10.3　尤度比検定

n 個の確率変数 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ は互いに独立で，同じ確率分布 $f(x) \equiv f(x;\theta)$ とする。

尤度関数は，

$$l(\theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i;\theta)$$

となる。

θ の制約つき最尤推定量を $\widetilde{\theta}$，制約無し最尤推定量を $\hat{\theta}$ とする。

制約の数を G 個とする。

$\dfrac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})}$ を尤度比と呼ぶ

● **検定方法 1：　尤度比がある値より小さいときに，帰無仮説を棄却する。**

すなわち，

$$\frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} < c$$

となるときに，帰無仮説を棄却する。

この場合，有意水準（帰無仮説が正しいときに，帰無仮説を棄却する確率）α を与えたもとで，

$$P\Big(\frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} < c\Big) = \alpha$$

となるような c を求めることになる。

具体的な c の求め方は，具体例とともに後述する。

● 検定方法 2（大標本検定）：　またはは，$n \longrightarrow \infty$ のとき，

$$-2\log\frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} = -2(\log l(\widetilde{\theta}) - \log l(\hat{\theta})) \longrightarrow \chi^2(G)$$

となる。 $\Longrightarrow$ この方法が簡単で使いやすい。

$\log l(\widetilde{\theta})$ や $\log l(\hat{\theta})$ は計量ソフトの出力結果から得られる（具体例は後述）。

大標本 = n が大きい

このよな尤度比を用いた検定を尤度比検定と呼ぶ。

● **検定方法 1 と検定方法 2 との関係：　検定方法 1 から，**

$$\frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} < c$$

を書き換えて，

$$\log \frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} < \log c$$

となり，さらに，

$$-2 \log \frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} > -2 \log c$$

となるので，有意水準 α **を与えたもとで，**$-2 \log c \approx \chi^2_\alpha(G)$ **と近似していることになる。**

ただし，$\chi^2_\alpha(G)$ は，自由度 G のカイ二乗分布の $100\times\alpha$ % 点の値を表し，カイ二乗分布表から得られる。

例 1：　正規母集団 $N(\mu,\sigma^2)$ からの標本値 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ を用いて，σ^2 が既知のとき，帰無仮説 H_0：$\mu=\mu_0$，対立仮説 H_1：$\mu\neq\mu_0$ の尤度比検定を行う。

σ^2 が既知のとき，尤度関数 $l(\mu)$ は，

$$l(\mu)=\prod_{i=1}^{n} f(x_i;\mu)=\prod_{i=1}^{n}(2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{2}}\exp\Bigl(-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu)^2\Bigr)=(2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}}\exp\Bigl(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2\Bigr)$$

となる。

$l(\mu)$ を最大にする μ と $\log l(\mu)$ を最大にする μ は同じになる。

σ^2 が既知のとき，対数尤度関数 $\log l(\mu)$ は，

$$\log l(\mu) = -\frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu)^2$$

となる。

$$\frac{\mathbf{d}\log l(\mu)}{\mathbf{d}\mu} = 0$$

を μ について解いて，μ の最尤推定量は，

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \equiv \overline{X}$$

となる。

● **検定方法 1：** $H_0: \mu = \mu_0$ **の制約付きの尤度関数は** $l(\mu_0)$**，** μ **を推定した制約なしの尤度関数は** $l(\overline{X})$ **となる。**

尤度比検定統計量は，

$$\frac{l(\mu_0)}{l(\overline{X})} = \frac{(2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Bigl(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu_0)^2\Bigr)}{(2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Bigl(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2\Bigr)} = \exp\Bigl(-\frac{1}{2}\frac{(\overline{X}-\mu_0)^2}{\sigma^2/n}\Bigr) < c$$

となる c **を求める。**

2 つ目の等式は，

$$
\begin{aligned}
&\frac{\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu_0)^2\right)}{\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2\right)} \\
&\quad = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu_0)^2+\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2\right) \\
&\quad = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu_0)^2-\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2)\right) \\
&\quad = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}((\sum_{i=1}^{n}X_i^2-2\mu_0\sum_{i=1}^{n}X_i+n\mu_0^2)-(\sum_{i=1}^{n}X_i^2-2\overline{X}\sum_{i=1}^{n}X_i+n\overline{X}^2))\right) \\
&\quad = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}n(\overline{X}^2-2\mu_0\overline{X}+\mu_0^2)\right) = \exp\left(-\frac{(\overline{X}-\mu_0)^2}{2\sigma^2/n}\right)
\end{aligned}
$$

と計算される。

H_0 が正しいときに，$\dfrac{\overline{X}-\mu_0}{\sigma/\sqrt{n}} \sim N(0,1)$ となるので，

$$P\Big(\Big|\frac{\overline{X}-\mu_0}{\sigma/\sqrt{n}}\Big| > z_{\alpha/2}\Big) = \alpha$$

となる。

$z_{\alpha/2}$ は標準正規分布の上から $100 \times \alpha/2$ % 点の値を表す。

$\alpha = 0.05$ のとき $z_{0.025} = 1.9600$，$\alpha = 0.01$ のとき $z_{0.005} = 2.5758$ となる。

書き換えると，

$$P\bigg(\Big(\frac{\overline{X}-\mu_0}{\sigma/\sqrt{n}}\Big)^2 > z_{\alpha/2}^2\bigg) = \alpha$$

となり，さらに，

$$P\left(-\frac{1}{2}\frac{(\overline{X}-\mu_0)^2}{\sigma^2/n} < -\frac{1}{2}z_{\alpha/2}^2\right) = \alpha$$

となり，

$$P\left(\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(\overline{X}-\mu_0)^2}{\sigma^2/n}\right) < \exp\left(-\frac{1}{2}z_{\alpha/2}^2\right)\right) = \alpha$$

と変形できる。

　したがって，

$$c = \exp\left(-\frac{1}{2}z_{\alpha/2}^2\right)$$

とすればよい。

$\alpha = 0.05$ **のとき，**$z_{0.025} = 1.9600$ **なので** $c = 0.14649$

$\alpha = 0.01$ **のとき，**$z_{0.005} = 2.5758$ **なので** $c = 0.03625$

この方法は，検定の度に c **を計算しなければならず面倒 !!**

データ数 n **が多い時には次の方法が有効**

● 検定方法 2：　尤度比検定統計量は，

$$-2\log\frac{l(\mu_0)}{l(\overline{X})} = \frac{(\overline{X}-\mu_0)^2}{\sigma^2/n} \longrightarrow \chi^2(G)$$

制約の数は $H_0:\ \mu = \mu_0$ **の 1 つで，**$G = 1$ **となる。**

この場合は，正確に，$\dfrac{(\overline{X}-\mu_0)^2}{\sigma^2/n} \sim \chi^2(1)$ **となる。**

$\chi^2(1)$ **分布の上側 100** $\alpha\%$ **点を** $\chi^2_\alpha(1)$ **とするとき，確率変数** $\overline{X}$ **をその実績値** $\overline{x}$ **で置き換えて，**

$$\frac{(\overline{x}-\mu_0)^2}{\sigma^2/n} > \chi^2_\alpha(1)$$

のとき，有意水準 α **で** $H_0:\ \mu=\mu_0$ **を棄却する。**

$\alpha=0.05$ **のとき** $\chi^2_{0.05}(1)=3.84$**，**$\alpha=0.01$ **のとき** $\chi^2_{0.01}(1)=6.63$ **である。**

(*) 標準正規分布の二乗＝自由度 1 のカイ二乗分布

$\chi^2_{0.05}(1)=1.9600^2=3.8416$**，**$\chi^2_{0.01}(1)=2.5758^2=6.6347$

例 2： $X_1, X_n, \cdots, X_n$ **は互いに独立で，それぞれパラメータ** p **を持ったベルヌイ分布に従うものとする。すなわち，**X_i **の確率関数は，**

$$f(x;p) = p^x(1-p)^{1-x} \qquad x = 0, 1$$

となる。

このとき尤度関数は，

$$l(p) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i;p) = \prod_{i=1}^{n} p^{x_i}(1-p)^{1-x_i}$$

となる。

p の最尤推定値 $\hat{p}$ は，

$$\hat{p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

である。

データ x_1，x_2，$\cdots$，x_n をその確率変数 X_1，X_2，$\cdots$，X_n で置き換えて，p の最尤推定量 $\hat{p}$ は，

$$\hat{p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

となる。

次の仮説検定を考える。

$$H_0 : \ p = p_0 \qquad\qquad H_1 : \ p \neq p_0$$

→ 制約数は 1 つ。$(G = 1)$

尤度比は，

$$\frac{l(p_0)}{l(\hat{p})} = \frac{\prod_{i=1}^n p_0^{X_i}(1 - p_0)^{1-X_i}}{\prod_{i=1}^n \hat{p}^{X_i}(1 - \hat{p})^{1-X_i}}$$

したがって，$n \longrightarrow \infty$ のとき，

$$-2\log\frac{l(p_0)}{l(\hat{p})} = -2\log\frac{p_0}{\hat{p}} \times \sum_{i=1}^n X_i - 2\log\frac{1-p_0}{1-\hat{p}} \times \sum_{i=1}^n (1 - X_i) \longrightarrow \chi^2(1)$$

$\chi^2(1)$ 分布の上側 100 α% 点を $\chi^2_\alpha(1)$ とするとき，

$$-2\log\frac{l(p_0)}{l(\hat{p})} > \chi^2_\alpha(1)$$

のとき，帰無仮説 H_0： $p = p_0$ を棄却する。

例 3：　回帰モデル

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

$$u_i \sim N(0, \sigma^2) \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

について，β_1，β_2，$\cdots$，β_k に関する仮説の尤度比検定を行う。

例えば，

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 + \beta_2 = 1$$

$$H_0: \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = 0$$

などのような仮説検定

$$\theta = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \\ \sigma^2 \end{pmatrix}$$ とする。

尤度関数は，

$$
\begin{aligned}
l(\theta) &= \prod_{i=1}^{n} f(Y_i;\theta) \\
&= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \beta_1 X_{1i} - \cdots - \beta_k X_{ki})^2\Big)
\end{aligned}
$$

となる。

H_0 の制約つき最尤推定量を $\widetilde{\theta} = (\widetilde{\beta}_1, \cdots, \widetilde{\beta}_k, \widetilde{\sigma}^2)$ とする。この仮設に含まれる制約数を G とする。

制約なし最尤推定量を $\hat{\theta} = (\hat{\beta}_1, \cdots, \hat{\beta}_k, \hat{\sigma}^2)$ とする。

尤度比

$$\frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} = \frac{(2\pi\widetilde{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Bigl(-\frac{1}{2\widetilde{\sigma}^2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \widetilde{\beta}_1 X_{1i} - \cdots - \widetilde{\beta}_k X_{ki})^2\Bigr)}{(2\pi\hat{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Bigl(-\frac{1}{2\hat{\sigma}^2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i} - \cdots - \hat{\beta}_k X_{ki})^2\Bigr)}$$

$$= \frac{(\widetilde{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Bigl(-\frac{n}{2}\Bigr)}{(\hat{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\Bigl(-\frac{n}{2}\Bigr)} = \left(\frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widetilde{u}_i^2}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2}\right)^{-n/2} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{n}\widetilde{u}_i^2}{\sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2}\right)^{-n/2} = \left(1 + \frac{\sum_{i=1}^{n}\widetilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2}{\sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2}\right)^{-n/2}$$

$$= \left(1 + \frac{G}{n-k} \times \frac{(\sum_{i=1}^{n}\widetilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2)/G}{\sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2/(n-k)}\right)^{-n/2} < c$$

のとき仮説を棄却する。

$$\frac{(\sum_{i=1}^{n}\widetilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2)/G}{\sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2/(n-k)} \sim F(G, n-k)$$

を利用すると c が求まる。

自由度 $(G, n-k)$ の F 分布の上から $100 \times \alpha$ % 点の値を $F_\alpha(G, n-k)$ とする。

$$\frac{(\sum_{i=1}^n \widetilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2)/G}{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2/(n-k)} > F_\alpha(G, n-k)$$

のとき仮説を棄却する。以下のように書き換える。

$$1 + \frac{G}{n-k} \times \frac{(\sum_{i=1}^n \widetilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2)/G}{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2/(n-k)} > 1 + \frac{G}{n-k} \times F_\alpha(G, n-k)$$

$$\left(1 + \frac{G}{n-k} \times \frac{(\sum_{i=1}^n \widetilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2)/G}{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2/(n-k)}\right)^{-n/2} < \left(1 + \frac{G}{n-k} \times F_\alpha(G, n-k)\right)^{-n/2}$$

となるので，$c = \left(1 + \dfrac{G}{n-k} \times F_\alpha(G, n-k)\right)^{-n/2}$ となる。

ただし，途中で以下を利用

$$\widetilde{\sigma}^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \widetilde{\beta}_1 X_{1i} - \cdots - \widetilde{\beta}_k X_{ki})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widetilde{u}_i^2$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i} - \cdots - \hat{\beta}_k X_{ki})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{u}_i^2$$

$\widetilde{\sigma}^2$ は σ^2 の制約付き最尤推定量，$\hat{\sigma}^2$ は σ^2 の制約なし最尤推定量である。

近似的には，

$$-2\log\frac{l(\widetilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} = -2\log\frac{(\widetilde{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}}\exp\Bigl(-\dfrac{n}{2}\Bigr)}{(\hat{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}}\exp\Bigl(-\dfrac{n}{2}\Bigr)} = n\log\Bigl(\frac{\widetilde{\sigma}^2}{\hat{\sigma}^2}\Bigr) \longrightarrow \chi^2(G)$$

となる。