

よって、Prop.C14 系より、(i),(ii) が出る。(iii) は、Prop.C15 から出る。
 (iv) は $e/\sigma = X$ と考えれば Prop.C18 より分かる。(v) は (iii) より出る。

証明終

[注意]:Prop.1.3.1 より、 $\hat{\beta}$, e の平均、分散は知られていたから、正規性が新しい結果である。

Prop.1.3.5. $\hat{\beta}$, $\hat{\sigma}^2$ は、 β , σ^2 の不偏推定量の中で分散最小である。

証明：略 (レイマンの仮説検定論を見よ)

証明終

モデルの中に含まれている説明変数 (x_1, \dots, x_p) の一部が不要であるかどうかの検定を考える。

Prop.1.3.6. $y = X\beta + \varepsilon$

$$X = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \\ p-q & q \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \begin{matrix} p-q \\ q \end{matrix}$$

$$H_0 : \beta_2 = \mathbf{0}$$

⇒

(i) H_0 の尤度比 (LR, Likelihood Ratio) は、以下の式で与えられる。

$$LR = \left(\frac{\|\tilde{e}\|^2}{\|e\|^2} \right)^{-\frac{n}{2}}$$

ここに、 $\tilde{e} := y - X_1 \tilde{\beta}_1$

$\tilde{\beta}_1 : \beta_2 = \mathbf{0}$ のときの β_1 の最小二乗解 (LSE)

(ii) $\tilde{e} - e \sim N_n((I_n - \Pi_{X_1})X_2\beta_2, \sigma^2(\Pi_X - \Pi_{X_1}))$

$\tilde{y} := X_1 \tilde{\beta}_1$, $\tilde{e} - e$, e は独立

(iii) H_0 の LR test (有意水準 α) は、

$$\frac{n-p}{q} \frac{\|\tilde{e} - e\|^2}{\|e\|^2} > F_{n-p}^q(\alpha) \iff H_0 \text{ を棄てる}$$

証明：(i) Prop.1.3.3 より、

$$\max_{\beta, \sigma^2} L = K \hat{\sigma}_M^{-n} \exp\left(-\frac{n}{2}\right)$$

$$\text{ただし、} \hat{\sigma}_M^2 = \frac{1}{n} \|e\|^2$$

H_0 の下で、同様に

$$\max_{\beta_1, \sigma^2} L = K \tilde{\sigma}^{-n} \exp\left(-\frac{n}{2}\right)$$

$$\text{ただし、} \tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \|\tilde{e}\|^2$$

$$\text{ゆえに、} LR = \frac{\max_{\beta_1, \sigma^2} L}{\max_{\beta, \sigma^2} L} = \left(\frac{\tilde{\sigma}}{\hat{\sigma}_M} \right)^{-n} = \left(\frac{\|\tilde{e}\|^2}{\|e\|^2} \right)^{-\frac{n}{2}}$$

(ii) $\mathbf{e} = (I - \Pi_X)\mathbf{y}$

$$\tilde{\mathbf{e}} - \mathbf{e} = (I - \Pi_{X_1})\mathbf{y} - (I - \Pi_X)\mathbf{y} = (\Pi_X - \Pi_{X_1})\mathbf{y}$$

$$\tilde{\mathbf{y}} = \Pi_{X_1}\mathbf{y}$$

これらは、1 次変換ゆえ、jointly normal
3 つのベクトルは互いに直交。ゆえに独立となる。
(注：この証明に次頁の命題 A.2 を用いる)

(iii)
$$LR = \left(\frac{\|\mathbf{e}\|^2 + \|\tilde{\mathbf{e}} - \mathbf{e}\|^2}{\|\mathbf{e}\|^2} \right)^{-\frac{n}{2}} = \left(1 + \frac{\|\tilde{\mathbf{e}} - \mathbf{e}\|^2}{\|\mathbf{e}\|^2} \right)^{-\frac{n}{2}}$$

ゆえに、
$$LR < c \iff \frac{\|\tilde{\mathbf{e}} - \mathbf{e}\|^2}{\|\mathbf{e}\|^2} > c'$$

H_0 の下で、

$$\left. \begin{array}{l} \|\tilde{\mathbf{e}} - \mathbf{e}\|^2 \sim \sigma^2 \chi_q^2 \\ \|\mathbf{e}\|^2 \sim \sigma^2 \chi_{n-p}^2 \end{array} \right\} \perp$$

ゆえに、
$$\frac{n-p}{q} \frac{\|\tilde{\mathbf{e}} - \mathbf{e}\|^2}{\|\mathbf{e}\|^2} \sim F_{n-p}^q$$

証明終

この検定を使って、説明変数の選択を行うことができる。
ただし、 x_1, \dots, x_p が重要度の順に並んでいると仮定する。
まず、

$$H_p : \beta_p = 0$$

を検定する。

H_p が棄却されれば (x_1, \dots, x_p) 全体を使い、採択されれば

$$H_{p-1} : \beta_{p-1} = 0$$

に進む。以下、同様である。この方法を、変数減少法という。

逆に、 $H_1 : \beta_1 = 0$ から出発し、変数を加えていく方法を 変数増加法 という。

他に、変数減増法 (イナバ氏お勧め)、変数増減法 がある。

Remark : 変数減増法

3 つ以上の変数 (例えば、 x_1, x_2, x_3) を削除したとき、本当は x_1 が重要な変数であるのに、これに相関がある x_2, x_3 が残っていることで、最初に、削除されることがある。この後、 x_2, x_3 は、単独では影響が小さいから削除されると、本当に残したい x_1 も含めて削除されてしまう。

このような場合に、最適なモデル (今回は、 x_1 を含むモデル) に到達できる変数選択法として、変数減増法がある。変数減増法は、フルモデルから始めて、変数を減少していくが、2 つ以上の変数を削除した場合、今までに削除した中で、取り込むと寄与率が著しく上がる時には、モデルに残す、という手法である。大事な変数を落としてしまわない、と言う意味で、広く用いられている選択方式である。

Remark : 最小二乗解, LSE(Least Square Estimator) とは

Def.1.2.2 で与えられた $\hat{\beta}$ は、ズレの 2 乗の和が最小になる解である。これを、最小二乗解 という。

補題 A.1. 部分行列の逆行列表現の公式

$$(A.1) \quad \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1}BWCA^{-1} & -A^{-1}BW \\ -WCA^{-1} & W \end{pmatrix}$$

が成り立つ。ただし、 $W = (D - CA^{-1}B)^{-1}$ である。

定義 A.1. 行列 X による射影 Π_X とは、 $\Pi_X = X(X'X)^{-1}X'$ とする。

命題 A.2. $X = [X_1 X_2]$ における射影 Π_X, Π_{X_1} について、

$$(A.2) \quad \Pi_{X_1} \Pi_X = \Pi_{X_1}$$

が成り立つことを示せ。

証明：まず、射影の定義 A.1 より、

$$(A.3) \quad \Pi_X = X(X'X)^{-1}X'$$

$$(A.4) \quad \Pi_{X_1} = X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'$$

である。ここで、

$$(A.5) \quad (X'X)^{-1} = \left[\begin{array}{c} X_1' \\ X_2' \end{array} [X_1 X_2] \right]^{-1} = \begin{bmatrix} X_1'X_1 & X_1'X_2 \\ X_2'X_1 & X_2'X_2 \end{bmatrix}^{-1}$$

に対して、補題 A.1 より、(A.1) 式を適用することができる。(これで、必ず証明できるはず。)

$$(A.5)' \quad (X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} (X_1'X_1)^{-1} + (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2WX_2'X_1(X_1'X_1)^{-1} & -(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2W \\ -WX_2'X_1(X_1'X_1)^{-1} & W \end{bmatrix}$$

$$=: \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \text{ とおく。}$$

ここで、 $W^{-1} = X_2'X_2 - X_2'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 = X_2'(I - \Pi_{X_1})X_2$ である。

したがって、 X の射影

$$(A.6) \quad \Pi_X = X(X'X)^{-1}X' = [X_1 X_2] \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix} = [X_1 X_2] \begin{bmatrix} AX_1' + BX_2' \\ CX_1' + DX_2' \end{bmatrix}$$

$$= X_1AX_1' + X_1BX_2' + X_2CX_1' + X_2DX_2'$$

ここに、(A.5)' を代入して、

$$(A.7) \quad \Pi_X = X_1\{(X_1'X_1)^{-1} + (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2WX_2'X_1(X_1'X_1)^{-1}\}X_1'$$

$$+ X_1\{-(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2W\}X_2' + X_2\{-WX_2'X_1(X_1'X_1)^{-1}\}X_1' + X_2WX_2'$$

$$= \Pi_{X_1} + \Pi_{X_1}X_2WX_2'\Pi_{X_1} - \Pi_{X_1}X_2WX_2' - X_2WX_2'\Pi_{X_1} + X_2WX_2'$$

$$= \Pi_{X_1} + (I - \Pi_{X_1})(X_2WX_2')(I - \Pi_{X_1})$$

ここで、 $X_1' \Pi_{X_1} = X_1' X_1 (X_1' X_1)^{-1} X_1' = X_1'$ ゆえ $X_1' (I - \Pi_{X_1}) = 0$ であり、
(A.8) $X_1' \Pi_X = X_1' \{ \Pi_{X_1} + (I - \Pi_{X_1})(X_2' W X_2')(I - \Pi_{X_1}) \} = X_1' + 0 = X_1'$
となる。したがって、結論を得る。（証明終）

別証明：まず、

$$(A.9) \quad X' \Pi_X = X' X (X' X)^{-1} X' = X'$$

ゆえ、 $X' \Pi_X = X'$ に $X = [X_1' X_2']$ を代入すると、

$$(A.10) \quad \begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix} \Pi_X = \begin{bmatrix} X_1' \Pi_X \\ X_2' \Pi_X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1' \\ X_2' \end{bmatrix}$$

したがって、 $X_1' \Pi_X = X_1'$ と分かる。よって、結論を得る。（別証明終）