

Mean and Variance of $\hat{\beta}_2$: u_1, u_2, \dots, u_n are assumed to be mutually independently and identically distributed with mean zero and variance σ^2 , but they are not necessarily normal.

Remember that we do not need normality assumption to obtain mean and variance but the normality assumption is required to test a hypothesis.

From (16), the expectation of $\hat{\beta}_2$ is derived as follows:

$$E(\hat{\beta}_2) = E(\beta_2 + \sum_{i=1}^n \omega_i u_i) = \beta_2 + E(\sum_{i=1}^n \omega_i u_i) = \beta_2 + \sum_{i=1}^n \omega_i E(u_i) = \beta_2. \quad (17)$$

It is shown from (17) that the ordinary least squares estimator $\hat{\beta}_2$ is an **unbiased estimator** (不偏推定量) of β_2 .

From (16), the variance of $\hat{\beta}_2$ is computed as:

$$\begin{aligned} V(\hat{\beta}_2) &= V(\beta_2 + \sum_{i=1}^n \omega_i u_i) = V(\sum_{i=1}^n \omega_i u_i) = \sum_{i=1}^n V(\omega_i u_i) = \sum_{i=1}^n \omega_i^2 V(u_i) \\ &= \sigma^2 \sum_{i=1}^n \omega_i^2 = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}. \end{aligned} \tag{18}$$

The third equality holds because u_1, u_2, \dots, u_n are mutually independent.

The last equality comes from (15).

Thus, $E(\hat{\beta}_2)$ and $V(\hat{\beta}_2)$ are given by (17) and (18).

Gauss-Markov Theorem (ガウス・マルコフ定理): $\hat{\beta}_2$ has minimum variance within a class of the linear unbiased estimators.

→ **best linear unbiased estimator (BLUE, 最良線型不偏推定量)**

(Proof is omitted.)

Distribution of $\hat{\beta}_2$: We discuss the small sample properties of $\hat{\beta}_2$.

In order to obtain the distribution of $\hat{\beta}_2$ in small sample, the distribution of the error term has to be assumed.

Therefore, the extra assumption is that $u_i \sim N(0, \sigma^2)$.

Writing (16), again, $\hat{\beta}_2$ is represented as:

$$\hat{\beta}_2 = \beta_2 + \sum_{i=1}^n \omega_i u_i.$$

First, we obtain the distribution of the second term in the above equation.

It is well known that sum of normal random variables results in a normal distribution.

Therefore, $\sum_{i=1}^n \omega_i u_i$ is distributed as:

$$\sum_{i=1}^n \omega_i u_i \sim N(0, \sigma^2 \sum_{i=1}^n \omega_i^2).$$

Therefore, $\hat{\beta}_2$ is distributed as:

$$\hat{\beta}_2 = \beta_2 + \sum_{i=1}^n \omega_i u_i \sim N(\beta_2, \sigma^2 \sum_{i=1}^n \omega_i^2),$$

or equivalently,

$$\frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2}{\sigma \sqrt{\sum_{i=1}^n \omega_i^2}} = \frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2}{\sigma / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \sim N(0, 1),$$

for any n .

Moreover, replacing σ^2 by its estimator $s^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2 x_i)^2$, it is known that we have:

$$\frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \sim t(n-2),$$

where $t(n-2)$ denotes t distribution with $n-2$ degrees of freedom.

Thus, under normality assumption on the error term u_i , the $t(n - 2)$ distribution is used for the confidence interval and the testing hypothesis in small sample.

Or, taking the square on both sides,

$$\left(\frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \right)^2 \sim F(1, n - 2).$$

[Review] Confidence Interval (信頼区間, 区間推定):

Suppose that X_1, X_2, \dots, X_n are mutually independently, identically and normally distributed with mean μ and variance σ^2 .

Then, we can obtain: $\frac{\bar{X} - \mu}{S/\sqrt{n}} \sim t(n-1)$, where $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$.

That is,

$$P(-t_{\alpha/2}(n-1) < \frac{\bar{X} - \mu}{S/\sqrt{n}} < t_{\alpha/2}(n-1)) = 1 - \alpha$$

i.e.,

$$P\left(\bar{X} - t_{\alpha/2}(n-1) \frac{S}{\sqrt{n}} < \mu < \bar{X} + t_{\alpha/2}(n-1) \frac{S}{\sqrt{n}}\right) = 1 - \alpha.$$

Note that $t_{\alpha/2}(n-1)$ is obtained from the t distribution table, given α and $n-1$.

Then, replacing \bar{X} by \bar{x} , we obtain the $100(1-\alpha)\%$ confidence interval of μ as follows:

$$\left(\bar{x} - t_{\alpha/2}(n-1) \frac{S}{\sqrt{n}}, \bar{x} + t_{\alpha/2}(n-1) \frac{S}{\sqrt{n}}\right).$$

[End of Review]

In the case of OLS,

$$P\left(-t_{\alpha/2}(n-2) < \frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} < t_{\alpha/2}(n-2)\right) = 1 - \alpha,$$

where $t_{\alpha/2}(n-2)$ denotes $100 \times \alpha/2\%$ point from the $t(n-2)$ distribution.

Rewriting,

$$P\left(\hat{\beta}_2 - t_{\alpha/2}(n-2) \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} < \beta_2 < \hat{\beta}_2 + t_{\alpha/2}(n-2) \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}\right) = 1 - \alpha.$$

Replacing $\hat{\beta}_2$ and s^2 by observed data, the $100(1 - \alpha)\%$ confidence interval of β_2 is given by:

$$\left(\hat{\beta}_2 - t_{\alpha/2}(n-2) \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}, \hat{\beta}_2 + t_{\alpha/2}(n-2) \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}\right).$$

[Review] Testing the Hypothesis (仮説検定):

Suppose that X_1, X_2, \dots, X_n are mutually independently, identically and normally distributed with mean μ and variance σ^2 .

Then, we obtain: $\frac{\bar{X} - \mu}{S/\sqrt{n}} \sim t(n-1)$, where $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$, which is known as the unbiased estimator of σ^2 .

- The null hypothesis $H_0 : \mu = \mu_0$, where μ_0 is a fixed number.
- The alternative hypothesis $H_1 : \mu \neq \mu_0$

Under the null hypothesis, we have the distribution: $\frac{\bar{X} - \mu_0}{S/\sqrt{n}} \sim t(n-1)$.

Replacing \bar{X} and S^2 by \bar{x} and s^2 , compare $\frac{\bar{x} - \mu_0}{s/\sqrt{n}}$ and $t(n-1)$.

H_0 is rejected when $\left| \frac{\bar{x} - \mu_0}{s/\sqrt{n}} \right| > t_{\alpha/2}(n-1)$.

$t_{\alpha/2}(n-1)$ is obtained from the significance level α and the degrees of freedom $n-1$.

[End of Review]

In the case of OLS, the hypotheses are as follows:

- The null hypothesis $H_0 : \beta_2 = \beta_2^*$
- The alternative hypothesis $H_1 : \beta_2 \neq \beta_2^*$

Under H_0 ,

$$\frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2^*}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \sim t(n-2).$$

Replacing $\hat{\beta}_2$ and s^2 by the observed data, compare $\frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2^*}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$ and $t(n-2)$.

H_0 is rejected at significance level α when $\left| \frac{\hat{\beta}_2 - \beta_2^*}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \right| > t_{\alpha/2}(n-1)$.

(*) $\hat{\beta}_2 =$ Coefficient, $\frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} =$ Standard Error,
 $s =$ Standard Error of Regression

3 多重回帰

n 組のデータ $(Y_i, X_{1i}, X_{2i}, \dots, X_{ki})$, $i = 1, 2, \dots, n$ を用いて, k 変数の多重回帰モデルを考える。

$$Y_i = \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \dots + \beta_k X_{ki} + u_i,$$

ただし, X_{ji} は j 番目の説明変数の第 i 番目の観測値を表す。 u_i は誤差項 (または, 攪乱項) で, 同じ仮定を用いる (すなわち, u_1, u_2, \dots, u_n は互いに独立に, 平均ゼロ, 分散 σ^2 の正規分布に従う)。

$\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ は推定されるべきパラメータである。

すべての i について, $X_{1i} = 1$ とすれば, β_1 は定数項として表される。

次のような関数 $S(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)$ を定義する。

$$S(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k) = \sum_{i=1}^n u_i^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_1 X_{1i} - \beta_2 X_{2i} - \dots - \beta_k X_{ki})^2$$

このとき,

$$\min_{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k} S(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)$$

となるような $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ を求める。 \implies 最小自乗法

このときの解を $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k$ とする。

最小化のためには,

$$\frac{\partial S(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)}{\partial \beta_1} = 0, \quad \frac{\partial S(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)}{\partial \beta_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial S(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)}{\partial \beta_k} = 0$$

を満たす $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ が $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k$ となる。

すなわち, $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k$ は,

$$\sum_{i=1}^n (Y_i - \widehat{\beta}_1 X_{1i} - \widehat{\beta}_2 X_{2i} - \dots - \widehat{\beta}_k X_{ki}) X_{1i} = 0,$$
$$\sum_{i=1}^n (Y_i - \widehat{\beta}_1 X_{1i} - \widehat{\beta}_2 X_{2i} - \dots - \widehat{\beta}_k X_{ki}) X_{2i} = 0,$$

$$\begin{aligned} & \vdots \\ & \sum_{i=1}^n (Y_i - \widehat{\beta}_1 X_{1i} - \widehat{\beta}_2 X_{2i} - \cdots - \widehat{\beta}_k X_{ki}) X_{ki} = 0, \end{aligned}$$

を満たす。

さらに、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n X_{1i} Y_i &= \widehat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n X_{1i}^2 + \widehat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n X_{1i} X_{2i} + \cdots + \widehat{\beta}_k \sum_{i=1}^n X_{1i} X_{ki}, \\ \sum_{i=1}^n X_{2i} Y_i &= \widehat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n X_{1i} X_{2i} + \widehat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n X_{2i}^2 + \cdots + \widehat{\beta}_k \sum_{i=1}^n X_{2i} X_{ki}, \\ & \vdots \\ \sum_{i=1}^n X_{ki} Y_i &= \widehat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n X_{1i} X_{ki} + \widehat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n X_{2i} X_{ki} + \cdots + \widehat{\beta}_k \sum_{i=1}^n X_{ki}^2, \end{aligned}$$

行列表示によって,

$$\begin{pmatrix} \sum X_{1i}Y_i \\ \sum X_{2i}Y_i \\ \vdots \\ \sum X_{ki}Y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum X_{1i}^2 & \sum X_{1i}X_{2i} & \cdots & \sum X_{1i}X_{ki} \\ \sum X_{1i}X_{2i} & \sum X_{2i}^2 & \cdots & \sum X_{2i}X_{ki} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum X_{1i}X_{ki} & \sum X_{2i}X_{ki} & \cdots & \sum X_{ki}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_1 \\ \widehat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \widehat{\beta}_k \end{pmatrix},$$

が得られ, $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k$ についてまとめると,

$$\begin{pmatrix} \widehat{\beta}_1 \\ \widehat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \widehat{\beta}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum X_{1i}^2 & \sum X_{1i}X_{2i} & \cdots & \sum X_{1i}X_{ki} \\ \sum X_{1i}X_{2i} & \sum X_{2i}^2 & \cdots & \sum X_{2i}X_{ki} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum X_{1i}X_{ki} & \sum X_{2i}X_{ki} & \cdots & \sum X_{ki}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum X_{1i}Y_i \\ \sum X_{2i}Y_i \\ \vdots \\ \sum X_{ki}Y_i \end{pmatrix},$$

を解くことになる。⇒ コンピュータによって計算

3.1 推定量の性質

$\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ の最小二乗推定量は $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k$ とする。

誤差項 (または, 攪乱項) u_i の分散 σ^2 の推定量 s^2 は,

$$s^2 = \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n \widehat{u}_i^2 = \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n (Y_i - \widehat{\beta}_1 X_{1i} - \widehat{\beta}_2 X_{2i} - \dots - \widehat{\beta}_k X_{ki})^2$$

として表される。

このとき,

$$E(\widehat{\beta}_j) = \beta_j, \quad E(s^2) = \sigma^2,$$

を証明することが出来る。(証明略)

分布について： $\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2, \dots, \widehat{\beta}_k$ の分散は以下のように表される。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{V} \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_1 \\ \widehat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \widehat{\beta}_k \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{V}(\widehat{\beta}_1) & \text{Cov}(\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_2) & \cdots & \text{Cov}(\widehat{\beta}_1, \widehat{\beta}_k) \\ \text{Cov}(\widehat{\beta}_2, \widehat{\beta}_1) & \mathbf{V}(\widehat{\beta}_2) & \cdots & \text{Cov}(\widehat{\beta}_2, \widehat{\beta}_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(\widehat{\beta}_k, \widehat{\beta}_1) & \text{Cov}(\widehat{\beta}_k, \widehat{\beta}_2) & \cdots & \mathbf{V}(\widehat{\beta}_k) \end{pmatrix} \\
 &= \sigma^2 \begin{pmatrix} \sum X_{1i}^2 & \sum X_{1i}X_{2i} & \cdots & \sum X_{1i}X_{ki} \\ \sum X_{1i}X_{2i} & \sum X_{2i}^2 & \cdots & \sum X_{2i}X_{ki} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum X_{1i}X_{ki} & \sum X_{2i}X_{ki} & \cdots & \sum X_{ki}^2 \end{pmatrix}^{-1}
 \end{aligned}$$

$\widehat{\beta}_j$ の分散 (すなわち, 上の逆行列の j 番目の対角要素) を,

$$\mathbf{V}(\widehat{\beta}_j) = \sigma_{\widehat{\beta}_j}^2,$$

として, その推定量を $s_{\widehat{\beta}_j}^2$ とする。

このとき,

$$\widehat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma_{\widehat{\beta}_j}^2),$$

となり, 標準化すると,

$$\frac{\widehat{\beta}_j - \beta_j}{\sigma_{\widehat{\beta}_j}} \sim N(0, 1),$$

が得られる。さらに,

$$\frac{(n-k)s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-k),$$

となり (証明略), しかも, $\widehat{\beta}_j$ と s^2 の独立性から (証明略),

$$\frac{\widehat{\beta}_j - \beta_j}{s_{\widehat{\beta}_j}} \sim t(n-k)$$

となる。

よって, 通常の区間推定や仮説検定を行うことができる。

決定係数について： また，決定係数 R^2 についても同様に表される。

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\widehat{Y}_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \widehat{u}_i^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}$$

ただし， $\widehat{Y}_i = \widehat{\beta}_1 X_{1i} + \widehat{\beta}_2 X_{2i} + \cdots + \widehat{\beta}_k X_{ki}$ ， $Y_i = \widehat{Y}_i + \widehat{u}_i$ である。

R^2 は，説明変数を増やすことによって，必ず大きくなる。なぜなら，説明変数が増えることによって， $\sum_{i=1}^n \widehat{u}_i^2$ が必ず減少するからである。

R^2 を基準にすると，被説明変数にとって意味のない変数でも，説明変数が多いほど，よりよいモデルということになる。この点を改善するために，自由度修正済み決定係数 \bar{R}^2 を用いる。

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \widehat{u}_i^2 / (n - k)}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 / (n - 1)},$$

$\sum_{i=1}^n \widehat{u}_i^2 / (n - k)$ は u_i の分散 σ^2 の不偏推定量であり， $\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 / (n - 1)$ は Y_i の分散の不偏推定量である。

R^2 と \bar{R}^2 との関係は、

$$\bar{R}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-k},$$

となる。さらに、

$$\frac{1 - \bar{R}^2}{1 - R^2} = \frac{n-1}{n-k} \geq 1,$$

という関係から、 $\bar{R}^2 \leq R^2$ という結果を得る。($k=1$ のときのみ、等号が成り立つ。)

数値例： 今までと同じ数値例で、 \bar{R}^2 を計算する。

i	Y_i	X_i	$X_i Y_i$	X_i^2	\widehat{Y}_i	\widehat{u}_i
1	6	10	60	100	6.8	-0.8
2	9	12	108	144	8.1	0.9
3	10	14	140	196	9.4	0.6
4	10	16	160	256	10.7	-0.7
合計	$\sum Y_i$	$\sum X_i$	$\sum X_i Y_i$	$\sum X_i^2$	$\sum \widehat{Y}_i$	$\sum \widehat{u}_i$
	35	52	468	696	35	0
平均	\bar{Y}	\bar{X}				
	8.75	13				

まず R^2 は,

$$R^2 = 1 - \frac{\sum \widehat{u}_i^2}{\sum Y_i^2 - n\bar{Y}^2} = 1 - \frac{(-0.8)^2 + 0.9^2 + 0.6^2 + (-0.7)^2}{35 - 4 \times 8.75^2} = 1 - \frac{2.30}{10.75} = 0.786$$

となり、 \bar{R}^2 は、

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{\sum \widehat{u}_i^2 / (n - k)}{(\sum Y_i^2 - n\bar{Y}^2) / (n - 1)} = 1 - \frac{2.30 / (4 - 2)}{10.75 / (4 - 1)} = 0.679$$

となる。

注意： R^2 や \bar{R}^2 を比較する場合、被説明変数が同じことが必要である。被説明変数が異なる場合 (例えば、被説明変数を上昇率とするかそのままの値を用いるかによって、被説明変数が異なる)、誤差項 u_i の標準誤差で比較すべきである (標準誤差の小さいモデルを採用する)。⇒ 関数型の選択

4 系列相関： DW について

4.1 DW について

最小自乗法の仮定の一つに、「攪乱項 u_1, u_2, \dots, u_n はそれぞれ独立に分布する」というものがあつた。ダービン・ワトソン比 (DW) とは、誤差項の系列相関、すなわち、 u_i と u_{i-1} との間の相関の有無を検定するために考案された。

⇒ 時系列データのときのみ有効

u_1, u_2, \dots, u_n の系列について、それぞれの符号が、 $+++-----++----++$ のように、プラスが連続で続いた後で、マイナスが連続で続くというような場合、 u_1, u_2, \dots, u_n は正の系列相関があると言う。また、 $+ - + - + - + - +$ のように交互にプラス、マイナスになる場合、 u_1, u_2, \dots, u_n 負の系列相関があると言う。

特徴： u_1, u_2, \dots, u_i から u_{i+1} の符号が予想できる。⇒ 「 u_1, u_2, \dots, u_n はそれぞれ独立に分布する」という仮定に反する。

すなわち、ダービン・ワトソン比とは、回帰式が

$$Y_i = \alpha + \beta X_i + u_i,$$

$$u_i = \rho u_{i-1} + \epsilon_i,$$

のときに、 $H_0: \rho = 0, H_1: \rho \neq 0$ の検定である。ただし、 $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n$ は互いに独立とする。

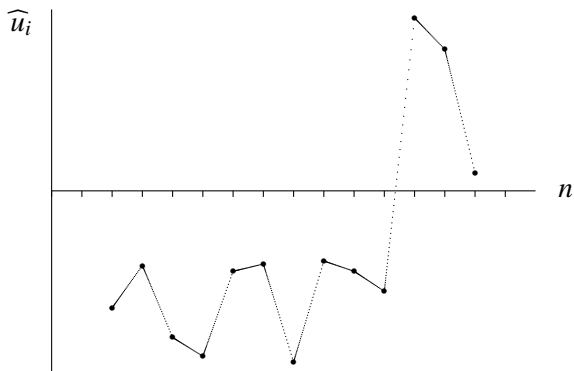


図 4： 正の系列相関

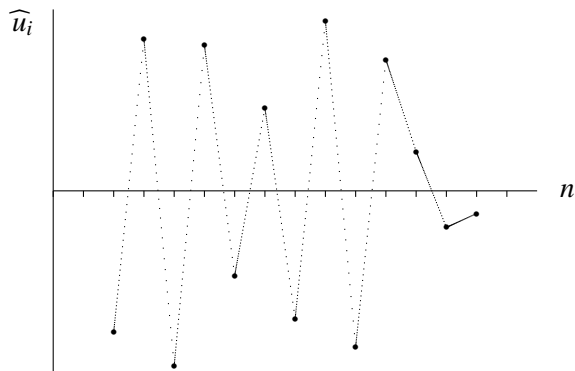


図 5： 負の系列相関