

# 線型推測論

第10回 最尤推定量(2)

2022/6/2

慶應義塾大学病院

長島 健悟

# 誤差の仮定を緩めた場合への拡張

- 分散共分散行列が $\sigma^2 \mathbf{I}$ の場合の最尤推定量を導出した
- 今度は相関がある場合の最尤推定量を考えよう

# 誤差の仮定を緩めた場合への拡張

- 拡張した一般線型モデルの仮定
  - $\mathbf{Y} \sim N(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V})$

注： $\sigma^2$ がちょっと邪魔なので、分散共分散行列の中に含まれた形で定義しなおす

# 一般線型モデルの最尤推定量

- 一般線型モデル  $\mathbf{Y} \sim N(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V})$  の尤度関数  $L(\boldsymbol{\theta})$  を示せ

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\mathbf{V}|^{1/2}} e^{-(\mathbf{Y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})/2}$$

# 一般線型モデルの最尤推定量

- 一般線型モデル  $\mathbf{Y} \sim N(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V})$  の対数尤度関数  $l(\boldsymbol{\theta})$  を示せ

$$l(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{n}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| \\ - \frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

# 一般線型モデルの最尤推定量

- $\frac{\partial l(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = ?$

$$\frac{\partial l(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \mathbf{0} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}} \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \right\}$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}} (\mathbf{Y}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} - 2\boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + \boldsymbol{\beta}' \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \boldsymbol{\beta})$$

$$= -\frac{1}{2} (-2\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y} + 2\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \boldsymbol{\beta})$$

# 一般線型モデルの最尤推定量

- $\frac{\partial l(\theta)}{\partial \beta} = 0$  を満たす  $\hat{\beta}$  を求めよ

$$-\frac{1}{2}(-2\mathbf{X}'\hat{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{Y} + 2\mathbf{X}'\hat{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{X}\hat{\beta}) = 0$$

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

- $\mathbf{V}$  はどう推定したらよい？

# Vの推定方法

- このクラスのモデルにおける推定に対しては、プロファイル尤度法を用いることができる

# 最尤法の改良法

- 通常的最尤法：全尤度関数に基づく
  - 全尤度関数の中には推定に無関係な局外パラメータが含まれることがある
    - 推定が複雑になる
    - 推定精度に悪影響が出ることもある
- この問題の解決方法がいくつも提案されてきた

# 最尤法の改良法

- プロファイル尤度法：興味あるパラメータを与えたもとでの局外パラメータ最尤推定量を全尤度関数に代入したもの
- 条件付き尤度法：局外パラメータの十分統計量の条件付き分布を使う方法
- 周辺尤度法：局外パラメータを積分消去する方法
- 部分尤度法：Cox回帰で用いる, 実はプロファイル尤度としても解釈できる

# プロフィール尤度法

- 尤度関数を  $l(\theta)$
- $\theta = (\alpha', \phi')'$ , 興味のあるパラメータは  $\alpha$ , 局外パラメータは  $\phi$
- $\alpha$ を与えたもとでの  $\phi$ の最尤推定量を  $\hat{\phi}(\alpha)$ と表わす
- プロフィール尤度法

$$\hat{\alpha} = \operatorname{argmax}_{\alpha \in \Theta_{\alpha}} l\{\alpha, \hat{\phi}(\alpha)\}$$

# Vのプロファイル尤度推定量

- Vの推定に興味がある
  - Vを与えたもとでの最尤推定量は
$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V}) = (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Y}$$
- これを全尤度関数に代入すると
$$l\{\mathbf{V}, \hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V})\}$$
$$= -\frac{n}{2}\log 2\pi - \frac{1}{2}\log|\mathbf{V}| - \frac{1}{2}\mathbf{r}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{r}$$
- $\mathbf{r} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Y}$

# Vのプロファイル尤度推定量

- 残念ながら解析的には解けないため, 数値最適化により以下をみたす $\hat{V}$ を計算する

$$\hat{V} = \operatorname{argmax}_{V \in \Theta_V} l\{V, \hat{\beta}(V)\}$$

- ちなみに $V = \sigma^2 I$ とおいたときは $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (Y - X\hat{\beta})' (Y - X\hat{\beta})$ となる

# 制限付き最尤推定 (REML)

- Restricted maximum likelihood estimation
- 通常的最尤推定量では,  $\hat{\sigma}^2$  は不偏性を満たさなかった
- 何とかこの改良を考えられないだろうか？

# 制限付き最尤推定 (REML)

- Harville (1974)の方法
- $V$ の推定のみに興味があるため,  $\beta$ に対して周辺化した周辺尤度関数

$$\int_{\beta \in \Theta_{\beta}} L(\theta) d\beta$$

に基づく推測としてREMLを導出する

- $\Theta_{\beta}$  :  $\beta$ のパラメータ空間全体

# 制限付き最尤推定 (REML)

- 導出では以下の式変形を用いる

$$\begin{aligned} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \\ (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ + (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}) (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \end{aligned}$$

- ちょっと計算が必要だが証明は簡単
- ヒント :  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}$

# 制限付き最尤推定 (REML)

- 周辺尤度関数を求める

$$\begin{aligned} & \int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} L(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\beta} & \because a &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\mathbf{V}|^{1/2}} \\ &= a \int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \right\} d\boldsymbol{\beta} \\ &= a \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\} \\ & \quad \int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}) (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\} d\boldsymbol{\beta} \end{aligned}$$

# 制限付き最尤推定 (REML)

- $(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}) = \mathbf{W}^{-1}$  とおく
- $\int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{W}^{-1} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\} d\boldsymbol{\beta} = ?$ 
$$\int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{W}^{-1} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\} d\boldsymbol{\beta}$$
$$= b \int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} \frac{1}{b} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{W}^{-1} (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\} d\boldsymbol{\beta}$$
$$= b$$
- $b = (2\pi)^{p/2} |\mathbf{W}|^{1/2}$

# 制限付き最尤推定 (REML)

- $$\begin{aligned} & \int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} L(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\beta} \\ &= ab \exp \left\{ -(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) / 2 \right\} \\ &= \frac{ |(\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1}|^{1/2} }{ (2\pi)^{(n-p)/2} |\mathbf{V}|^{1/2} } \\ &\quad \times \exp \left\{ -(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) / 2 \right\} \\ &= \frac{ 1 }{ (2\pi)^{(n-p)/2} |\mathbf{V}|^{1/2} |\mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X}|^{1/2} } \\ &\quad \times \exp \left\{ -(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) / 2 \right\} \end{aligned}$$

# 制限付き最尤推定 (REML)

- 最後に  $\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V}) = (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$  を代入し、整理すれば

$$\begin{aligned} l_R\{\mathbf{V}, \hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V})\} &= \log \int_{\boldsymbol{\beta} \in \Theta_{\boldsymbol{\beta}}} L(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\beta} = \\ &\quad -\frac{n-p}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| \\ &\quad - \frac{1}{2} \log |\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}| - \frac{1}{2} \mathbf{r}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{r} \end{aligned}$$

# 制限付き最尤推定 (REML)

- $V = \sigma^2 \mathbf{I}$ の場合, REMLによる分散の推定量は不偏推定量に一致することが知られている
- $$\hat{\sigma}_R^2 = \frac{1}{n-p} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$$

# まとめ

- 一般線型モデルにおける最尤法, 制限付き最尤法を説明した
- $\hat{\beta}$ は最小二乗推定量, 一般化最小二乗推定量と一致する
- $\sigma^2$ の最尤推定量は不偏ではない
- 制限付き最尤法を使えば $\sigma^2$ の不偏な推定量を与える事ができる

# 引用文献

- Harville D. Bayesian inference for variance components using only error contrasts. *Biometrika* 1974;**61**(2):383–385.