線型推測論

第07回 確率分布の仮定と線形仮説の検定(2)

2019/5/10

統計数理研究所

長島 健悟

メモ

- $\mathrm{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{A}\mathbf{Y}\mathbf{Y}'\}$ (定理1-6)
- 二次形式の分布：$\left(\frac{\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu}}{\sigma}\right)'\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu}}{\sigma}\right) \sim \chi^2(r)$
  - 冪等行列$\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}$：$\mathrm{rank}(\mathbf{A}) = \mathrm{trace}(\mathbf{A})$

複数仮説の検定

- 単一仮説の検定：$\beta_1 = 0, \beta_1 - \beta_2 = 0$
  - t統計量のような検定統計量を用いる
- 複数仮説の検定：$\beta_1 = \beta_2 = 0, \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$
  - t統計量では原理的に無理
  - β_1とβ_2が同時に0になるときだけ0になる統計量を構成したい！

複数仮説の検定

- 和 $\beta_1 + \beta_2$ を評価する統計量はどうか？
  - ダメ：$\beta_1 = -\beta_2$のときにも$\beta_1 + \beta_2 = 0$になってしまう
- 候補は色々あるが…
  - 平方和：$\beta_1^2 + \beta_2^2$
  - 絶対値の和：$|\beta_1| + |\beta_2|$
  - etc…
- 平方和はかなり扱いやすい

平方和に基づく複数仮説の検定

- $\beta_1 = \beta_2 = 0$だけでなく, 一般化すると

$$H_0\colon \mathbf{C}\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta} \\ \vdots \\ \mathbf{c}_m'\boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow H_0\colon (\mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta})'\mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta} + \cdots + (\mathbf{c}_m'\boldsymbol{\beta})'\mathbf{c}_m'\boldsymbol{\beta} = 0$$

$$\Leftrightarrow H_0\colon \left(\sum_{j=1}^{p} c_{1j}\beta_j\right)^2 + \cdots + \left(\sum_{j=1}^{p} c_{mj}\beta_j\right)^2 = 0$$

- 平方和を使うと複数仮説の検定をこのように考えることができる

平方和の統計量

- 平方和の統計量はどう作ればよい？
  - 二次形式の分布 ($\mathbf{A}$は冪等)

$$\left(\frac{\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu}}{\sigma}\right)'\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu}}{\sigma}\right)\sim\chi^2(r)$$

- 二次形式は平方和の統計量を含んだ

$$\sum_i\sum_j a_{ij}\left(\frac{y_i-\mu}{\sigma}\right)\left(\frac{y_j-\mu}{\sigma}\right)$$

- 二次形式の分布をうまく使って複数仮説の検定統計量を構成してみよう

F統計量

- U_1, U_2が独立に自由度d_1, d_2のカイ二乗分布に従うとき

$$\frac{U_1/d_1}{U_2/d_2} \sim F(d_1, d_2)$$

- カイ二乗分布に従う確率変数を自由度で割った統計量の比をF統計量と呼ぶのであった

一つの平方和の仮説検定

- 一番簡単な仮説の平方和版を考える
  - $m = 1,\ \mathbf{c}_1' = \left(c_{11}, c_{12}, \dots, c_{1p}\right)$
- $H_0: (\mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta})'\mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta} = \left(\sum_{j=1}^{p} c_{1j}\beta_j\right)^2 = 0$
  - これは当然

$$\Leftrightarrow H_0: \mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta} = 0$$

F統計量：平方和に基づく統計量

- まずはスカラーの場合：t検定統計量を二乗和の形に変形する
  - $t = \frac{Z}{\sqrt{V/(n-p)}}, Z \sim N(0,1), V \sim \chi^2(n-p)$ であった
- 二乗和が含まれれば良いので…
  - $t^2 = \frac{Z^2}{V/(n-p)} = \frac{Z^2/1}{V/(n-p)} \sim F(1, n-p)$

F統計量：平方和に基づく統計量

- ベクトルの場合：$\mathbf{c}_1'\boldsymbol{\beta}$の場合
  - t検定と同様, 分子Z_1の二乗を考える
- 帰無仮説のもとで：$Z_1 = \dfrac{\mathbf{c}_1'\hat{\boldsymbol{\beta}}}{\sqrt{\sigma^2\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1}}$
- $Z_1^2 = ?$

$$Z_1^2 = \left(\mathbf{c}_1'\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)'[\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1]^{-1}\left(\mathbf{c}_1'\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)/\sigma^2$$

F統計量：平方和に基づく統計量

- $\left(\mathbf{c}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)'\mathbf{V}^{-1}\left(\mathbf{c}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)$, $\mathbf{V}=\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1$

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

- 代入すると
  - $\left(\mathbf{c}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)'\mathbf{V}^{-1}\left(\mathbf{c}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)=?$

$$\mathbf{Y}'\{\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1\mathbf{V}^{-1}\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\}\mathbf{Y}$$

  - これは二次形式になっている

F統計量：平方和に基づく統計量

- $\mathbf{A} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1\mathbf{V}^{-1}\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$
  - これは冪等行列である
- $\mathrm{rank}(\mathbf{A}) = \mathrm{trace}(\mathbf{A}) = ?$
  - (定理1-6) $\mathrm{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{A}\mathbf{Y}\mathbf{Y}'\}$
  - $\mathrm{tr}\{\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1\mathbf{V}^{-1}\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{V}^{-1}\mathbf{c}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{c}_1\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{V}^{-1}\mathbf{V}\} = 1$
  - $\mathbf{c}_1$ ：$(p \times 1)$

F統計量：平方和に基づく統計量

- 分子の二乗のσ^2倍がカイ二乗分布に従う
- Vがカイ二乗分布に従うことは証明済
  - $\sigma^2 Z_1^2 \sim \chi^2(1)$
  - $V = (n-p)\dfrac{s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-p)$
  - $t^2 = \dfrac{Z_1^2/1}{V/(n-p)} \sim F(1, n-p)$
- F統計量を使ってもt検定と同じ仮説を評価できる

複数仮説版のF統計量

- $\mathbf{C\beta}$の場合の一般化を考える
- $\mathbf{C}$：$m \times p$, $\mathbf{C\beta}$：$m \times 1$
- 仮定より$\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}} \sim N(\mathbf{C\beta}, \sigma^2\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}')$
  - m次元多変量正規分布
  - $\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}} \\ \vdots \\ \mathbf{c}_m'\widehat{\boldsymbol{\beta}} \end{pmatrix}$

複数仮説版のF統計量

- m個の仮説について
- 帰無仮説のもとで

$$\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}')$$

- これの二乗和を求めれば…

$$\left(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)' \{\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}\}^{-1}\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}/\sigma^2$$

複数仮説版のF統計量

- $\left(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)'\mathbf{W}^{-1}\left(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right), \mathbf{W} = \mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}'$

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

- 代入すると
  - $\left(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right)'\mathbf{W}^{-1}\left(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right) =?$

$$\mathbf{Y}'\{\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\}\mathbf{Y}$$

  - これも当然二次形式になっている

F統計量：平方和に基づく統計量

- $\mathbf{B} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$
  - これは冪等行列である
- $\mathrm{rank}(\mathbf{B}) = \mathrm{trace}(\mathbf{B}) =?$
  - (定理1-6) $\mathrm{tr}\{\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{A}\mathbf{Y}\mathbf{Y}'\}$
  - $\mathrm{tr}\{\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}'\} = \mathrm{tr}\{\mathbf{W}^{-1}\mathbf{W}\} = m$
  - $\mathbf{C}$：$(m \times p)$

F統計量：平方和に基づく統計量

- 結局
  - $(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}})'\{\mathbf{C}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{C}'\}^{-1}\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}/\sigma^2 \sim \chi^2(m)$
  - $V = (n-p)\dfrac{s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-p)$
  - $\dfrac{(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}})'\left\{\mathbf{C}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{C}'\right\}^{-1}\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}/m\sigma^2}{V/(n-p)} =$

$$\frac{(\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}})'\left\{\mathbf{C}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{C}'\right\}^{-1}\mathbf{C}\widehat{\boldsymbol{\beta}}/m}{s^2} \sim F(m, n-p)$$

具体的な例1

- $\mathbf{C\beta} = \mathbf{0}$の具体例を見て, どのような仮説を検定できるのか検討しよう
- $\mathbf{C} = \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$
  - H_0: ?
  - H_0: $\beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_p = 0$

具体的な例2

- $\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$
  - $H_0: \beta_1 - \beta_2 = 0, \beta_2 - \beta_3 = 0, \dots, \beta_{p-1} - \beta_p = 0$
  - $H_0: \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_p$

おさらい

- 単一の線型仮説のt統計量を導出した
- 複数仮説を同時に検定するF統計量を導出した
  - 二次形式の分布の応用と冪等行列が重要となる
  - 一般線型モデルにおけるF検定はt検定の自然な拡張であった