

線型推測論

第11回 一般化逆行列

千葉大学大学院医学研究院

長島 健悟

計画行列 X のランク

- 今までの講義では X がフルランク, すなわち $\text{rank}(X) = p \leq n$, の場合だけを扱った
- $\text{rank}(X) < p$ の場合
 - $\text{rank}(X'X) < p$ となり, $X'X$ は正則でなくなる; $(X'X)^{-1}$ が存在しなくなる
 - 最小二乗推定量が一意に定まらない
 - モデルによってこういうことは起こってくる

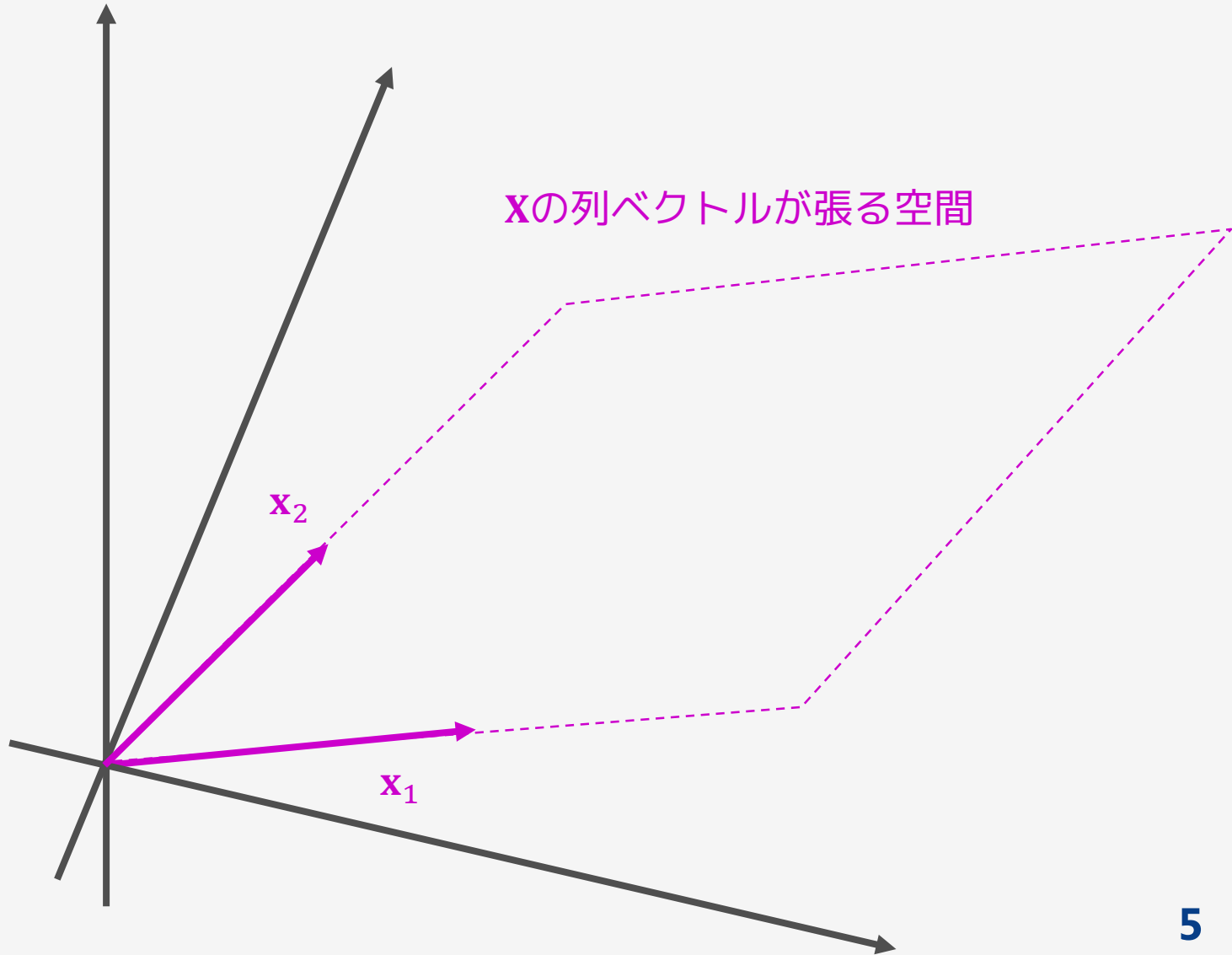
一般線型モデルのイメージ

- 一般線型モデルは以下のようにも書ける
- $Y = \beta_1 \mathbf{x}_1 + \beta_2 \mathbf{x}_2 + \dots + \beta_p \mathbf{x}_p + \epsilon$
- \mathbf{x}_j : 列ベクトル
- \mathbf{X} の列ベクトルが張る空間上の点に誤差ベクトルを伸ばした場所
||
確率変数ベクトル Y の場所

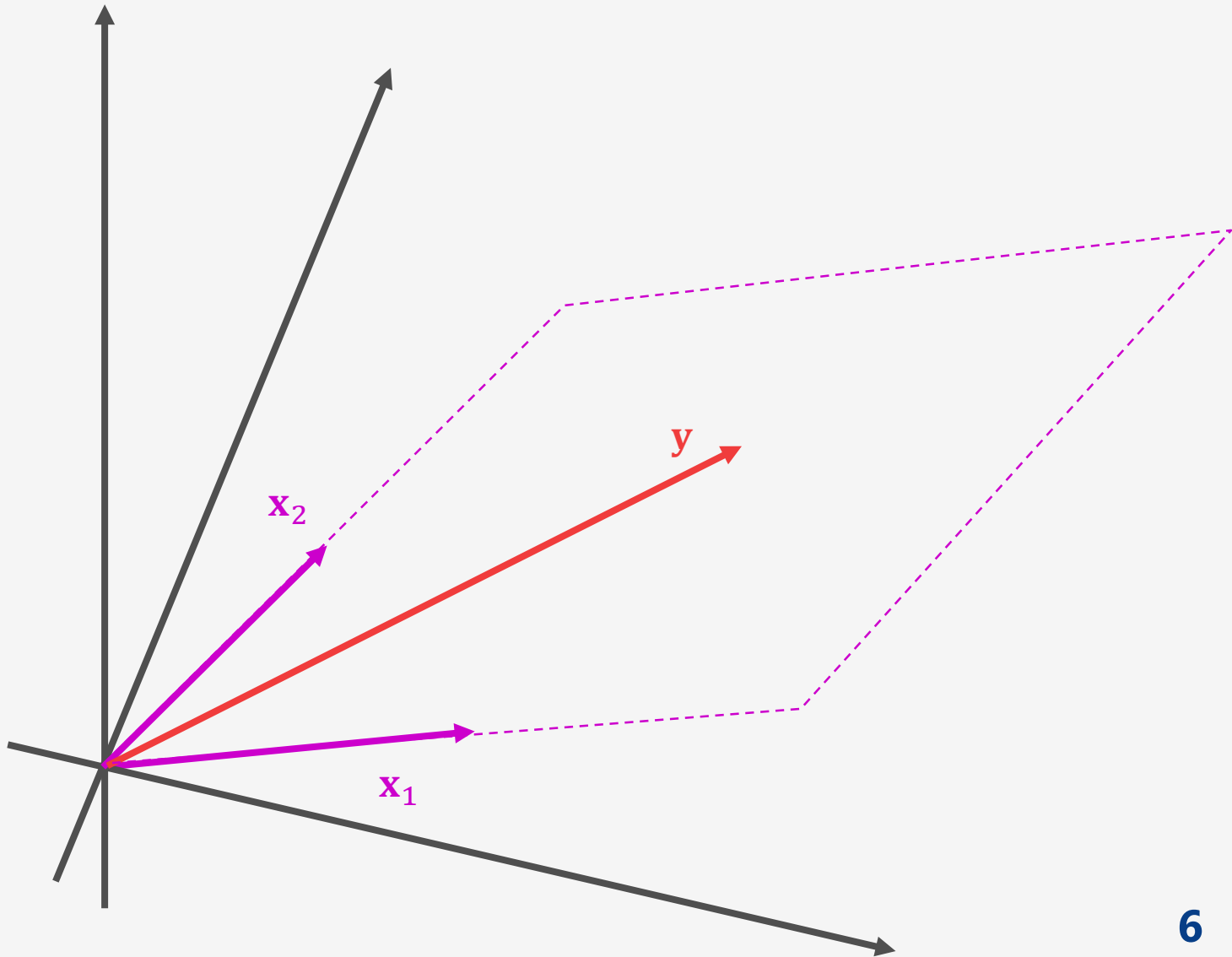
一般線型モデルのイメージ

- 一番簡単な事例を考える
 - n は3次元
 - p は2次元
 - \mathbf{X} の列ベクトルが張る空間： $\beta_1 \mathbf{x}_1 + \beta_2 \mathbf{x}_2$
- \mathbf{y} ：確率変数 Y の観測値ベクトル

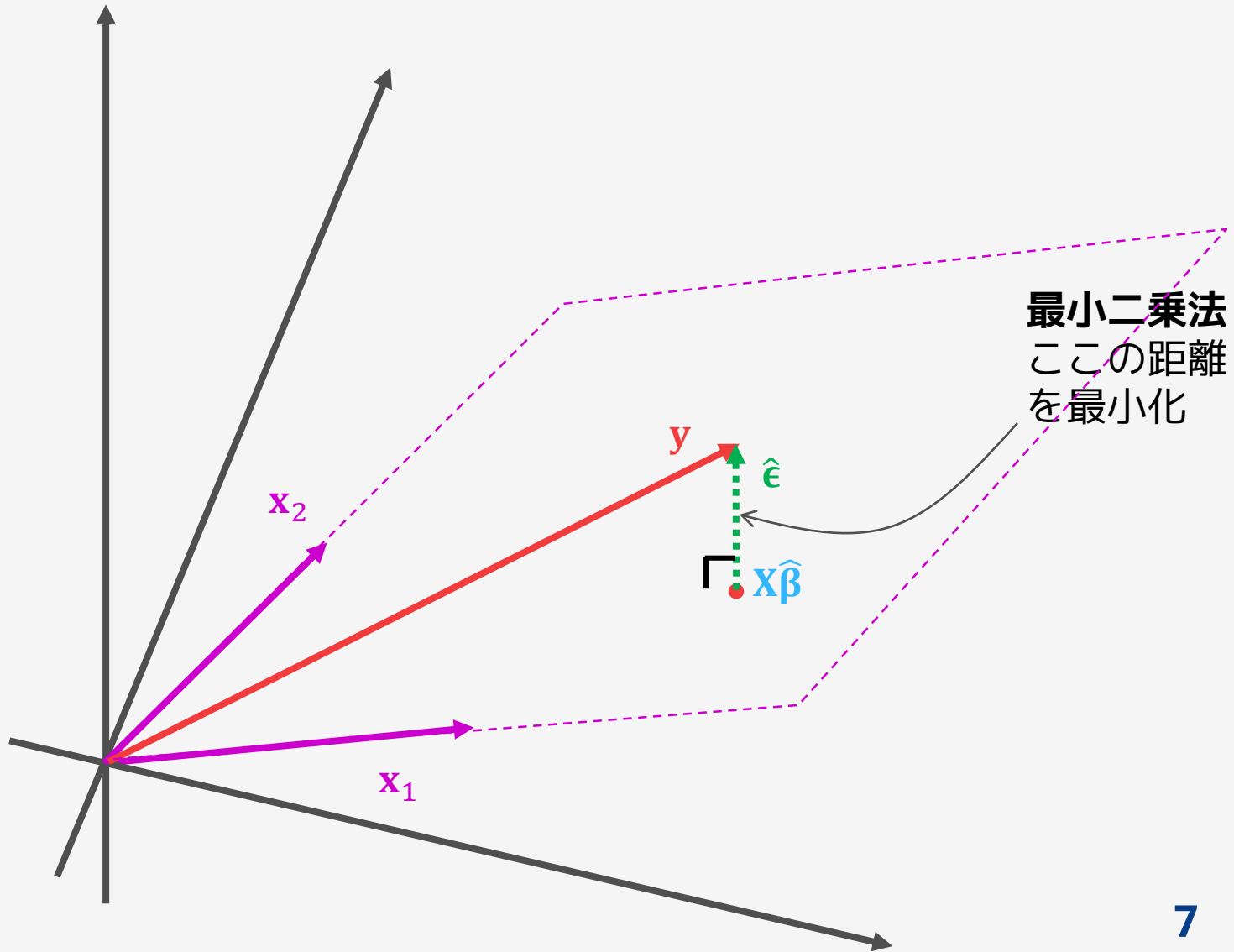
一般線型モデルのイメージ



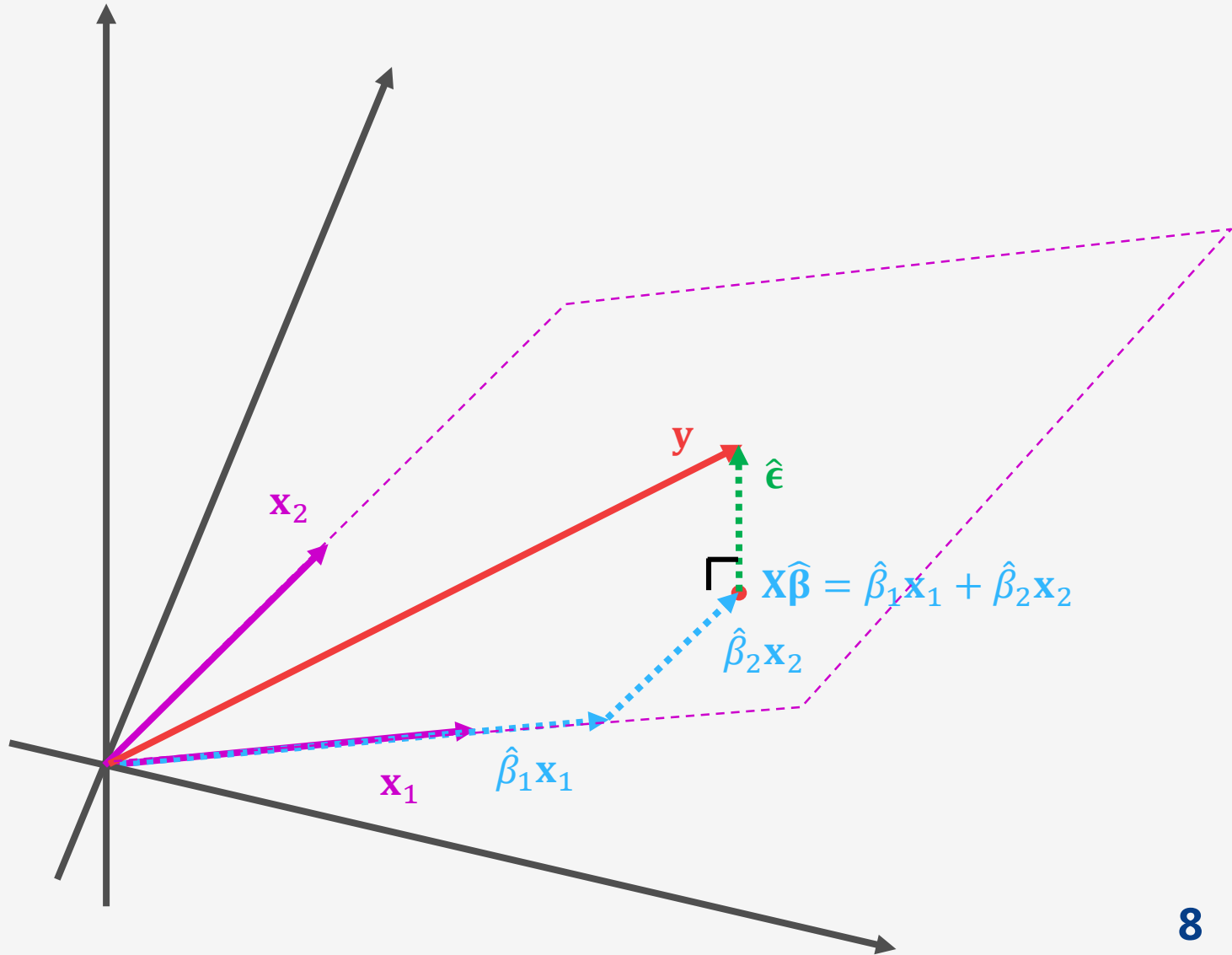
一般線型モデルのイメージ



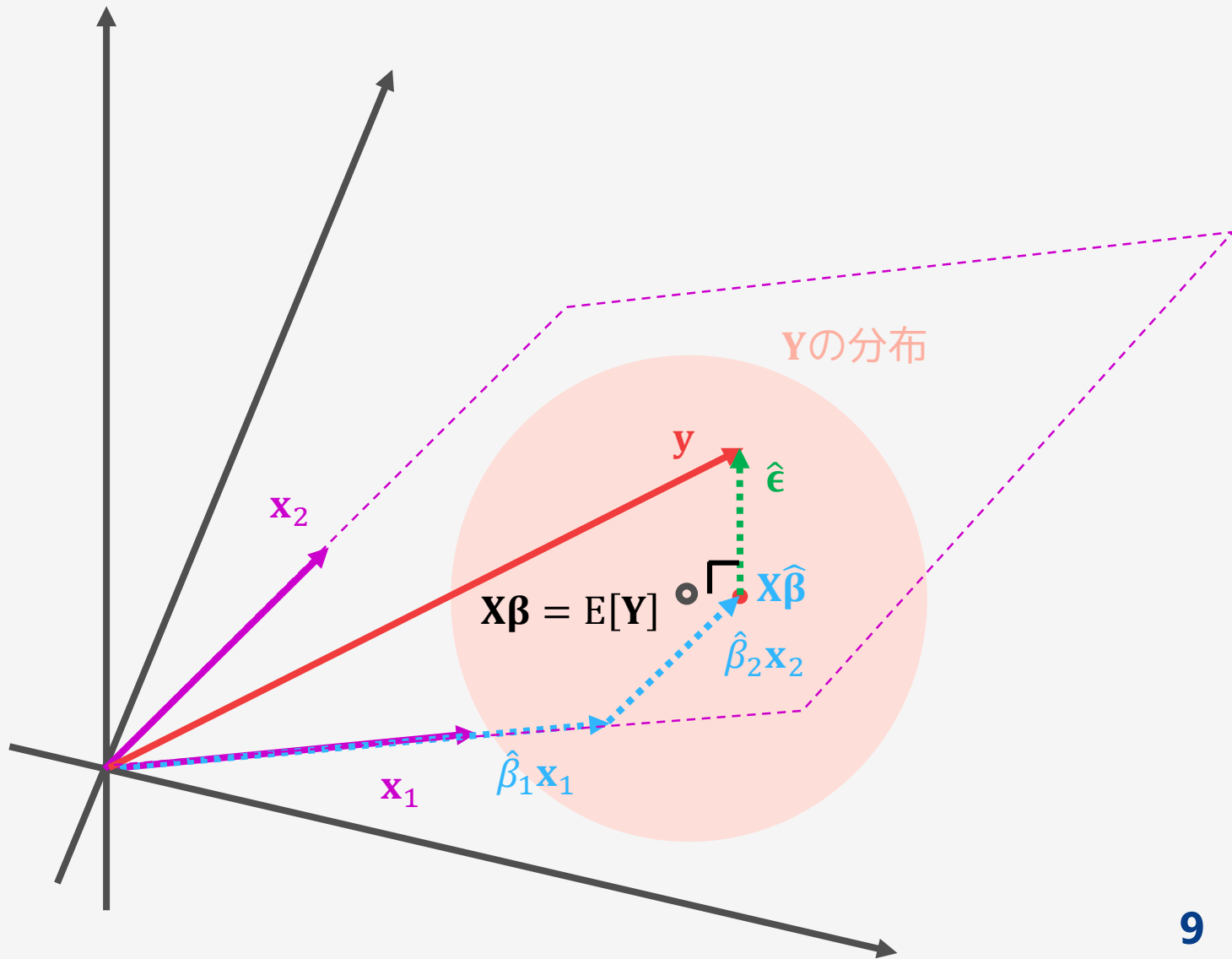
一般線型モデルのイメージ



一般線型モデルのイメージ



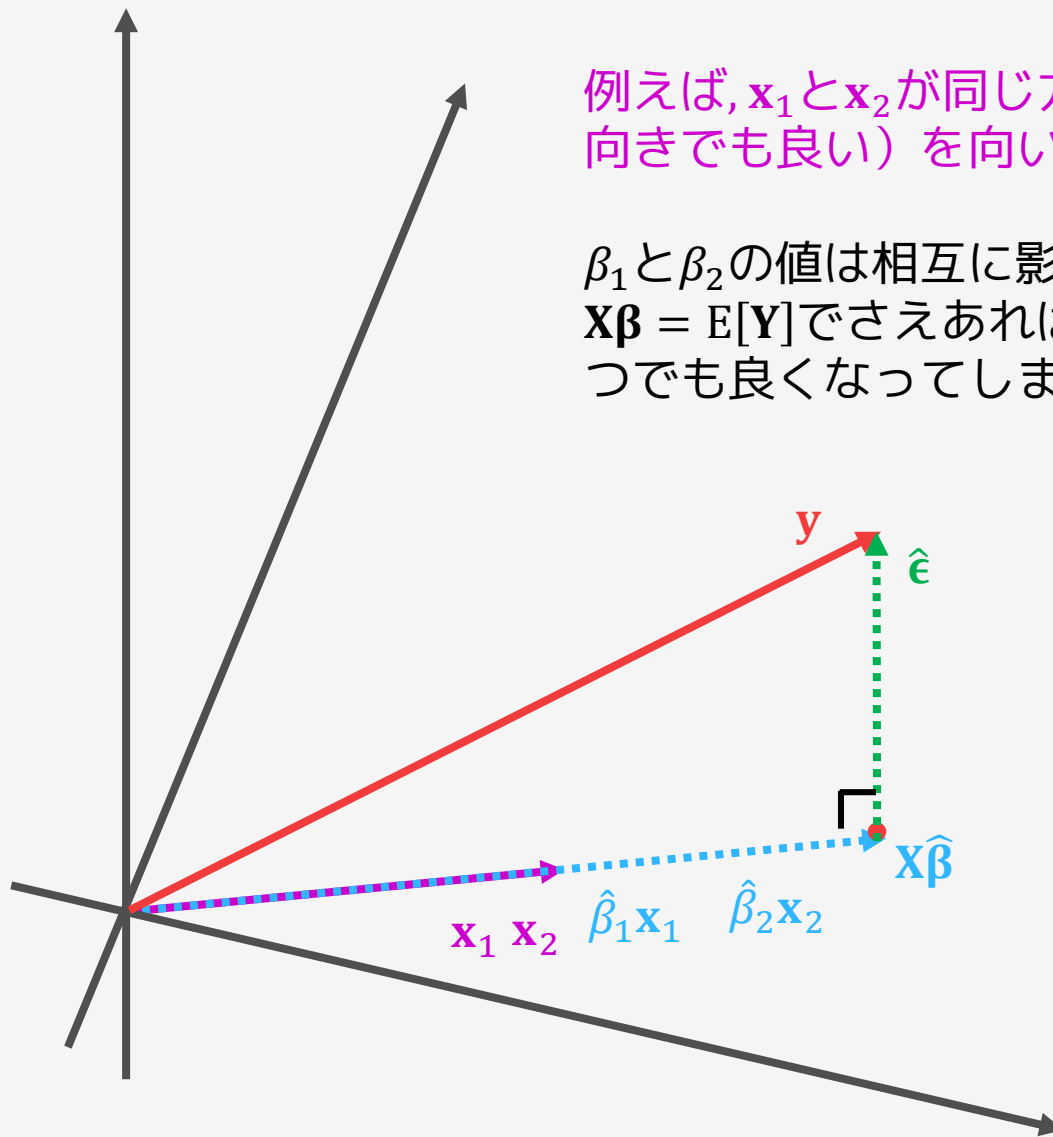
一般線型モデルのイメージ



一般線型モデルのイメージ

- X がフルランクでない場合, 一部の列ベクトル空間がつぶれてしまうので β を一意に推定できない
- 線形従属な β_j の組の推定値は相互に影響しあうため $\hat{\beta}$ が一意に定まらない

ランク落ちした一般線型モデル



計画行列Xのランク

- 次の一般線型モデル $Y = X\beta + \epsilon$ を考える

- $$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{pmatrix}$$

- $p = 4$

- $\text{rank}(X) = ?$

行列のランクの復習

- 行列 X のランク (rank; 階数) の定義
 - X の列ベクトルの一次独立なもの最大の個数を指し
 - X の行ベクトルの一次独立なもの最大の個数にも等しい

計画行列Xのランク

- 列基本変形を使う (操作は掃き出し法とほぼ同じです; 行基本変形でもよい)
- 1列目を6で割る

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1/3 & 2 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 2 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

計画行列Xのランク

- 2-4列目から1列目の2倍を引く

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 4/3 & -2/3 & -2/3 \\ 1/3 & -2/3 & 4/3 & -2/3 \\ 1/3 & -2/3 & -2/3 & 4/3 \end{pmatrix}$$

計画行列Xのランク

- 2列目を3/4倍
- 1列目から2列目の1/3倍を引く
- 3, 4列目に2列目の2/3倍を足す

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 1 & -1 \\ 1/2 & -1/2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

計画行列Xのランク

- 1列目から3列目の1/2倍を引く
- 2列目に3列目の1/2倍を足す
- 4列目に3列目を足す

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

- これ以上は変形できない
 - $\therefore \text{rank}(\mathbf{X}) = 3$

計画行列Xのランク

- 因みにこのXの場合
 - $\mathbf{x}_1 = (6, 2, 2, 2)'$, $\mathbf{x}_2 = (2, 2, 0, 0)'$, $\mathbf{x}_3 = (2, 0, 2, 0)'$, $\mathbf{x}_4 = (2, 0, 0, 2)'$
 - 例えば, $\beta_2\mathbf{x}_2 + \beta_3\mathbf{x}_3 + \beta_4\mathbf{x}_4$ の張る空間上には $\beta_1\mathbf{x}_1$ が乗っている (他の列ベクトル同士の組み合わせでもよい)

練習問題

- 次の行列**A**, **B**のランクを求めよ

- $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}$

- $\text{rank}(\mathbf{A}) = 1$

- $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

- $\text{rank}(\mathbf{B}) = 3$

ランクの性質

- 定理11-1

- 任意の行列 \mathbf{X} について

$$\begin{aligned} \text{rank}(\mathbf{X}'\mathbf{X}) &= \text{rank}(\mathbf{X}\mathbf{X}') = \text{rank}(\mathbf{X}') \\ &= \text{rank}(\mathbf{X}) \end{aligned}$$

- 証明は割愛 (Gentle, 2007など; 部分行列を使う)

ランク落ちしたモデルの場合

- 正規方程式の解 $\hat{\beta}$ が無限に存在する
 - $X'X\hat{\beta} = X'Y$
- どうしたら良いか？
- 一応解は存在するので, ここではその中で使えそうな解を得る方針を考える
- 一般化逆行列を用いる方法を紹介する

一般化逆行列

- A を任意の $m \times n$ 行列とする
- 以下を満たす行列 A^- を一般化逆行列とよぶ

$$AA^-A = A$$

- A は正方行列でなくともよい
- A^- は一意でない
- A に逆行列が存在するならば, $A^- = A^{-1}$ で一意に定まる

一般化逆行列の例

- $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ のとき
 - $\mathbf{x}_1^- = (1, 0, 0, 0)$, $\mathbf{x}_2^- = (0, 1/2, 0, 0)$,
 $\mathbf{x}_3^- = (0, 0, 1/3, 0)$, $\mathbf{x}_4^- = (0, 0, 0, 1/4)$,
 - $\mathbf{x}\mathbf{x}_i^- \mathbf{x} = \mathbf{x}$ ($i = 1, 2, 3, 4$)を確認せよ
 - $\mathbf{x}\mathbf{x}_i^- \mathbf{x} = \mathbf{x}1 = \mathbf{x}$

一般化逆行列の性質

- 定理11-2

- 連立方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{c}$ に解が存在するとき,
 A^- を A の一般化逆行列とすると

$$\mathbf{x} = A^- \mathbf{c}$$

は解の一つになる

一般化逆行列の性質

- 定理11-3

- 連立方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{c}$ について, A^- を A の一般化逆行列とすると

$$AA^-c = c$$

は解が存在する ($\mathbf{x} = A^-c$ が成り立つ) ための必要十分条件である

一般化逆行列による解

- 定理11-2を正規方程式に適用してみよう

- 正規方程式： $\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}$

- $\mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{X}'\mathbf{X}$, $\mathbf{x} \Rightarrow \hat{\boldsymbol{\beta}}$, $\mathbf{c} \Rightarrow \mathbf{X}'\mathbf{Y}$

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

一般化逆行列による解の性質

- 期待値 $E[\hat{\beta}]$ を求めよ

$$\begin{aligned} E[\hat{\beta}] &= E[(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}] \\ &= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'E[\mathbf{Y}] \\ &= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta \end{aligned}$$

一般化逆行列による解の性質

- $(X'X)^-$ = $(X'X)^{-1}$ でない限り
 $(X'X)^-X'X \neq I$
- $\hat{\beta}$ は β の不偏推定量にはならない
- $(X'X)^-X'X\beta$ の不偏推定量になる
- また, $(X'X)^-$ は一意でないため, $(X'X)^-$ の選び方によっても何の推定量かはかわってくる

何が推定できるのか？

- 以下の例を考える

$$\bullet \begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \\ Y_{21} \\ Y_{22} \\ Y_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{23} \end{pmatrix}$$

何が推定できるのか？

- $X'X$ を求めよ

- $$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{X}'\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 6 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 0 \\ 3 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

何が推定できるのか？

- 以下に示す $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-$ が $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ の一般化逆行列になっているかどうか確かめよ

$$(\mathbf{X}'\mathbf{X})^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix}$$

何が推定できるのか？

- $\mathbf{X}'\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \bar{Y}_{..} \\ \bar{Y}_{1.} \\ \bar{Y}_{2.} \end{pmatrix}$

- $\hat{\boldsymbol{\beta}} = ?$

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

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{Y}_{..} \\ \bar{Y}_{1.} \\ \bar{Y}_{2.} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{Y}_{1.}/3 \\ \bar{Y}_{2.}/3 \end{pmatrix}$$

何が推定できるのか？

- $E[\hat{\beta}]$ を求めよ

$$E[\hat{\beta}] = \begin{pmatrix} 0 \\ E[\bar{Y}_{1.}/3] \\ E[\bar{Y}_{2.}/3] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu + \beta_1 \\ \mu + \beta_2 \end{pmatrix}$$

$$E[\bar{Y}_{i.}/3] = \frac{1}{3} E \left[\sum_{j=1}^3 Y_{ij} \right] = \mu + \beta_i$$

- $\bar{Y}_{i.} = \sum_{j=1}^3 Y_{ij}$, $E[Y_{ij}] = \mu + \beta_i$

何が推定できるのか？

- $E[\hat{\beta}] = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu + \beta_1 \\ \mu + \beta_2 \end{pmatrix}$

- パラメータの線形結合が推定できる
- $\hat{\beta}$ については $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}$ の選び方によって推定対象が異なる事に注意せよ

パラメータ β の推定可能線型式

- パラメータ β の推定可能線型式 (estimable functions) とは, データから (不偏に)推定することができるパラメータの線型結合 $\mathbf{a}'\beta$ の事である
- 線型推定量 $T = \mathbf{c}'\mathbf{Y}$ について考える
 - $E[T] = \mathbf{c}'\mathbf{X}\beta$
 - つまり $\mathbf{c}'\mathbf{X}\beta = \mathbf{a}'\beta \Leftrightarrow \mathbf{c}'\mathbf{X} = \mathbf{a}'$ を満たせば, T は $\mathbf{a}'\beta$ の線型不偏推定量になる

パラメータ β の推定可能線型式

- 推定したい $a'\beta$ が推定可能かどうかは,
 $c'X = a'$ を満たす c' が作れるかどうかで
判定できる

パラメータ β の推定可能線型式

- 以下の例を考える

$$\begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \\ Y_{21} \\ Y_{22} \\ Y_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{23} \end{pmatrix}$$

パラメータ β の推定可能線型式

- 例： $\beta_1 - \beta_2$ を推定したいとする
 - $\mathbf{a}' = (0, 1, -1)$
 - $\mathbf{c}'\mathbf{X} = (0, 1, -1)$ を満たす \mathbf{c}' があるかどうかを探せば良い

パラメータ β の推定可能線型式

- $\mathbf{c}' = (0, 0, 1, -1, 0, 0)$ のとき, $\mathbf{c}'\mathbf{X} = (0, 1, -1)$ となることを確認せよ

$$(0, 0, 1, -1, 0, 0) \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (0, 1, -1)$$

- $\beta_1 - \beta_2$ は推定可能

cの性質

- $X\mathbf{d} = \mathbf{c}$ を満たすベクトル \mathbf{d} が存在する
- 証明
 - $X\mathbf{d} = \mathbf{c} \Leftrightarrow X'X\mathbf{d} = X'\mathbf{c}$ に定理11-3を適用する
 - 連立方程式は $X'X\mathbf{d} = X'\mathbf{c}$
($A: X'X, \mathbf{x}: \mathbf{d}, \mathbf{c}: X'\mathbf{c}$)
 - $AA^{-1}\mathbf{c}: X'X(X'X)^{-1}X'\mathbf{c} = X'\mathbf{c}$ よって成立
 - $\therefore X'X(X'X)^{-1}X' = X'$

cの性質

- 定理11-4

- $\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' = \mathbf{X}'$

- $\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{X}$

- $\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\}' = \{(\mathbf{X}'\mathbf{X})'\}^{-} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}$

$\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の性質

- $\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{c}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$
 - 先の結果から $\mathbf{c}' = \mathbf{d}'\mathbf{X}'$ と書いて良い
- $\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{d}'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$
 - 定理11-4から $\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' = \mathbf{X}'$
- $\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{d}'\mathbf{X}'\mathbf{Y}$
 - $\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ の選び方にかかわらず一意に定まる

$a'\hat{\beta}$ の性質

- 次の例を考える

- $\mathbf{X}' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

- $\mathbf{X}'\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 6 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 0 \\ 3 & 0 & 3 \end{pmatrix}$

$\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の性質

- $\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{a}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$, $\mathbf{a}' = (0, 1, -1)$

- $\mathbf{a}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})_1^{-1}\mathbf{X}' = ?$, $\mathbf{a}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})_2^{-1}\mathbf{X}' = ?$

- $(\mathbf{X}'\mathbf{X})_1^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix}$

- $(\mathbf{X}'\mathbf{X})_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1/3 & -1/3 & 0 \\ -1/3 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

対処法のまとめ

- 一般化逆行列をそのまま使う場合は, 何を推定できる $(X'X)^{-}$ なのかを考える
- 推定可能線型式を使ってもよい
- 他にも, パラメータを減らした新しいモデルを作る方法も考えられる
- $y = \mu + \beta_1 x_1 + \dots \rightarrow y = \gamma_1 x_1 + \dots$
- 新しいモデルのパラメータが何を表わすかはよく考える必要がある

まとめ

- ランク落ちした場合の推測について議論した
 - 一般化逆行列
 - 推定可能線型式
 - モデルの再構築

補足

- 線型独立なパラメータ β の推定可能線型式の数は X のランクに等しい
- ランク落ちした場合, 推定可能線型式の数までであれば線型仮説の検定が可能である
- 分散の推定量等では $(X'X)^{-1}$ を $(X'X)^{-}$ に置き換えるだけで良い

参考文献

- Gentle JE. *Matrix Algebra Theory, Computations, and Applications in Statistics*. Springer, 2007, pp.91-92.