ij}}{S_{ij}} u_{ij}^{(4)} \tag{98}$$

Η αρχική μεταβλητότητα της κάθε διεύθυνσης που μετριέται είναι

$$\sigma_{ij}^2 = \sigma_1^2 + \frac{\sin^2\gamma}{S_{ij}^2}\sigma_2^2 + \frac{1}{S_{ij}^2}\sigma_3^2 + \frac{\delta h_{ij}^2}{S_{ij}^2}\sigma_4^2 \tag{99}$$

όπου γ είναι η γωνία με κορυφή το έκκεντρο σημείο στάσης του θεοδολίχου, μεταξύ του θεωρητικού σημείου στάσης και του σημείου σκόπευσης, S_{ij} η απόσταση σκόπευσης και δh_{ij} η υψομετρική διαφορά ανάμεσα στο σημείο στάσης και σκόπευσης. Για τη ζενίθια γωνία οι παραπάνω τύποι γίνονται αντίστοιχα

$$y_{ij} = f(\mathbf{x}) + u^{(1)} + \frac{\sin^2 y_{ij}}{S_{ij}} u_{ij}^{(3)} + \sin 2y_{ij}\; u_{ij}^{(4)} \tag{100}$$

και

$$\sigma_{ij}^2 = \sigma_1^2 + \frac{\sin^4 y_{ij}}{S_{ij}^2}\sigma_3^2 + \sin^2 2y_{ij}\;\sigma_4^2 \tag{101}$$

Όταν οι αποστάσεις μεταξύ των σημείων στάσης του θεοδολίχου και σκόπευσης είναι μεγάλες, μόνο η συνιστώσα του σφάλματος ανάγνωσης είναι σημαντική. Επομένως, οι μετρήσεις των γωνιών θεωρούνται ισοβαρείς μεταξύ τους. Η υπόθεση αυτή γίνεται στα συνήθη δίκτυα των αποτυπώσεων. Όταν οι αποστάσεις σκόπευσης είναι της τάξης μερικών μέτρων, όλες οι συνιστώσες της αρχικής μεταβλητότητας ενδέχεται να είναι σημαντικές και δεν μπορούν να αγνοηθούν. Τότε, δεν ισχύει η υπόθεση των ισοβαρών παρατηρήσεων για τις μετρήσεις των γωνιών. Τέτοιες μετρήσεις γίνονται στα μικρά λεγόμενα τοπογραφικά δίκτυα, τα οποία εφαρμόζονται στη βιομηχανία, στις αποτυπώσεις και διαχρονικές παρακολουθήσεις μνημείων και μικρών τεχνικών έργων καθώς και σε άλλες τοπογραφικές εφαρμογές με μετρήσεις περιορισμένου μήκους, της τάξης μερικών μέτρων.

Παράρτημα Α. Σχετικά με τους βαθμούς ελευθερίας

Για τον υπολογισμό των βαθμών ελευθερίας ν_i της κατανομής F κατά τον έλεγχο της υπόθεσης $\mathbf{h}_i^T \boldsymbol{\beta} = z_i$ παρουσιάζονται στη σχετική βιβλιογραφία διάφοροι προσεγγιστικού τύποι (You et al., 2016, Witkovsky, 2012), από τους οποίους ο πιο δημοφιλής είναι (βλ. π.χ. Elston, 1998)

$$\nu_i \approx \frac{(\mathbf{h}_i^T \Sigma_{\hat{\beta}}\ \mathbf{h}_i)^2}{Var(\mathbf{h}_i^T \Sigma_{\hat{\beta}}\ \mathbf{h}_i)} = \frac{\hat{\sigma}_{\hat{e}}^4}{\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2)}$$

όπου $\Sigma_{\hat{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1}$ είναι ο πίνακας συμμεταβλητοτήτων των σταθερών παραμέτρων $\boldsymbol{\beta}$ και

$$\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2 = \mathbf{h}_i^T \Sigma_{\hat{\beta}}\ \mathbf{h}_i \approx \mathbf{g}^T \boldsymbol{\vartheta}$$

$$\hat{\sigma}^2(\hat{\sigma}_{\hat{e}}^2) = Var(\mathbf{h}_i^T \Sigma_{\hat{\beta}}\ \mathbf{h}_i) \approx \mathbf{g}_i^T \Sigma_{\hat{\vartheta}}\ \mathbf{g}_i$$

είναι οι μεταβλητότητα του σφάλματος κλεισίματος $\hat{\mathbf{e}}_i = \mathbf{h}_i^T \hat{\boldsymbol{\beta}} - z_i$ και η μεταβλητότητά της αντίστοιχα. Τα στοιχεία g_{ij} του κάθε διανύσματος $\mathbf{g}_i$ υπολογίζονται

$$g_{ij} = \mathbf{h}_i^T \frac{\partial \Sigma_{\hat{\beta}}}{\partial \vartheta_j} \mathbf{h}_i = \mathbf{h}_i^T \Sigma_j\ \mathbf{h}_i$$

όπου

$$\begin{aligned}\Sigma_j &= \frac{\partial \Sigma_{\hat{\beta}}}{\partial \vartheta_j} = \frac{\partial}{\partial \vartheta_j}(\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1} = (\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1} \frac{\partial}{\partial \vartheta_j}(\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})(\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1} = \\ &= (\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \vartheta_j} \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})\ (\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1} = \\ &= (\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{V}_j\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})\ (\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\end{aligned}$$

Στην ειδική περίπτωση που θεωρήσουμε δύο άγνωστες συνιστώσες της μεταβλητότητας αναφοράς σ_ε^2 και σ_u^2, τότε οι δύο πίνακες Σ_1 και Σ_2 υπολογίζονται από τις σχέσεις

$$\Sigma_1 = \frac{\partial \Sigma_{\hat{\beta}}}{\partial \sigma_u^2} = (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Z}\ \mathbf{K}\ \mathbf{Z}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})\ (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}$$

$$\Sigma_2 = \frac{\partial \Sigma_{\hat{\beta}}}{\partial \sigma_\varepsilon^2} = (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q}\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})\ (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}$$

ενώ στην πιο γενική περίπτωση των q τυχαίων παραμέτρων $\mathbf{u}_i$ ο κάθε πίνακας Σ_j $(j = 1,\ldots,q)$

$$\Sigma_j = \frac{\partial \Sigma_{\hat{\beta}}}{\partial \sigma_j^2} = (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Z}_j\mathbf{K}_j\ \mathbf{Z}_j^T\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})\ (\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}$$

και ο Σ_{q+1} είναι ο $\Sigma_2 = \dfrac{\partial \Sigma_{\hat{\beta}}}{\partial \sigma_\varepsilon^2}$ των προηγουμένων σχέσεων.

Παράρτημα Β. Ο έλεγχος των τυχαίων παραμέτρων

Έστω ότι το απλοποιημένο μοντέλο $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{v}$ οδηγεί στις εκτιμήσεις $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, $\hat{\mathbf{v}}$, $\hat{\varphi}$, f και $\hat{\sigma}^2$. Αν $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{U}\boldsymbol{\psi} + \mathbf{v}$ είναι ένα διευρυμένο μοντέλο στο οποίο λαμβάνονται υπόψη και η επίδραση των k παραμέτρων των στοιχείων του διανύσματος που είχε προηγούμενα αγνοηθεί, τότε οι νέες εκτιμήσεις είναι $\hat{\boldsymbol{\beta}}_\delta$, $\hat{\boldsymbol{\psi}}$, $\hat{\mathbf{v}}_\delta, \hat{\varphi}_\delta, f_\delta$ και $\hat{\sigma}_\delta^2$. Ο ολικός έλεγχος σημαντικότητας των νέων παραμέτρων ($H_o : \boldsymbol{\psi} = \mathbf{0}$ ~ $H_a : \boldsymbol{\psi} \neq \mathbf{0}$) αποτελεί κι αυτός εφαρμογή του ελέγχου της γενικής υπόθεσης και προκύπτει από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων των διευρυμένων εξισώσεων $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{U}\boldsymbol{\psi} + \mathbf{v}$ με τα αποτελέσματα των αρχικών εξισώσεων $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{v}$. Η σύγκριση αυτή μπορεί να προκύψει από τα αποτελέσματα της λύσης μόνο του διευρυμένου μοντέλου

$$F = \frac{1}{k}\hat{\boldsymbol{\psi}}^T\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\hat{\psi}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\psi}} = \frac{\hat{\boldsymbol{\psi}}^T\mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\psi}}}{k\ \hat{\sigma}_\delta^2} = \frac{f_\delta}{k}\frac{\hat{\varphi} - \hat{\varphi}_\delta}{\hat{\varphi}_\delta} = \frac{f_\delta}{k}\frac{\delta\hat{\varphi}}{\hat{\varphi}_\delta} \sim F_{k,f_\delta}$$

$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T\mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\psi}}$, ή μπορεί να προκύψει από τη λύση μόνο του αρχικού μοντέλου

$$F = \frac{f-k}{k}\frac{\delta\hat{\varphi}}{\hat{\varphi} - \delta\hat{\varphi}} \sim F_{k,f-k}$$

όπου οι εκτιμήσεις $\hat{\boldsymbol{\psi}}$ των νέων παραμέτρων και του πίνακα των συντελεστών των συμμεταβλητοτήτων τους $\mathbf{Q}_{\hat{\psi}}$ προκύπτουν από τις σχέσεις

$$\mathbf{Q}_{\hat{\psi}} = (\mathbf{U}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q}_{\hat{v}}\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{U})^{-1} =$$

$$= [\mathbf{U}^T\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{M} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T)\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{U}]^{-1} = (\mathbf{U}^T\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\mathbf{U})^{-1}$$

$$\hat{\boldsymbol{\psi}} = \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}\ \mathbf{U}^T\mathbf{M}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}}$$

και από τα αποτελέσματα του αρχικού μοντέλου $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{v}$. Τελικά

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T\mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1}\ \hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\mathbf{v}}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{U}\ (\mathbf{U}^T\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\mathbf{U})^{-1}\mathbf{U}^T\mathbf{M}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}}$$

Μετά από πράξεις, όπου θεωρήσαμε ότι $\tilde{\sigma}^2 = \hat{\varphi}/(f-k) = f\,\hat{\sigma}/(f-k)$, προκύπτει ότι

$$T^2 = \frac{\delta\hat{\varphi}}{\tilde{\sigma}^2 k} = \frac{f-k}{f}\frac{\delta\hat{\varphi}}{\hat{\sigma}^2 k} \sim \frac{f\ F_{k,f-k}}{f - k + k\ F_{k,f-k}} \equiv T_{k,f-k}^2$$

όπου $T^2_{k,f-k}$ η γενικευμένη συνάρτηση Hotteling με βαθμούς ελευθερίας k και $f-k$. Αντιστρέφοντας τη σχέση

$$\frac{f\ F_{k,f-k}}{f-k+k\ F_{k,f-k}} \equiv T^2_{k,f-k}$$

προκύπτει ότι

$$T^2_{k,f-k}\ \frac{f-k}{f-k\ T^2_{k,f-k}} \equiv F_{k,f-k}$$

απ' όπου προκύπτει τελικά η εναλλακτική μορφή του ελέγχου

$$F = T^2\ \frac{f-k}{f-k-k\ T^2} \sim F_{k,f-k}$$

Αν θεωρήσουμε ότι $\mathbf{U}=\mathbf{I}$, τότε $\mathbf{Q}_{\hat{\psi}} = \mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon}$, $\hat{\boldsymbol{\psi}} = \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}\ \mathbf{M}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}}$ και

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T \mathbf{Q}^{-1}_{\hat{\psi}}\ \hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{M}^{-1}\ \mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon} \mathbf{M}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}} = \hat{\boldsymbol{\xi}}^T \mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon}\ \hat{\boldsymbol{\xi}}$$

όπου $\hat{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{M}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}}$ τα τροποποιημένα ολικά υπόλοιπα.

Στην περίπτωση που ελέγχεται μία ομάδα παρατηρήσεων (π.χ. η ομάδα με δείκτη 2) ως προς τις υπόλοιπες παρατηρήσεις (ως προς την ομάδα με δείκτη 1) τότε το διευρυμένο σύστημα των γραμμικών εξισώσεων γράφεται

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \end{bmatrix} \boldsymbol{\beta} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} \boldsymbol{\psi}_2 + \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \end{bmatrix}$$

και αντίστοιχα με τα παραπάνω υπολογίζονται οι ποσότητες

$$\mathbf{Q}_{\hat{\psi}} = [\mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon}]_{22} = \mathbf{W}^{-1}_{22}\ ,\ \ \hat{\boldsymbol{\psi}}_2 = \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}\ [\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{v}}]_2$$

και

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T \mathbf{Q}^{-1}_{\hat{\psi}}\ \hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\boldsymbol{\xi}}^T_2 \mathbf{W}^{-1}_{22}\ \hat{\boldsymbol{\xi}}_2$$

όπου $\hat{\boldsymbol{\xi}}_2 = [\mathbf{M}^{-1}\ \hat{\mathbf{v}}]_2$ τα τροποποιημένα ολικά υπόλοιπα για τις n_2 παρατηρήσεις της ομάδας που ελέγχεται.

Για την εφαρμογή του ελέγχου των σφαλμάτων $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$, στη γενική περίπτωση που οι παρατηρήσεις είναι συσχετισμένες μεταξύ τους, υπολογίζονται τα τροποποιημένα σφάλματα

$$\mathbf{Q}_{\hat{\psi}} = [\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Q}_{\hat{\varepsilon}}\ \mathbf{Q}^{-1}]^{-1} = \mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon}\ ,\ \ \hat{\boldsymbol{\psi}} = \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}\ \mathbf{Q}^{-1}\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\ \ \text{οπότε}$$

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T \mathbf{Q}^{-1}_{\hat{\psi}}\ \hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon}\ \mathbf{Q}^{-1}\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\boldsymbol{\xi}}^T \mathbf{W}^{-1}_{\varepsilon\varepsilon}\ \hat{\boldsymbol{\xi}}$$

όπου τα τροποποιημένα σφάλματα $\hat{\xi}$ και ο πίνακας συμμεταβλητοτήτων τους υπολογίζονται από τις σχέσεις

$$\hat{\xi} = \mathbf{Q}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Q}^{-1}\,\mathbf{Q}\,\mathbf{M}^{-1}\,\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{M}^{-1}\,\hat{\mathbf{v}}\,,\ \ \mathbf{Q}_{\hat{\xi}} = \mathbf{Q}^{-1}\,\mathbf{Q}_{\hat{\varepsilon}}\,\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}$$

και πήραμε υπόψη μας ότι $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Q}\,\mathbf{M}^{-1}\,\hat{\mathbf{v}}$.

Κατά τον ίδιο τρόπο ο έλεγχος των τυχαίων επιδράσεων $\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}}$ βασίζεται στις τροποποιημένες τιμές τους και στον πίνακα συμμεταβλητοτήτων τους

$$\hat{\xi} = \mathbf{Q}_e^{-1}\,\hat{\mathbf{e}} = (\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T)^{-1}\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} = (\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T)^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T\mathbf{M}^{-1}\,\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{M}^{-1}\,\hat{\mathbf{v}}$$

$$\mathbf{Q}_{\hat{\xi}} = (\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T)^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{Q}_{\hat{u}}\,\mathbf{Z}^T(\mathbf{Z}\mathbf{K}\mathbf{Z}^T)^{-1} = \mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}$$

όπου πήραμε υπόψη μας τη σχέση (7), $\mathbf{Q}_{\hat{u}} = \mathbf{K}\,\mathbf{Z}^T\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}\,\mathbf{Z}\mathbf{K}$. Αποδεικνύεται εύκολα ότι

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T\mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\mathbf{u}}^T\mathbf{Z}^T(\mathbf{Z}\mathbf{Q}_{\hat{u}}\mathbf{Z}^T)^{-1}\mathbf{Z}\hat{\mathbf{u}} = \hat{\xi}^T\mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}^{-1}\,\hat{\xi}$$

όπου $\hat{\boldsymbol{\psi}} = \mathbf{Q}_{\hat{\psi}}(\mathbf{Z}\mathbf{Q}_{\hat{u}}\,\mathbf{Z}^T)^{-1}\mathbf{Z}\,\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{v}}$ και μετά από πράξεις $\mathbf{Q}_{\hat{\psi}} = \mathbf{W}_{\varepsilon\varepsilon}^{-1}$. Αποδεικνύεται δηλαδή ότι σε κάθε περίπτωση ισχύει

$$\delta\hat{\varphi} = \hat{\boldsymbol{\psi}}^T\mathbf{Q}_{\hat{\psi}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\psi}} = \hat{\mathbf{e}}^T\mathbf{Q}_{\hat{e}}^{-1}\,\hat{\mathbf{e}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^T\mathbf{Q}_{\hat{\varepsilon}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\mathbf{v}}^T\mathbf{Q}_{\hat{v}}^{-1}\,\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{u}}^T\mathbf{Q}_{\hat{u}}^{-1}\,\hat{\mathbf{u}}$$

όπου $\mathbf{Z}^T(\mathbf{Z}\mathbf{Q}_{\hat{u}}\,\mathbf{Z}^T)^{-1}\,\mathbf{Z} = \mathbf{Q}_{\hat{u}}^{-1}$.

Βιβλιογραφία

Akaike, H. (1973). Information theory and an extension of the maximum likelihood principle. In: Petrov, B. N. and F. Csaki (eds.), *Second International Symposium on Information Theory*. Akadémiai Kiado, Budapest.

Box, G. E. P. and G. S. Tiao (1973). *Bayesian Inference in Statistical Analysis*. Addison-Wesley.

Breslow, N. E. and D. G. Clayton (1993). Approximate Inference in Generalized Linear Mixed Models. Journal of the American Statistical Association, March 1993, 9-25.

Daniels, H. (1939). The estimation of components of variance. *J. Roy. Stat. Soc.*, Suppl. 6, 186-197.

Δερμάνης, Α. (1987). *Συνορθώσεις Παρατηρήσεων και Θεωρία Εκτίμησης*. Εκδόσεις Ζήτη.

Dermanis, A. and D. Rossikopoulos (1997). Statistical Inference in Integrated Geodesy. *IUGG XXth General Assemply*. Vienna, August 11-24, 1997.

Drygas, H. (1977): Best quadratic unbiased estimation in variance-covariance component models. *Math. Operationsforsch. Statist.*, *Series Statistics*, 8:2, pp. 211-231

Fai, A.H.T. and Cornelius, P.L. (1996). Approximate F-tests of Multiple Degree of Freedom Hypotheses in Generalized Least Squares Analyses of Unbalanced Split-plot Experiments. *Journal of Statistical Computing and Simulation* 54, 363-378.

Fan, Y. and R. Li (2012). Variable Selection in Lineaar Mixed Effects Models. *The Annals of Statistics*, Vol. 40, No. 4, 2043-2068.

Elston, D. A. (1998). Estimation of denominator degrees of freedom of *F*-Distributions for assessing Wald Statistics for fixed-effect in unbalanced mixed models. *Biometrics* 54, 1085-1096.

Fisher, RA (1918). The correlation between relatives on the supposition of Mendelian inheritance. *Transactions of the Royal Society of Edinburgh* 52 (2): 399–433.

Giesbrecht, F.G., Burns, J.C. (1985). Two-stage analysis based on a mixed model: Large-sample asymptotic theory and small-sample simulation results. *Biometrics* 41, 477 – 486.

Grafarend, E. and B. Schaffrin (1979): Variance - Covariance Component Estimation of Helmert Type. *Surveying and Mapping*, Vol. XXXIX, No. 3, pp. 225-234.Hartley and Rao (1967).

Harville. D. A. (1969): Quadratic unbiased estimation of variance components for the one-way classification. *Biometrika* 56, 313-326.

Helmert FR (1907): Die ausgleichungsrechnung nach der methode der kleinsten quadrate. 2. Auflage, Verlag von BG Teubner, Leipzig/Berlin.

Henderson, C. R. (1953): Estimation of variance and covariance components, Biometrics 9: 226-252.

Henderson, C. R., O. Kempthorne, S. R. Searle and C. M. von Krosigk (1959). The Estimation of Environmental and Genetic Trends from Records Subject to Culling. *Biometrics* (International Biometric Society) 15 (2): 192–218.

Henderson, C. R. (1984). ANOVA, MIVQUE, REML, and MO Algorithms for Estimation of Variances and Covariances. In Statistics: *An Appraisal*, Proceedings 50th Anniversary Conference, Ames, IA: Iowa State Press.

Kackar, R.N., Harville, D.A. (1984). Approximations for standard errors of estimators of fixed and random effects in mixed linear models. *Journal of the American Statistical Association* 79, 853 – 862.

Kenward, M. G. and Roger, J. H. (1997). Small Sample Inference for Fixed Effects from Restricted Maximum Likelihood. *Biometrics* 53, 983-997.

Khuri, A. I., T. Mathew and B. K. Sinha (1998). *Statistical tests for Mixed Linear Models*. Wiley, New York.

Kleffe, J. And B. Seifert (1988). On the role of MINQUE in testing of hypothesis under mixed linear models. *Communications in Statistics*, *Theory and Methods* 17, 1287-1309.

Krakiwsky, E. and Z. F. Biacs (1990): Least Squares Collocation and Statistical Testing. *Bull. Geod.* 64, 73-87.

McLean, R. A. and W. L. Sanders (1988). Approximated Degrees of Freedom for Standard Errors in Mixed Linear Models. In *Proceedings of the Statistical Computing Section*, American Statistical Association, 50-59.

McLean, R. A., W. L. Sanders and W. W. Stroup (1991). A unified approach to mixed linear models. *The American Statistician*, Vol. 45, No. 1, 5464.

Müller, S., J. L. Scealy and A. H. Welsh (2013). Model selection in linear mixed models. *Statistical Science*, Vol. 28, No. 2, 135-167.

Nobre, J. S. and J. M. Singer (2007). Residual analysis for linear mixed models. *Biometrical Journal* 49, 863-875.

Patterson, H. D. and R. Thompson (1971). Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. Biometrica 58, 545-554.

Rao, C. R. (1971a). Estimation of variance and covariance components: MINQUE theory. *J. Multivariate Anal.*, 1, 257–275.

Rao, C. R. (1971b). Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. *J. Multivariate Anal.*, 1, 445–456.

Rao, C. R. (1972). Estimation of variance and covariance components in linear models. *J. Amer. Statist. Assoc.*, 67, pp. 112–115.

Rao, C. R. And J. Kleffe (1988). *Estimation of Variance Components and Applications*. North Holland.

Rao, P.S.R.S (1997). *Variance Component Estimation. Mixed models, methodologies and applications.* Chapman & Hall.

Ρωσσικόπουλος, Δ. (1992). *Τοπογραφικά δίκτυα και υπολογισμοί*. Εκδόσεις Ζήτη.

Ρωσσικόπουλος, Δ. (2015). Ζάρια, μεσημβρινοί, γονίδια και γεωγραφίες. Μια σύντομη ιστορία της στατιστικής. Στον τόμο αφιερωμένο στον Ομότιμο Καθηγητή Μύρωνα Μυρίδη: Αρβανίτης κ.ά. (Επ. Έκδ.). *Χαρτογραφίες Νου, Ψυχής και Γνώσης*. Τμήμα Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών, ΑΠΘ., 134-152.

Satterthwaite, F.E. (1946). An approximate distribution of estimates of variance components. *Biometrics Bulletin* 2 (6), 110 – 114.

Schaffrin, B. (1987). Less Sensitive tests by intrducing stochastic linear hypotesis. Proc. *2nd Inter. Tampere Conference in Statistics*. Finland, June 1987.

Schaffrin, B. (1988). Tests for random effects based on homogeneously linear predictors. *Workshop on Theory and Practice in Data Analysis*, 19-21 August, Berlin.

Schaffrin, B. and Y. Bock (1994): Geodetic deformation analysis based on robust inverse theory. *Manusscripta geodaetica* 19, 31-44.

Seely, J. (1970). Linear spaces and unbiased estimation. *Ann. Math. Statist*. 41, 1725-1734.

Seely, J. (1970). Linear spaces and unbiased estimation – an application to the mixed linear model. Ann. Math. Statist. 41, 1735-1748.

Seifert, B. (1985). Estimation and tests of variance components using the MINQUE method. *Statistics*, 16, 621-635.

Singer, J. M., J. S. Nobre and F. M. Rocha (2013). Diagnostic and treatment for linear mixed models. *Proceedings 59th ISI Worl Statistics Congress*, 25-30 August 2013, Hong Kong (Session CPS203), 5486-5491.

Silvey, S. D. (1959). The Lagrangian Multiplier Test. *Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 30, No. 2, 389-407.

Townsend, E. C. (1968). *Unbiased estimators of variance components in simple unbalanced designs*. Ph.D. Thesis, Cornell University, Ithaca, N.Y.

Townsend, E. C. and S. R. Searle (1971): Best quadratic unbiased estimation of variance components from unbalanced data in the one-way classification, *Biometrics*, 27, pp. 643–657.

You C., S. Müller and J. T. Ormerod (2016). On generalized degrees of freedom with application in linear mixed models selection. *Stat. Comput*. 26, 199-210.

Wald, A. (1943). Tests of Statistical Hypotheses Concerning Several Parameters When the Number of Observations is Large. *Transactions of the American Mathematical Society*, 54.

Wei, M. (1987): Statistical Problems in Collocation. *Manuscripta Geodaetica* 12: 282-289.

Witkovsky V. (2012). Estimation, testing and prediction regions of the fixed and random effects by solving the Henderson's mixed model equations. *Measurement Science Review*, Vol. 12, No. 6, 234-248.