

線型推測論

第08回 信賴区間・一般化最小二乗推定量

2022/5/20

慶應義塾大学病院

長島 健悟

信頼区間

- $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$ の信頼区間はよく用いられる
- 単一仮説の検定統計量をそのまま流用できる

- $$\frac{\mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}}}{\sqrt{s^2\mathbf{c}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}}} \sim t(n-p)$$

$$\mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}} \pm t_{\alpha/2, n-p} \sqrt{s^2\mathbf{c}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}}$$

- 同時信頼区間：多重比較に対応する信頼区間で難しい

誤差の条件の一般化

- 今まで我々は誤差の三条件のもとで
 - 最小二乗推定量
 - 分散推定量
 - 仮説検定 (正規性の仮定を追加)
- 今度は誤差の三条件のうちの一部の制約を緩めた場合を議論する

誤差の条件の一般化

- 新しい誤差の条件
 - $\text{Cov}[\boldsymbol{\epsilon}] = \sigma^2 \mathbf{V}$: \mathbf{V} は既知の正定値対称行列とする
 - $\text{Cov}[\boldsymbol{\epsilon}] \neq \sigma^2 \mathbf{I}$ の場合を許し, 誤差の間に相関がある場合の推測を考える
- 系8-1
 - $\text{Cov}[\mathbf{Y}] = \sigma^2 \mathbf{V}$

新しい条件の整理

- 新しい条件の下では以下が成り立つ
 - $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$
 - $E[\boldsymbol{\epsilon}] = \mathbf{0}$
 - $E[\mathbf{Y}] = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$
 - $\text{Cov}[\boldsymbol{\epsilon}] = \text{Cov}[\mathbf{Y}] = \sigma^2 \mathbf{V}$

一般化最小二乗推定量

- 定理8-2

- β のBLUEは

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

である

一般化最小二乗推定量

- 定理8-3

- $\hat{\beta}$ の分散共分散行列は

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}$$

である

一般化最小二乗推定量

- 定理8-4

- σ^2 の不偏推定量は

$$s^2 = \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n - p}$$
$$= \frac{\mathbf{Y}' [\mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1}] \mathbf{Y}}{n - p}$$

である

演習問題：定理8-2

- 証明のアウトライン
 - V は既知の正定値対称行列である
 - $V = PP'$ にコレスキー分解できるうえに P は正則行列になる
 - $Y = X\beta + \epsilon$ に左から P^{-1} をかける
と . . .

$$P^{-1}Y = P^{-1}X\beta + P^{-1}\epsilon$$

演習問題：定理8-2

- $E[\mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}] = ?$

$$E[\mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}] = \mathbf{P}^{-1}E[\boldsymbol{\epsilon}] = \mathbf{0}$$

演習問題：定理8-2

- $\text{Cov}[\mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}] = ?$

$$\begin{aligned}\text{Cov}[\mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}] &= \mathbf{P}^{-1}\text{Cov}[\boldsymbol{\epsilon}](\mathbf{P}^{-1})' \\ &= \mathbf{P}^{-1}\sigma^2\mathbf{V}(\mathbf{P}^{-1})' \\ &= \sigma^2\mathbf{P}^{-1}\mathbf{V}(\mathbf{P}^{-1})' \\ &= \sigma^2\mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{P}'(\mathbf{P}')^{-1} \\ &= \sigma^2\mathbf{I}\end{aligned}$$

演習問題：定理8-2

- $P^{-1}\epsilon$ は期待値が0で分散が $\sigma^2 I$
 - 誤差の三条件を満たす
- したがって, 式 $P^{-1}Y = P^{-1}X\beta + P^{-1}\epsilon$ に基づく最小二乗推定量はBLUEを与える

演習問題：定理8-2

- $\hat{\beta} = ?$

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

- $(\mathbf{P}^{-1})'(\mathbf{P}^{-1}) = (\mathbf{P}')^{-1}\mathbf{P}^{-1}$
 $= (\mathbf{P}\mathbf{P}')^{-1}$
 $= \mathbf{V}^{-1}$

演習問題：定理8-2

- 前ページのヒント
- 正則行列の積の逆行列
 - A, B が正則行列ならば
 - $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$
- 逆行列と転置の交換
 - A が正則行列ならば
 - $(A')^{-1} = (A^{-1})'$

演習問題：定理8-3

- $\text{Cov}(\hat{\beta}) = ?$

$$\begin{aligned}\text{Cov}(\hat{\beta}) &= \text{Cov}[(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Y}] \\ &= (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\text{Cov}(\mathbf{Y}) \\ &\quad [(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}]' \\ &= (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\sigma^2\mathbf{V} \\ &\quad \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1} \\ &= \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\end{aligned}$$

演習問題：定理8-4

- $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Y} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}$ に基づいて σ^2 の不偏推定量を求める

$$\begin{aligned} s^2 &= \frac{(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Y} - \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Y} - \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n - p} \\ &= \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{P}^{-1})'\mathbf{P}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n - p} \\ &= \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n - p} \end{aligned}$$

演習問題：定理8-4

- $(Y - X\hat{\beta})' V^{-1} (Y - X\hat{\beta}) =$
 $Y' [V^{-1} - V^{-1}X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}]Y$
- $A = V^{-1} - V^{-1}X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}$ とおいておく

演習問題：定理8-4

- $E[Y'AY] = ?$

$$E[Y'AY]$$

$$= \text{tr}(AE[YY'])$$

$$= \text{tr}(A\sigma^2V + AE[Y]E[Y]')$$

$$= \sigma^2\text{tr}(AV) + \text{tr}(E[Y]'AE[Y])$$

演習問題：定理8-4

- $\sigma^2 \text{tr}(\mathbf{AV}) = ?$

$$\begin{aligned}\sigma^2 \text{tr}(\mathbf{AV}) &= \sigma^2 \text{tr}[\mathbf{I} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}(\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'] \\ &= \sigma^2 \text{tr}(\mathbf{I}_n) - \sigma^2 \text{tr}[\mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}(\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'] \\ &= \sigma^2 \text{tr}(\mathbf{I}_n) - \sigma^2 \text{tr}[(\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}] \\ &= \sigma^2 (n - p)\end{aligned}$$

- $\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} : p \times p$ 次元

演習問題：定理8-4

- $\text{tr}(\mathbf{E}[\mathbf{Y}]' \mathbf{A} \mathbf{E}[\mathbf{Y}]) = ?$

$$\begin{aligned}\text{tr}(\mathbf{E}[\mathbf{Y}]' \mathbf{A} \mathbf{E}[\mathbf{Y}]) &= \mathbf{E}[\mathbf{Y}]' \mathbf{A} \mathbf{E}[\mathbf{Y}] \\ &= \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' [\mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1}] \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} \\ &= 0\end{aligned}$$

- $\text{tr}(\mathbf{E}[\mathbf{Y}]' \mathbf{A} \mathbf{E}[\mathbf{Y}])$ はスカラー

演習問題：定理8-4

- $E[s^2] = ?$

$$\frac{E[\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}]}{n - p} = \frac{\sigma^2 \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{V}) + \text{tr}(\mathbf{E}[\mathbf{Y}]'\mathbf{A}\mathbf{E}[\mathbf{Y}])}{n - p}$$

$$= \frac{\sigma^2(n - p) + 0}{n - p}$$

$$= \sigma^2$$

- よって不偏である

一般化最小二乗推定量のまとめ

- 相関がある場合に拡張した一般化最小二乗推定量を導いた
- V が既知の正定値対称行列であれば、一般化最小二乗推定量はBLUEになる
- σ^2 の不偏推定量も得られた

ここで疑問が一つ

- 実際のデータ解析において、 V が既知であることはあるだろうか？
- V が正しく特定できればBLUEを得られるが、 V が間違っていると . . .
- さてどうしたらよいでしょう？