

JERZY K. BAKSALARY i RADOSŁAW KALA (Poznań)

Estymowalność liniowych funkcji parametrycznych w jednowymiarowym modelu liniowym

(Praca przyjęta do druku 12.05.1976)

0. Wstęp. Problem estymowalności pojawia się przy opracowywaniu doświadczeń wówczas, gdy zachodzi konieczność sprawdzenia, czy interesujące badacza funkcje parametryczne mają liniowe estymatory nieobciążone. Na problem ten należy zwrócić uwagę chociażby dlatego, że w wielu pracach i programach obliczeniowych jest on obchodzony poprzez nakładanie na parametry modelu pewnych dodatkowych związków zapewniających estymowalność wszystkich funkcji parametrycznych. Tymczasem postępowanie takie jest uzasadnione jedynie wtedy, gdy wprowadzane do modelu związki reprezentują pewną dodatkową wiedzę *a priori* o jego parametrach, natomiast stosowanie takiej procedury w sposób mechaniczny, jedynie w celu zapewnienia estymowalności wszystkich funkcji parametrycznych, może prowadzić do błędów w interpretacji wyników, na co zwrócili uwagę między innymi Searle [17], str. 209 i 212, oraz Pringle i Rayner [10], str. 93–98 i 118.

Niniejsza praca zawiera przegląd kryteriów estymowalności liniowych funkcji parametrycznych w jednowymiarowym modelu liniowym wraz z dowodami podanymi w jednolitym języku algebry macierzy. Dodatkowo, w paragrafie ostatnim, przedstawiono próbę oceny tychże kryteriów z numerycznego punktu widzenia oraz wskazano istniejące algorytmy i procedury użyteczne przy ich stosowaniu.

W pracy stosowane są następujące oznaczenia:

- $\mathcal{M}_{m,n}$ — zbiór $m \times n$ -wymiarowych macierzy rzeczywistych,
- \mathbf{I} — macierz jednostkowa (stopnia wynikającego z kontekstu),
- \mathbf{A}' — transpozycja macierzy \mathbf{A} ,
- \mathbf{A}^{-1} — odwrotność macierzy \mathbf{A} ,
- \mathbf{A}^- — g -odwrotność macierzy \mathbf{A} , tzn. dowolna macierz spełniająca warunek $\mathbf{A}\mathbf{A}^-\mathbf{A} = \mathbf{A}$,
- \mathbf{A}^+ — odwrotność Moore'a-Penrose'a macierzy \mathbf{A} , tzn. macierz spełniająca warunki: $\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A}$, $\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+$, $(\mathbf{A}\mathbf{A}^+)' = \mathbf{A}\mathbf{A}^+$, $(\mathbf{A}^+\mathbf{A})' = \mathbf{A}^+\mathbf{A}$,
- $r(\mathbf{A})$ — rząd macierzy \mathbf{A} ,
- $\text{tr}(\mathbf{A})$ — ślad macierzy \mathbf{A} ,
- $\mathcal{C}(\mathbf{A})$ — podprzestrzeń rozpięta na kolumnach macierzy \mathbf{A} ,



$\mathcal{C}^\perp(\mathbf{A})$ — dopełnienie ortogonalne (w sensie standardowego iloczynu skalarnego) podprzestrzeni $\mathcal{C}(\mathbf{A})$,

$\mathcal{R}(\mathbf{A})$ — podprzestrzeń rozpięta na wierszach macierzy \mathbf{A} .

Ponadto, przy odwoływaniu się do twierdzeń i definicji używana jest litera T zamiast wyrazu *twierdzenie*, a litera D zamiast wyrazu *definicja*.

1. Postawienie problemu. Rozważania nasze dotyczą modelu liniowego postaci

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\xi} + \mathbf{e},$$

gdzie $\mathbf{y} \in \mathcal{M}_{N,1}$ jest wektorem obserwowanych zmiennych losowych, $\mathbf{X} \in \mathcal{M}_{N,p}$ jest znaną macierzą dowolnego rzędu, $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{M}_{p,1}$ jest wektorem nieznanych parametrów, a $\mathbf{e} \in \mathcal{M}_{N,1}$ jest wektorem błędów losowych. Załóżmy początkowo, że $E(\mathbf{e}) = \mathbf{0}$ oraz $D(\mathbf{e}) = \sigma^2 \mathbf{I}$, gdzie $E(\mathbf{e})$ i $D(\mathbf{e})$ oznaczają odpowiednio wartość oczekiwaną i macierz kowariancji wektora losowego \mathbf{e} , a σ^2 jest nieznanym parametrem dodatnim. Tak określony model będziemy oznaczać symbolem

$$(1.1) \quad (\mathbf{y}, \mathbf{X}\boldsymbol{\xi}, \sigma^2 \mathbf{I}).$$

Postawmy pytanie, czy wektor parametrów $\boldsymbol{\xi}$ jest w tym modelu estymowalny, tzn. czy istnieje taka macierz $\mathbf{A} \in \mathcal{M}_{p,N}$, że dla każdego $\boldsymbol{\xi}$

$$E(\mathbf{A}\mathbf{y}) = \boldsymbol{\xi}.$$

Wobec założeń modelowych relacja ta jest równoważna tożsamości (względem $\boldsymbol{\xi}$)

$$\mathbf{A}\mathbf{X}\boldsymbol{\xi} \equiv \boldsymbol{\xi},$$

a ta z kolei równość

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{I}.$$

Wynika stąd, że wektor $\boldsymbol{\xi}$ jest estymowalny wtedy i tylko wtedy, gdy macierz \mathbf{X} ma odwrotność lewostronną, na to zaś (patrz np. [18], str. 27) potrzeba i wystarcza, aby była ona pełnego rzędu kolumnowego. Okazuje się więc, że w modelu liniowym (1.1), w którym założenie o pełności rzędu macierzy \mathbf{X} nie jest spełnione, nie istnieją takie liniowe funkcje wektora \mathbf{y} , które byłyby nieobciążonymi estymatorami poszczególnych składowych wektora $\boldsymbol{\xi}$.

Fakt nieestymowalności wektora $\boldsymbol{\xi}$ nie wyklucza jednak estymowalności pewnych liniowych funkcji jego składowych. Najprostszy przykład stanowią tu funkcje postaci $\mathbf{X}\boldsymbol{\xi}$, których nieobciążonymi estymatorami liniowymi są np. odpowiednie składowe wektora \mathbf{y} . Spostrzeżenie to stanowi podstawę koncepcji polegającej na wyróżnieniu w klasie wszystkich liniowych funkcji parametrycznych podklasy funkcji estymowalnych, rozumianych zgodnie z następującą definicją.

DEFINICJA 1.1. Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\boldsymbol{\xi}$, gdzie $\mathbf{C} \in \mathcal{M}_{k,p}$, nazywamy *estymowalnymi w modelu* $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\boldsymbol{\xi}, \sigma^2 \mathbf{I})$, jeżeli istnieje taka macierz $\mathbf{A} \in \mathcal{M}_{k,N}$, że dla każdego $\boldsymbol{\xi}$

$$(1.2) \quad E(\mathbf{A}\mathbf{y}) = \mathbf{C}\boldsymbol{\xi}. \quad \blacksquare$$

Autorem przedstawionego podejścia do problemu estymowalności jest Bose [6]. On też jest autorem pierwszego kryterium, które przytaczamy poniżej jako

TWIERDZENIE 1.1. *Liniowe funkcje parametryczne $C\xi$ są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{I})$ wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$(1.3) \quad \mathcal{R}(C) \subset \mathcal{R}(X).$$

D o w ó d. Jeżeli funkcje $C\xi$ są estymowalne, to na mocy D1.1 istnieje macierz A spełniająca warunek (1.2), który można napisać w postaci $AX\xi = C\xi$, jako że $E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\xi$. Wobec dowolności ξ wynika stąd równość $AX = C$, a z niej relacja (1.3).

Na odwrót, inkluzja (1.3) implikuje istnienie takiej macierzy L , że $C = LX$. Wtedy dla każdego ξ

$$E(L\mathbf{y}) = LX\xi = C\xi,$$

co na mocy D1.1 dowodzi estymowalności funkcji $C\xi$. ■

W następujących paragrafach pracy podamy dalsze kryteria estymowalności funkcji parametrycznych, dla celów numerycznych wygodniejsze niż (1.3), natomiast tutaj poruszymy jeszcze inny aspekt zagadnienia, a mianowicie problem, na ile dotychczasowe rozważania pozostają słuszne dla modelu

$$(1.4) \quad (\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V}),$$

w którym \mathbf{V} jest dowolną znaną macierzą określoną nieujemnie.

Na początek kilka uwag o samym modelu. Jeżeli przez λ oznaczymy dowolny wektor taki, że $\lambda \in \mathcal{C}^\perp([\mathbf{X} : \mathbf{V}])$, to $\lambda'\mathbf{X} = \mathbf{0}$ i $\lambda'\mathbf{V} = \mathbf{0}$, a stąd

$$E(\lambda'\mathbf{y}) = \lambda'\mathbf{X}\xi = \mathbf{0}$$

oraz

$$\text{Var}(\lambda'\mathbf{y}) = \sigma^2\lambda'\mathbf{V}\lambda = \mathbf{0}.$$

Tak więc, z prawdopodobieństwem 1 (w skrócie: z pr. 1), $\lambda'\mathbf{y} = \mathbf{0}$, czyli $\lambda \in \mathcal{C}^\perp(\mathbf{y})$. Wobec dowolności λ mamy

$$\mathcal{C}^\perp([\mathbf{X} : \mathbf{V}]) \subset \mathcal{C}^\perp(\mathbf{y}) \text{ z pr. 1,}$$

a w konsekwencji

$$\mathcal{C}(\mathbf{y}) \subset \mathcal{C}([\mathbf{X} : \mathbf{V}]) \text{ z pr. 1.}$$

Warunek

$$(1.5) \quad \mathbf{y}_0 \in \mathcal{C}([\mathbf{X} : \mathbf{V}]),$$

gdzie \mathbf{y}_0 oznacza zaobserwowaną wartość wektora losowego \mathbf{y} , wyprowadzony w podany wyżej sposób przez Rao [14], a nieco inaczej przez Zyskinda [20], stanowi warunek niesprzeczności modelu (1.4).

Oznaczmy teraz przez \mathbf{K} taką macierz, dla której $\mathcal{C}(\mathbf{K}) = \mathcal{C}^\perp(\mathbf{V})$. Wówczas $\mathbf{K}'\mathbf{V} = \mathbf{0}$, a stąd

$$D(\mathbf{K}'\mathbf{y}) = \sigma^2\mathbf{K}'\mathbf{V}\mathbf{K} = \mathbf{0}.$$

Tak więc

$$E(\mathbf{K}'\mathbf{y}) = \mathbf{K}'\mathbf{y} \text{ z pr. 1,}$$

skąd, wobec $E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\xi$, wynika, że z prawdopodobieństwem 1

$$(1.6) \quad \mathbf{K}'\mathbf{X}\xi = \mathbf{K}'\mathbf{y}.$$

Po zastąpieniu w (1.6) wektora losowego \mathbf{y} jego zaobserwowaną wartością \mathbf{y}_0 warunek ten wyraża restrykcje na wektor parametrów ξ , w naturalny sposób związane z osobliwością macierzy \mathbf{V} . Oznaczając $\mathbf{K}'\mathbf{y}_0$ przez \mathbf{d} możemy je napisać w postaci

$$(1.7) \quad \mathbf{K}'\mathbf{X}\xi = \mathbf{d}.$$

Jest jasne, że od restrykcji (1.7) musimy wymagać, aby były one niesprzeczne jako układ równań. Okazuje się, że wymaganie to ma ścisły związek z niesprzecznością modelu (1.4) wyrażoną relacją (1.5). Podaje go

TWIERDZENIE 1.2. *Warunkiem koniecznym i dostatecznym niesprzeczności modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ jest niesprzeczność układu równań $\mathbf{K}'\mathbf{X}\xi = \mathbf{d}$.*

D o w ó d. Załóżmy najpierw niesprzeczność modelu (1.4). Wtedy na mocy (1.5)

$$\mathbf{d} = \mathbf{K}'\mathbf{y}_0 \in \mathcal{C}([\mathbf{K}'\mathbf{X} : \mathbf{K}'\mathbf{V}]) = \mathcal{C}([\mathbf{K}'\mathbf{X} : \mathbf{0}]) = \mathcal{C}(\mathbf{K}'\mathbf{X}),$$

co zapewnia niesprzeczność układu równań (1.7).

Na odwrót, z niesprzeczności układu (1.7) wynika istnienie takiego wektora λ , że $\mathbf{d} = \mathbf{K}'\mathbf{X}\lambda$. Lecz, z drugiej strony, $\mathbf{d} = \mathbf{K}'\mathbf{y}_0$, więc

$$\mathbf{K}'(\mathbf{y}_0 - \mathbf{X}\lambda) = \mathbf{0},$$

co oznacza, że $(\mathbf{y}_0 - \mathbf{X}\lambda) \in \mathcal{C}^\perp(\mathbf{K})$. Ponieważ jednak $\mathcal{C}^\perp(\mathbf{K}) = \mathcal{C}(\mathbf{V})$, więc $(\mathbf{y}_0 - \mathbf{X}\lambda) \in \mathcal{C}(\mathbf{V})$, a zatem istnieje taki wektor μ , że

$$\mathbf{y}_0 = \mathbf{X}\lambda + \mathbf{V}\mu,$$

co implikuje relację (1.5) wyrażającą niesprzeczność modelu (1.4). ■

Na gruncie powyższych uwag o modelu (1.4) przejdźmy do rozważenia w nim problemu estymowalności. Fakt pojawienia się w tym modelu restrykcji (1.7) powoduje, iż bezpośrednie przeniesienie nań D1.1 nie jest możliwe. Konieczną jej modyfikację uwzględnia

DEFINICJA 1.2. Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$, gdzie $\mathbf{C} \in \mathcal{M}_{k,p}$, nazywamy *estymowalnymi w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$* , jeżeli istnieje taka macierz $\mathbf{A} \in \mathcal{M}_{k,N}$, że dla każdego ξ spełniającego warunek (1.7) zachodzi równość (1.2). ■

Zauważmy, że D1.1 wynika z definicji powyższej, jeśli bowiem macierz \mathbf{V} jest nieosobliwa, to $\mathcal{C}^\perp(\mathbf{V}) = \{\mathbf{0}\}$. Stąd $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ i w konsekwencji wektor parametrów ξ nie podlega żadnym restrykcjom.

Jest interesujące zapytać teraz, czy wraz ze zmianą definicji ulega zmianie również kryterium estymowalności wyrażone w T1.1. Okazuje się, że nie, przy czym wzmianka o możliwości takiego uogólnienia tego kryterium znajduje się w [21], natomiast prowadzące do tego wniosku rozumowanie podane jest w [20]. Przytoczymy je tutaj w nieco zmodyfikowanej formie jako dowód następującego twierdzenia.

TWIERDZENIE 1.3. *Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$ są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ wtedy i tylko wtedy, gdy spełniona jest relacja (1.3).*

D o w ó d. Jeżeli zachodzi relacja (1.3), to istnieje taka macierz \mathbf{L} , dla której $\mathbf{C} = \mathbf{LX}$. Wtedy

$$E(\mathbf{L}\mathbf{y}) = \mathbf{LX}\xi = \mathbf{C}\xi$$

dla każdego ξ , a więc w szczególności dla każdego ξ spełniającego warunek (1.7), co wobec D1.2 dowodzi estymowalności funkcji $\mathbf{C}\xi$ w modelu (1.4).

Dla dowodu konieczności wykorzystamy ogólne rozwiązanie niesprzecznego układu równań liniowych $\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{g}$, wyrażone przez Rao [12] w postaci

$$(1.8) \quad \mathbf{x} = \mathbf{H}^{-}\mathbf{g} + (\mathbf{I} - \mathbf{H}^{-}\mathbf{H})\mathbf{z},$$

gdzie \mathbf{z} jest dowolnym wektorem odpowiedniego wymiaru. Na mocy D1.2 zakładamy istnienie takiej macierzy \mathbf{A} , że dla każdego ξ spełniającego warunek (1.7) zachodzi równość $E(\mathbf{A}\mathbf{y}) = \mathbf{C}\xi$, czyli $\mathbf{A}\mathbf{X}\xi = \mathbf{C}\xi$, a więc

$$(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{C})\xi = \mathbf{0}.$$

Lecz z (1.7) i (1.8) wynika, że ξ jest postaci

$$\xi = (\mathbf{K}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{d} + \{\mathbf{I} - (\mathbf{K}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{K}'\mathbf{X}\}\mathbf{z}.$$

Tak więc dla każdego \mathbf{z} musi zachodzić równość

$$(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{C})(\mathbf{K}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{d} + (\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{C})\{\mathbf{I} - (\mathbf{K}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{K}'\mathbf{X}\}\mathbf{z} = \mathbf{0}.$$

Stąd

$$(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{C})\{\mathbf{I} - (\mathbf{K}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{K}'\mathbf{X}\} = \mathbf{0},$$

co implikuje inkluzję

$$\mathcal{R}(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{C}) \subset \mathcal{R}(\mathbf{K}'\mathbf{X}).$$

Zatem $\mathcal{R}(\mathbf{C}) \subset \mathcal{R}(\mathbf{X})$, a to stanowi żadaną relację (1.3). ■

Niezależność kryterium (1.3) od postaci macierzy kowariancji wektora błędów losowych pozwala nam w dalszym ciągu pracy formułować również wszystkie inne kryteria estymowalności dla ogólnego modelu liniowego (1.4), mimo że w źródłach, z których je czerpiemy, są odnoszone do modelu (1.1).

2. Kryteria estymowalności wyrażone równościami macierzy. Rao [12] wyraził kryterium estymowalności wykorzystując pojęcie g -odwrotności macierzy. Przytaczamy je tutaj jako

TWIERDZENIE 2.1. *Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$ są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnej g -odwrotności $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}$ macierzy $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ spełniony jest warunek*

$$(2.1) \quad \mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{C}. \quad \blacksquare$$

Bezpośredni dowód tego twierdzenia pomijamy, gdyż poniżej wykazemy, że stanowi ono szczególny przypadek kryterium następnego, sformułowanego przez Rao i Mitrę ([15], str. 139).

TWIERDZENIE 2.2. *Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$ są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnej g -odwrotności \mathbf{X}^{-} macierzy \mathbf{X} spełniony jest warunek*

$$(2.2) \quad \mathbf{C}\mathbf{X}^{-}\mathbf{X} = \mathbf{C}.$$

D o w ó d. Z (2.2) wynika bezpośrednio, że wiersze macierzy C są liniowymi kombinacjami wierszy macierzy X , a zatem (2.2) implikuje (1.3).

Na odwrót, jeżeli spełniona jest inkluzja (1.3), to istnieje taka macierz L , że $C = LX$. Korzystając z definicji g -odwrotności otrzymujemy wówczas

$$CX^{-X} = LXX^{-X} = LX = C.$$

Okazuje się więc, że warunek (2.2) jest równoważny relacji (1.3), a to na mocy T1.3 stanowi dowód T2.2. ■

Dla uzasadnienia poprzedniej uwagi o wynikaniu T2.1 z T2.2 wystarczy zauważyć, że dla dowolnej g -odwrotności $(X'X)^{-}$ macierzy $X'X$ macierz $(X'X)^{-}X'$ jest g -odwrotnością macierzy X . To zaś jest prostą konsekwencją wykazanej przez Rao [13] równości

$$X(X'X)^{-}X'X = X.$$

Nieco inny charakter ma kryterium estymowalności znajdujące się w [16], str. 20. Jest ono wyrażone przez odpowiednio wybrane podmacierze macierzy X i C .

TWIERDZENIE 2.3. *Niech P będzie taką macierzą permutacji, że w przedstawieniu $XP = [X_1 : X_2]$ podmacierz $X_1 \in \mathcal{M}_{n,r(X)}$ jest pełnego rzędu kolumnowego i niech ponadto $CP = [C_1 : C_2]$, gdzie $C_1 \in \mathcal{M}_{k,r(X)}$. Wówczas liniowe funkcje parametryczne $C\xi$ są estymowalne w modelu $(y, X\xi, \sigma^2V)$ wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$(2.3) \quad C_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 = C_2.$$

D o w ó d. Załóżmy najpierw estymowalność funkcji $C\xi$. Na mocy T1.3 istnieje wtedy taka macierz L , że $C = LX$, a w konsekwencji $CP = LXP$. Po uwzględnieniu podanych w dowodzonym twierdzeniu postaci macierzy CP i XP uzyskujemy stąd $C_1 = LX_1$ i $C_2 = LX_2$. Lecz z określenia podmacierzy X_1 wynika istnienie takiej macierzy M , że

$$(2.4) \quad X_2 = X_1M.$$

Zatem

$$C_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 = C_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_1M = C_1M = LX_1M = LX_2 = C_2.$$

Na odwrót, podstawiając do (2.3) podmacierz X_2 w postaci (2.4), otrzymujemy

$$(2.5) \quad C_2 = C_1M.$$

Z drugiej strony, ponieważ podmacierz X_1 jest pełnego rzędu kolumnowego, więc $\mathcal{R}(C_1) \subset \mathcal{R}(X_1)$, a zatem istnieje taka macierz N , że $C_1 = NX_1$. Uwzględniając w (2.5) tę równość wraz z (2.4) uzyskujemy

$$C_2 = NX_1M = NX_2.$$

Tak więc $[C_1 : C_2] = N[X_1 : X_2]$, czyli $CP = NXP$. Wobec nieosobliwości macierzy P wynika stąd równość $C = NX$, równoważna relacji $\mathcal{R}(C) \subset \mathcal{R}(X)$, która na mocy T1.3 implikuje estymowalność funkcji $C\xi$. ■

3. Kryteria estymowalności wyrażone równościami rzędów macierzy. Jako pierwsze twierdzenie tego typu zacytujemy kryterium podane w [7], str. 2.

TWIERDZENIE 3.1. *Każdy z warunków:*

$$(3.1) \quad r \left(\begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \right) = r(\mathbf{X})$$

oraz

$$(3.2) \quad r \left(\begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \right) = r(\mathbf{X}'\mathbf{X})$$

jest konieczny i dostateczny na to, by liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$ były estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$.

D o w ó d. Z T1.3 wiadomo, że funkcje $\mathbf{C}\xi$ są estymowalne wtedy i tylko wtedy, gdy spełniony jest warunek (1.3), tzn. gdy $\mathcal{R}(\mathbf{C}) \subset \mathcal{R}(\mathbf{X})$. Dowód pierwszego z podanych kryteriów można więc sprowadzić do stwierdzenia równoważności warunku (3.1) z tą właśnie relacją, a to wynika wprost z definicji rzędu macierzy jako maksymalnej liczby jej liniowo niezależnych wektorów wierszowych.

Równie prosto można udowodnić kryterium drugie zauważając równoważność warunku (3.2) z relacją $\mathcal{R}(\mathbf{C}) \subset \mathcal{R}(\mathbf{X}'\mathbf{X})$, która wobec równości $\mathcal{R}(\mathbf{X}'\mathbf{X}) = \mathcal{R}(\mathbf{X})$ jest na równi z (1.3) warunkiem koniecznym i dostatecznym estymowalności funkcji $\mathbf{C}\xi$. ■

Z numerycznego punktu widzenia bardzo ciekawe jest kryterium sformułowane przez Millikena [9].

TWIERDZENIE 3.2. *Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$, gdzie \mathbf{C} jest macierzą pełnego rzędu wierszowego, są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$(3.3) \quad r\{\mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^+\mathbf{C})\} = r(\mathbf{X}) - r(\mathbf{C}). \quad \blacksquare$$

Dowód tego twierdzenia pomijamy, gdyż poniżej zamieszczamy wraz z dowodem twierdzenie ogólniejsze, w którym z jednej strony odrzucone jest założenie o rzędzie macierzy \mathbf{C} , a z drugiej strony, odwrotność Moore'a–Penrose'a \mathbf{C}^+ macierzy \mathbf{C} zastąpiona jest jej dowolną g -odwrotnością \mathbf{C}^- . Ta ogólniejsza postać kryterium Millikena została podana w [4].

TWIERDZENIE 3.3. *Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$ są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnej g -odwrotności \mathbf{C}^- macierzy \mathbf{C}*

$$(3.4) \quad r\{\mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^-\mathbf{C})\} = r(\mathbf{X}) - r(\mathbf{C}).$$

D o w ó d. Przedstawiona tu wersja dowodu wykorzystuje wyłącznie aparat algebry macierzy i różni się istotnie od wersji podanej w [4].

Zauważmy najpierw, że na mocy definicji macierzy \mathbf{C}^- i \mathbf{C}^+ oraz własności rzędu macierzy mamy

$$\begin{aligned} r\{\mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^-\mathbf{C})\} &\geq r\{\mathbf{X} + \mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^-\mathbf{C})(\mathbf{I} - \mathbf{C}^+\mathbf{C})\} = r\{\mathbf{X} + \mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^+\mathbf{C})\} \geq \\ &\geq r\{\mathbf{X}\mathbf{X} + \mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^+\mathbf{C})(\mathbf{I} - \mathbf{C}^-\mathbf{C})\} = r\{\mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^-\mathbf{C})\}, \end{aligned}$$

a zatem

$$r\{\mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^-\mathbf{C})\} = r\{\mathbf{X} + \mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{C}^+\mathbf{C})\}.$$

Z drugiej strony, możliwość użycia w równości (2.2) dowolnej g -odwrotności macierzy X pozwala wyrazić warunek konieczny i dostateczny estymowalności funkcji $C\xi$ w postaci

$$(3.5) \quad CX+X = C.$$

Tak więc dowód T3.3 sprowadza się do pokazania równoważności warunku (3.5) z warunkiem

$$(3.6) \quad r\{X+X(I-C^+C)\} = r(X) - r(C).$$

Załóżmy na początek, że zachodzi równość (3.5). Można wtedy łatwo sprawdzić, że macierz $X+X(I-C^+C)$ jest idempotentna. Ponieważ rząd macierzy idempotentnej jest równy jej śladowi i ponieważ ponadto dla dowolnej macierzy A i dowolnej jej g -odwrotności A^-

$$(3.7) \quad r(A) = \text{tr}(A^-A),$$

więc

$$\begin{aligned} r\{X+X(I-C^+C)\} &= \text{tr}(X+X) - \text{tr}(X+XC^+C) = \text{tr}(X+X) - \text{tr}(C^+CX+X) = \\ &= \text{tr}(X+X) - \text{tr}(C^+C) = r(X) - r(C). \end{aligned}$$

Pokazaliśmy zatem, że (3.5) pociąga (3.6).

Na odwrót, załóżmy teraz, że zachodzi warunek (3.6). Wtedy oczywiście $r(X) \geq r(C)$. Jeżeli $r(X) = r(C)$, to na mocy (3.6)

$$X+XC^+C = X+X,$$

a stąd, wobec relacji (3.7) i wykorzystanej już powyżej własności przemienności iloczynu dwóch macierzy przy operacji obliczania śladu,

$$\begin{aligned} \text{tr}\{C^+C(I-X+X)\} &= \text{tr}(C^+C) - \text{tr}(X+XC^+C) = \\ &= \text{tr}(C^+C) - \text{tr}(X+X) = r(C) - r(X) = 0. \end{aligned}$$

Wykażemy obecnie, że równość

$$(3.8) \quad \text{tr}\{C^+C(I-X+X)\} = 0$$

zachodzi również wtedy, gdy $r(X) > r(C)$. Przekształćmy w tym celu lewą stronę relacji (3.6) wykorzystując symetrię macierzy $X+X$ i $I-C^+C$, idempotentność macierzy $I-C^+C$ oraz fakt, że dla dowolnej macierzy A spełniona jest równość $r(A) = r(AA')$. Otrzymujemy

$$r\{X+X(I-C^+C)X+X\} = r(X) - r(C),$$

a stąd, wobec twierdzenia z [8], str. 227, orzekającego, że dla każdej niezerowej macierzy symetrycznej A zachodzi nierówność $r(A) \geq \{\text{tr}(A)\}^2/\text{tr}(A^2)$, mamy dalej

$$(3.9) \quad r(X) - r(C) \geq [\text{tr}\{X+X(I-C^+C)X+X\}]^2/\text{tr}\{[X+X(I-C^+C)X+X]^2\}.$$

Ponieważ jednak

$$\text{tr}\{X+X(I-C^+C)X+X\} = \text{tr}\{(X+X)^2(I-C^+C)\} = \text{tr}\{X+X(I-C^+C)\}$$

oraz

$$\text{tr}[\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\mathbf{X}^+\mathbf{X}\}^2] = \text{tr}[\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\}^2],$$

więc (3.9) można napisać w postaci

$$(3.10) \quad r(\mathbf{X}) - r(\mathbf{C}) \geq [\text{tr}\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\}]^2 / \text{tr}[\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\}^2].$$

Mianownik szacujemy teraz stosując następujące twierdzenie z [8], str. 226: *jeżeli \mathbf{A} i \mathbf{B} są macierzami symetrycznymi jednakowego stopnia, to $\text{tr}\{(\mathbf{AB})^2\} \leq \text{tr}(\mathbf{A}^2\mathbf{B}^2)$* . Uzyskujemy wtedy

$$\text{tr}[\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\}^2] \leq \text{tr}\{(\mathbf{X}^+\mathbf{X})^2(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})^2\} = \text{tr}\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\},$$

co pozwala (3.10) napisać w postaci

$$r(\mathbf{X}) - r(\mathbf{C}) \geq \text{tr}\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\}.$$

Ponieważ ponadto

$$\text{tr}\{\mathbf{X}^+\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^+\mathbf{C})\} = \text{tr}(\mathbf{X}^+\mathbf{X}) - \text{tr}(\mathbf{X}^+\mathbf{X}\mathbf{C}^+\mathbf{C}) = r(\mathbf{X}) - \text{tr}(\mathbf{C}^+\mathbf{C}\mathbf{X}^+\mathbf{X}),$$

więc zachodzi nierówność

$$\text{tr}(\mathbf{C}^+\mathbf{C}\mathbf{X}^+\mathbf{X}) \geq r(\mathbf{C}),$$

na mocy której

$$\text{tr}\{\mathbf{C}^+\mathbf{C}(\mathbf{I}-\mathbf{X}^+\mathbf{X})\} = r(\mathbf{C}) - \text{tr}(\mathbf{C}^+\mathbf{C}\mathbf{X}^+\mathbf{X}) \leq 0.$$

Jednakże z drugiej strony macierze $\mathbf{C}^+\mathbf{C}$ i $\mathbf{I}-\mathbf{X}^+\mathbf{X}$, jako symetryczne i idempotentne, są określone nieujemnie, a wiadomo (patrz [8], str. 318), że ślad iloczynu dwóch macierzy określonych nieujemnie jest liczbą nieujemną. Zatem $\text{tr}\{\mathbf{C}^+\mathbf{C}(\mathbf{I}-\mathbf{X}^+\mathbf{X})\} \geq 0$, co w połączeniu z nierównością poprzednią daje równość (3.8). Ta zaś implikuje relację

$$(3.11) \quad \mathbf{C}^+\mathbf{C}(\mathbf{I}-\mathbf{X}^+\mathbf{X}) = \mathbf{0},$$

jako że (patrz [8], str. 318) ślad iloczynu dwóch macierzy określonych nieujemnie jest zerem wtedy i tylko wtedy, gdy iloczyn ten jest macierzą zerową. Mnożąc lewostronnie (3.11) przez macierz \mathbf{C} otrzymujemy (3.5), co kończy dowód T3.3. ■

Zastosowanie relacji (3.7) do przekształcenia warunku (3.4) zawartego w T3.3 pozwala wyrazić kryterium estymowalności w postaci równości śladów macierzy.

TWIERDZENIE 3.4. *Liniowe funkcje parametryczne $\mathbf{C}\xi$ są estymowalne w modelu $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\xi, \sigma^2\mathbf{V})$ wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnych g-odwrotności macierzy \mathbf{C} i $\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^-\mathbf{C})$ zachodzi równość*

$$(3.12) \quad \text{tr}[\{\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^-\mathbf{C})\}^-\mathbf{X}(\mathbf{I}-\mathbf{C}^-\mathbf{C})] = \text{tr}(\mathbf{X}^-\mathbf{X}) - \text{tr}(\mathbf{C}^-\mathbf{C}). \quad \blacksquare$$

Analogiczny wynik, tyle że wyrażony za pomocą odwrotności Moore'a–Penrose'a, został podany w [9].

4. Uwagi końcowe. Zamieszczamy tutaj uwagi próbujące ocenić przydatność przedstawionych kryteriów estymowalności z numerycznego punktu widzenia, a ponadto wskazujemy procedury użyteczne przy ich realizacji maszynowej.

Zauważmy najpierw, że we wszystkich warunkach zawierających g -odwrotności macierzy, g -odwrotności te są mnożone prawostronnie przez macierze odwracane. Ponieważ dla dowolnej g -odwrotności A^- macierz A^-A stanowi (patrz np. [5], str. 59) operator rzutu na $\mathcal{R}(A)$, więc kryteria (2.1), (2.2), (3.3), (3.4) oraz (3.12) mogą zostać wyrażone w języku takich właśnie operatorów. Spostrzeżenie to jest istotne, gdyż umożliwia wykorzystywanie takich procedur, w których nie wyznacza się *explicitie* g -odwrotności macierzy A . Algorytm wyznaczania operatora A^+A rzutu ortogonalnego (w sensie standardowego iloczynu skalarnego) jest podany w [11] (patrz również [9]), a oparta na tym algorytmie procedura algołowska znajduje się w [1]. Skonstruowany na tej samej zasadzie algorytm (wraz z odpowiednią procedurą algołowską) wyznaczania operatora A^-A , rzutującego również na $\mathcal{R}(A)$, lecz niekoniecznie ortogonalnie, jest natomiast zawarty w [2]. Przedstawione w ostatnio wspomnianej pracy porównanie obu procedur wskazuje, że mniejszymi błędami zaokrążeń obarczone są rzuty wykonywane za pomocą operatora postaci A^-A . Płynię stąd wniosek, że we wszystkich sytuacjach, w których z teoretycznego punktu widzenia możliwa jest rezygnacja z ortogonalności rzutowania, należy ze względów numerycznych korzystać z procedury podanej w [2]. Właśnie z tego względu należy przedkładać kryterium (3.4) nad (3.3) oraz nie stosować rzutów ortogonalnych w kryteriach (2.1) i (2.2).

Z drugiej strony, porównując warunki (2.1) i (2.2), należy pamiętać o tym, że dla problemu odwracania macierz $X^T X$ nie jest nigdy lepiej, a na ogół jest gorzej uwarunkowana od macierzy X (patrz [5], str. 241). Celem formułowania kryteriów estymowalności za pomocą macierzy $X^T X$ jest dążenie do zmniejszenia wymiarów macierzy, które w tych kryteriach występują. Zauważmy jednak, że w przypadku, gdy X jest złożoną z zer i jedynek macierzą układu doświadczalnego, wówczas zmniejszenie wymiarów można osiągnąć także poprzez usunięcie z macierzy X wierszy powtarzających się, co uwarunkowania nie pogarsza. Postępowanie takie uzasadnione jest tym, że nie zmienia ono przestrzeni $\mathcal{R}(X)$, a więc w konsekwencji nie zmienia również operatorów rzutu na $\mathcal{R}(X)$.

Uwaga o gorszym uwarunkowaniu macierzy $X^T X$ dotyczy również kryterium (2.3). Ponieważ ponadto jego stosowanie wymaga wielokrotnego obliczania iloczynów macierzy, więc z numerycznego punktu widzenia należy je ocenić jako mało przydatne.

Przy używaniu kryteriów zawartych w § 2 pojawia się dodatkowo zagadnienie numerycznego porównania dwóch macierzy. Jest jasne, że daje się ono sprowadzić do porównania różnicy tych macierzy z macierzą zerową. Wtedy jednakże powstaje problem doboru normy, według której zerowość macierzy ma być oceniona. Niedogodności tej pozbawione są kryteria wyrażające się równościami rzędów macierzy, które skomentujemy poniżej.

Nawiązując do poprzednich uwag o operatorach rzutowania i uwarunkowaniu macierzy należy ocenić kryterium (3.4) wyżej niż (3.3), a kryterium (3.1) wyżej niż (3.2). Trudno jest nam natomiast porównać warunki (3.1) i (3.4) między sobą. Stosowanie dowolnego z nich wymaga w każdym razie wyznaczania rzędów macierzy.

Przy prowadzeniu obliczeń można do tego celu wykorzystać procedurę podaną w [3], bądź też, ze względu na równość (3.7), procedurę zawartą w [2], która oblicza operatory rzutu.

Na inny aspekt zagadnienia należy zwrócić uwagę przy porównaniu kryterium (3.4) z (2.2). W obydwu występują operatory rzutu na przestrzenie wierszy, tyle że w kryterium (2.2) na $\mathcal{R}(\mathbf{X})$, a w kryterium (3.4) na $\mathcal{R}(\mathbf{C})$. Ponieważ przeważnie macierz \mathbf{C} zawiera mniej wierszy (niekiedy jest tylko wektorem wierszowym) niż macierz \mathbf{X} , więc przy obliczeniach maszynowych operator $\mathbf{C}^-\mathbf{C}$ jest na ogół wyznaczony dokładniej niż operator $\mathbf{X}^-\mathbf{X}$.

Na zakończenie należy zaznaczyć, że zawarta w tym paragrafie próba oceny przydatności poszczególnych kryteriów estymowalności została dokonana w oderwaniu od innych aspektów analizy ogólnego modelu liniowego, a ponadto, że ocena ta opiera się jedynie na wynikach szeregu obliczeń przeprowadzonych dla macierzy testowych (patrz [19]) i nie rości sobie prawa do analizy formalnej.

Prace cytowane

- [1] J. Baksalary, A. Dobek, R. Kala, *Wyznaczanie operatorów rzutowania ortogonalnego*, ABS-49, Alg. Biom. Statyst. 5 (1976), str. 187–194.
- [2] — — —, *Wyznaczanie operatorów rzutowania*, ABS-60, ibidem 6 (1977), str. 175–183.
- [3] — — —, R. Kala, *Wyznaczanie bazy macierzy*, ABS-11, ibidem 2(1873), str. 3–9.
- [4] — — —, *Extensions of Milliken's estimability criterion*, Ann. Statist. 4 (1976), w str. 639–641.
- [5] A. Ben Israel, T. N. E. Greville, *Generalized inverses: Theory and applications* New York 1974.
- [6] R. C. Bose, *The fundamental theorem of linear estimation*, Proceedings of the Thirty-First Indian Science Congress 4 III (1944), str. 2–3.
- [7] M. C. Chakrabarti, *Mathematics of design and analysis of experiments*, Bombay 1962.
- [8] F. A. Graybill, *An introduction to matrices with applications in statistics*, Belmont 1969.
- [9] G. A. Milliken, *New criteria for estimability for linear models*, Ann. Math. Statist. 24 (1971), str. 1588–1594.
- [10] R. M. Pringle, A. A. Rayner, *Generalized inverse matrices with applications to statistics*, London 1971.
- [11] L. D. Pyle, *Generalized inverse computations using the gradient projection method*, J. Assoc. Comput. Mach. 11 (1964), str. 422–428.
- [12] C. R. Rao, *A note on a generalized inverse of a matrix with applications to problems in mathematical statistics*, J. R. Statist. Soc. B 24 (1962), str. 152–158.
- [13] — — —, *Calculus of generalized inverses of matrices. Part I — General theory*, Sankhyā A 29 (1967), str. 317–342.
- [14] — — —, *Representations of best linear unbiased estimators in the Gauss–Markoff model with a singular dispersion matrix*, J. Multivariate Anal. 3 (1973), str. 276–292.
- [15] — — —, S. K. Mitra, *Generalized inverse of matrices and its applications*, New York 1971.
- [16] S. N. Roy, R. Gnanadesikan, J. N. Srivastava, *Analysis and design for certain quantitative multiresponse experiments*, Oxford 1971.
- [17] S. R. Searle, *Linear models*, New York 1971.
- [18] M. Warmus, *Uogólnienie odwrotności macierzy*, Warszawa 1972.
- [19] J. R. Westlake, *A Handbook of numerical matrix inversion and solution of linear equations*, New York 1968.
- [20] G. Zyskind, *Error structures, projections and conditional inverses in linear model theory*;

w: *A survey of statistical design and linear models* (J. N. Srivastava, ed.), 647–663, Amsterdam 1975.

- [21] —, F. B. Martin, *On best linear estimation and a general Gauss–Markov theorem in linear models with arbitrary nonnegative covariance structure*, SIAM J. Appl. Math. 17 (1969), str. 1190–1202.

ZAKŁAD METOD MATEMATYCZNYCH I STATYSTYCZNYCH
AKADEMII ROLNICZEJ W POZNANIU