

アウターリーゼミ 第4回 補足

教科書 1.5 では $V(\hat{\alpha}), V(\hat{\beta}), Cov(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ を求めてから $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ が $N(\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \frac{\sigma^2}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix})$ に従うと結論づけているが。

疑問① $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ がそれぞれ正規分布に従うのか?

疑問② $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ が正規分布に従うからといって $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ は明らかに独立でない (そもそも (x, y) のデータから推定していることから) のに $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ が多次元正規分布に従うのか?

等の疑問が生じるだろう。なので補足として §1. $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ の平均と分散共分散行列の導出
§2. 線型変換に対する多次元の再生性 について論じようと思う。

§1.

そもそも (α, β) の推定には正規方程式が用いられている。

$(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ の推定
$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \bar{y} \\ \bar{xy} \end{pmatrix}$$
 を表している。ここで説明変数は与えられた確定値と仮定から $\begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}$ は定行列。

しかし $\begin{pmatrix} \bar{y} \\ \bar{xy} \end{pmatrix}$ の値にはばらつきが生じるため $\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix}$ がばらつくのである。 $\begin{pmatrix} \bar{y} \\ \bar{xy} \end{pmatrix}$ のばらつきについて詳しくみていこう。

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum y_i = \frac{1}{n} \sum (\beta x_i + \alpha + \varepsilon_i) = \beta \bar{x} + \alpha + \frac{1}{n} \sum \varepsilon_i$$
$$\bar{xy} = \frac{1}{n} \sum x_i y_i = \frac{1}{n} \sum (\beta x_i^2 + \alpha x_i + x_i \varepsilon_i) = \beta \bar{x}^2 + \alpha \bar{x} + \frac{1}{n} \sum x_i \varepsilon_i$$

$$\text{よって } \begin{pmatrix} \bar{y} \\ \bar{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \frac{1}{n} \begin{pmatrix} \sum \varepsilon_i \\ \sum x_i \varepsilon_i \end{pmatrix}$$

これを正規方程式に代入すると
$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \frac{1}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum \varepsilon_i \\ \sum x_i \varepsilon_i \end{pmatrix}$$
 である。 ... ①

$(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ に対する
$$E \left[\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} \right] = E \left[\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right] + \frac{1}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} E \left[\begin{pmatrix} \sum \varepsilon_i \\ \sum x_i \varepsilon_i \end{pmatrix} \right] = E \left[\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$
 である。
 $E[\varepsilon_i] = 0$ と $E[x_i \varepsilon_i] = 0$ であり、つまり期待値が真の値になっている。

$(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ の分散
$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix}$$
 の分散 多変数の解析を行うとき、分散共分散行列 (Σ) を求めることがよくある。
ここで $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ に対して分散共分散行列を求めることを考えよう。

$V[\varepsilon_i] = \sigma^2, Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$ が使えればよいのだが、 $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ では

$$\frac{1}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum \varepsilon_i \\ \sum x_i \varepsilon_i \end{pmatrix} = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

定行列による変換

少々複雑な結果となりそうである。一旦線型変換時に分散共分散行列がどうなるかを考えよう。

線型変換時のΣの変化

$x_1 = a_{11}\epsilon_1 + a_{12}\epsilon_2 + \dots + a_{1n}\epsilon_n$ ($E\epsilon_i = 0, V(\epsilon_i) = \sigma^2, Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$) のように線型変換したとき:

$x_2 = a_{21}\epsilon_1 + a_{22}\epsilon_2 + \dots + a_{2n}\epsilon_n$

(x_1, x_2) の分散共分散行列Σは

$\Sigma = \begin{pmatrix} V(x_1) & Cov(x_1, x_2) \\ Cov(x_1, x_2) & V(x_2) \end{pmatrix}$ と表せる。それぞれ成分ごとに考えよう。

$V(x_1) = Cov(x_1, x_1) = Cov(a_{11}\epsilon_1 + a_{12}\epsilon_2 + \dots + a_{1n}\epsilon_n, a_{11}\epsilon_1 + a_{12}\epsilon_2 + \dots + a_{1n}\epsilon_n)$

ここで $V(\epsilon_i) = \sigma^2, Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$ を利用し、 $a_{11}^2\sigma^2 + a_{12}^2\sigma^2 + \dots + a_{1n}^2\sigma^2$ と計算できる。

同様に $Cov(x_1, x_2) = a_{11}a_{21}\sigma^2 + a_{12}a_{22}\sigma^2 + \dots + a_{1n}a_{2n}\sigma^2$

$V(x_2) = a_{21}^2\sigma^2 + a_{22}^2\sigma^2 + \dots + a_{2n}^2\sigma^2$ と表せる。

$\Sigma = \sigma^2 \begin{pmatrix} a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2 & a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22} + \dots + a_{1n}a_{2n} \\ a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22} + \dots + a_{1n}a_{2n} & a_{21}^2 + a_{22}^2 + \dots + a_{2n}^2 \end{pmatrix} = \sigma^2 \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} \end{pmatrix}$ と表せる。

↑ 線型変換時の分散共分散行列!

実際にα, βの平均と分散

これを参考に、求める分散共分散行列は

$(A^T)^T = (A^T)^T$ を利用し、 A^T と A は一致する。

$\Sigma = \sigma^2 \frac{1}{n^2} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} = \sigma^2 \frac{1}{n^2} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} n & x_1 + x_2 + \dots + x_n \\ x_1 + x_2 + \dots + x_n & x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1}$

$= \frac{\sigma^2}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{\sigma^2}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1}$ と表せる。

ゆえに $\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix}$ の平均は $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ と、分散共分散行列は $\frac{\sigma^2}{n} \begin{pmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & \bar{x}^2 \end{pmatrix}^{-1}$ と表せる。

§2.

A 逆行列

$$\begin{aligned} x_1 &= a_{11} \varepsilon_1 + a_{12} \varepsilon_2 + \dots + a_{1n} \varepsilon_n \\ x_2 &= a_{21} \varepsilon_1 + a_{22} \varepsilon_2 + \dots + a_{2n} \varepsilon_n \\ &\vdots \\ x_n &= a_{n1} \varepsilon_1 + a_{n2} \varepsilon_2 + \dots + a_{nn} \varepsilon_n \end{aligned} \quad \rightarrow \text{行列} \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

変数変換は可逆
行列 $|A| \neq 0$ である

逆行列 $f_{x_1, x_2, \dots, x_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n) \left| \frac{\partial(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)}{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)} \right| = f_{\varepsilon_1}(\varepsilon_1) f_{\varepsilon_2}(\varepsilon_2) \dots f_{\varepsilon_n}(\varepsilon_n) \frac{1}{|A|}$

$$\begin{aligned} \therefore f(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \frac{1}{|A|} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^n \exp\left(-\frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \dots + \varepsilon_n^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{1}{|A|} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n) \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}\right) \\ &= \frac{1}{|A|} (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix} = (x_1, \dots, x_n) (A^T)^{-1} \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma^2 \end{pmatrix}^{-1} A^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = (x_1, \dots, x_n) \underbrace{\left(A \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma^2 \end{pmatrix} A^T \right)^{-1}}_{=\Sigma \text{ とおく}} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\therefore f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{|A|} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}(x_1, \dots, x_n) \Sigma^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}\right)$$

ゆえに $\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \sim N\left(0, A \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma^2 \end{pmatrix} A^T\right)$ である。

よって、 (x_1, x_2) が多次元正規分布に従うことが納得できるはず。

追記

§2 の議論を使うには、線型変換 A によって変換された値の Σ は元の $\Sigma \in A \Sigma A^T$ としたものであってもかまわない。弱点は正規分布を仮定しているところだけだ...