誤差項 (または，攪乱項) の仮定より，

$$\mathrm{V}(u_i) = \sigma^2,$$

を用いる。

最後の行は，$\omega_i = \dfrac{X_i - \overline{X}}{\sum_{j=1}^n (X_j - \overline{X})^2}$ に注意して，

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n \omega_i^2 &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - \overline{X}}{\sum_{j=1}^n (X_j - \overline{X})^2}\right)^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(X_i - \overline{X})^2}{\left(\sum_{j=1}^n (X_j - \overline{X})^2\right)^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}{\left(\sum_{j=1}^n (X_j - \overline{X})^2\right)^2}\\ &= \frac{1}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}\end{aligned}$$

を用いる。$\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2 = \sum_{j=1}^n (X_j - \overline{X})^2$ に注意。

よって，$\hat{\beta}$ の平均は β，分散は $\dfrac{\sigma^2}{\sum (X_i - \overline{X})^2}$ となることが示された。

$\hat{\alpha}$ の分散について，$\hat{\alpha} = \alpha - (\hat{\beta} - \beta)\overline{X} + \overline{u}$ を利用すると，

$$\mathrm{V}(\hat{\alpha}) = \mathrm{E}(\hat{\alpha} - \alpha)^2 = \mathrm{E}(-(\hat{\beta} - \beta)\overline{X} + \overline{u})^2$$

$$
\begin{aligned}
&= \overline{X}^2 \mathrm{E}(\hat{\beta} - \beta)^2 - 2\overline{X}\mathrm{E}((\hat{\beta} - \beta)\overline{u}) + \mathrm{E}(\overline{u}^2) \\
&= \sigma^2 \left(\frac{\overline{X}^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} + \frac{1}{n} \right) = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^n X_i^2}{n \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}
\end{aligned}
$$

途中で，以下の計算が使われる。

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}((\hat{\beta} - \beta)\overline{u}) &= \mathrm{E}\left(\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})u_i}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i \right) \\
&= \frac{1}{n \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} \mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})u_i \sum_{j=1}^n u_j \right) \\
&= \frac{1}{n \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (X_i - \overline{X}) \mathrm{E}(u_i u_j) \\
&= \frac{1}{n \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} \sigma^2 \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}) = 0
\end{aligned}
$$

$\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X}) = 0$ であることに注意。

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}(\overline{u}^2) &= \mathrm{E}(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n u_i)^2 = \frac{1}{n^2}\mathrm{E}(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i u_j) = \frac{1}{n^2}\mathrm{E}(\sum_{i=1}^n u_i^2) \\
&= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^n \mathrm{E}(u_i^2) = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^n \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{n}
\end{aligned}
$$

よって，$\hat{\alpha}$ の平均は α，分散は $\dfrac{\sigma^2 \sum_{i=1}^n X_i^2}{n\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}$ となることが示された。

$\hat{\alpha}$ と $\hat{\beta}$ の共分散について，$\hat{\alpha} = \alpha - (\hat{\beta} - \beta)\overline{X} + \overline{u}$ を利用すると，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) &= \mathrm{E}((\hat{\alpha} - \alpha)(\hat{\beta} - \beta)) = \mathrm{E}((-(\hat{\beta} - \beta)\overline{X} + \overline{u})(\hat{\beta} - \beta)) \\
&= -\mathrm{E}((\hat{\beta} - \beta)^2)\overline{X} + \mathrm{E}(\overline{u}(\hat{\beta} - \beta)) = -\mathrm{E}((\hat{\beta} - \beta)^2)\overline{X} \\
&= -\frac{\sigma^2 \overline{X}}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}
\end{aligned}
$$

となる。

数値例：

i	X_i	Y_i	X_i^2	X_iY_i
1	5	4	25	20
2	1	1	1	1
3	3	1	9	3
4	2	3	4	6
5	4	4	16	16
合計	$\sum X_i$ 15	$\sum Y_i$ 13	$\sum X_i^2$ 55	$\sum X_iY_i$ 46
平均	$\overline{X}$ 3	$\overline{Y}$ 2.6		

$$\mathrm{V}(\hat{\beta}) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2} = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n} X_i^2 - n\overline{X}^2} = \frac{\sigma^2}{55 - 5 \times 3^2} = \frac{\sigma^2}{10} = 0.1\sigma^2$$

$$\mathrm{V}(\hat{\alpha}) = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^{n} X_i^2}{n \sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2} = \frac{\sigma^2 55}{5(55 - 5 \times 3^2)} = \frac{55\sigma^2}{50} = 1.1\sigma^2$$

$$\mathrm{Cov}(\hat{\alpha},\hat{\beta}) = -\frac{\sigma^2\overline{X}}{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\overline{X})^2} = -\frac{\sigma^2\overline{X}}{\sum_{i=1}^{n}X_i^2-n\overline{X}^2} = -\frac{3\sigma^2}{55-5\times 3^2} = -0.3\sigma^2$$

注意： 最小二乗法を復習すると，まず，次のような関数 $S(\alpha,\beta)$ を定義する。

$$S(\alpha,\beta) = \sum_{i=1}^{n} u_i^2 = \sum_{i=1}^{n}(Y_i-\alpha-\beta X_i)^2$$

$S(\alpha,\beta)$ の最小化によって,

$$\frac{\partial S(\alpha,\beta)}{\partial\alpha} = 0, \qquad \frac{\partial S(\alpha,\beta)}{\partial\beta} = 0$$

を満たす α,β が $\hat{\alpha},\hat{\beta}$ となる。

すなわち，$\hat{\alpha},\hat{\beta}$ は,

$$\sum_{i=1}^{n}(Y_i-\hat{\alpha}-\hat{\beta}X_i) = 0, \qquad \sum_{i=1}^{n}X_i(Y_i-\hat{\alpha}-\hat{\beta}X_i) = 0$$

を満たす。

さらに,

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i = n\hat{\alpha} + \hat{\beta}\sum_{i=1}^{n} X_i, \qquad \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i = \hat{\alpha}\sum_{i=1}^{n} X_i + \hat{\beta}\sum_{i=1}^{n} X_i^2$$

行列表示によって,

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} X_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} X_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix},$$

$\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ について，まとめて,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} X_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} X_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{n\sum_{i=1}^{n} X_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} X_i)^2} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_i^2 & -\sum_{i=1}^{n} X_i \\ -\sum_{i=1}^{n} X_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i \end{pmatrix} \end{aligned}$$

逆行列の部分と分散，共分散とは以下のような関係がある。

$$\begin{pmatrix} \mathrm{V}(\hat{\alpha}) & \mathrm{Cov}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) \\ \mathrm{Cov}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}) & \mathrm{V}(\hat{\beta}) \end{pmatrix} = \sigma^2 \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} X_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_i & \sum_{i=1}^{n} X_i^2 \end{pmatrix}^{-1}$$

$$
= \frac{\sigma^2}{n\sum_{i=1}^n X_i^2 - (\sum_{i=1}^n X_i)^2} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n X_i^2 & -\sum_{i=1}^n X_i \\ -\sum_{i=1}^n X_i & n \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} \dfrac{\sigma^2 \sum_{i=1}^n X_i^2}{n\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} & -\dfrac{\sigma^2 \overline{X}}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} \\ -\dfrac{\sigma^2 \overline{X}}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} & \dfrac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} \end{pmatrix}
$$

$\hat{\alpha}$，$\hat{\beta}$ の分布 (σ^2 が既知の場合)

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

2. $\mathrm{E}(\hat{\beta}) = \beta$

3. $\mathrm{V}(\hat{\beta}) = \dfrac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}$

よって，

$$
\hat{\beta} \sim N\left(\beta, \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}\right),
$$

となる。

1. $\hat{\alpha} = \alpha - (\hat{\beta} - \beta)\overline{X} + \overline{u}$

2. $\mathrm{E}(\hat{\alpha}) = \alpha$

3. $\mathrm{V}(\hat{\alpha}) = \dfrac{\sigma^2 \sum_{i=1}^n X_i^2}{n \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} = \sigma^2 \left(\dfrac{\overline{X}^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2} + \dfrac{1}{n} \right)$

よって，

$$\hat{\alpha} \sim N\left(\alpha, \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^n X_i^2}{n \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2}\right),$$

となる。

$\hat{\alpha}$，$\hat{\beta}$ の性質：最良線型不偏性と一致性

不偏性：　既に証明したとおり，$\mathrm{E}(\hat{\beta}) = \beta$，$\mathrm{E}(\hat{\alpha}) = \alpha$ なので，$\hat{\alpha}$，$\hat{\beta}$ は β，α の不偏推定量である。

最良線型不偏性：　$\hat{\beta}$ を変形すると以下の通りとなる。

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})Y_i}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2} = \sum_{i=1}^{n}\omega_i Y_i$$

ただし，$\omega_i = \dfrac{(X_i - \overline{X})}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2}$ とする。このように，$\hat{\beta}$ は線型不偏推定量であると言える。

別の線型不偏推定量を次のように考える。

$$\widetilde{\beta} = \sum_{i=1}^{n} c_i Y_i$$

ただし，$c_i = \omega_i + d_i$ とする。$\widetilde{\beta}$ もまた β の不偏推定量と仮定したので,

$$\begin{aligned}\widetilde{\beta} &= \sum_{i=1}^{n} c_i Y_i = \sum_{i=1}^{n}(\omega_i + d_i)(\alpha + \beta X_i + u_i) \\ &= \alpha\sum_{i=1}^{n}\omega_i + \beta\sum_{i=1}^{n}\omega_i X_i + \sum_{i=1}^{n}\omega_i u_i + \alpha\sum_{i=1}^{n} d_i + \beta\sum_{i=1}^{n} d_i X_i + \sum_{i=1}^{n} d_i u_i\end{aligned}$$

$$= \beta + \alpha \sum_{i=1}^{n} d_i + \beta \sum_{i=1}^{n} d_i X_i + \sum_{i=1}^{n} \omega_i u_i + \sum_{i=1}^{n} d_i u_i$$

と変形される。$\sum_{i=1}^{n} \omega_i = 0$，$\sum_{i=1}^{n} \omega_i X_i = 1$ に注意。

よって，期待値をとると，

$$\mathrm{E}(\widetilde{\beta}) = \beta + \alpha \sum_{i=1}^{n} d_i + \beta \sum_{i=1}^{n} d_i X_i + \sum_{i=1}^{n} \omega_i \mathrm{E}(u_i) + \sum_{i=1}^{n} d_i \mathrm{E}(u_i)$$

$$= \beta + \alpha \sum_{i=1}^{n} d_i + \beta \sum_{i=1}^{n} d_i X_i$$

となる。$\widetilde{\beta}$ が不偏であるためには,

$$\sum_{i=1}^{n} d_i = 0, \qquad \sum_{i=1}^{n} d_i X_i = 0,$$

の条件が必要となる。

この2つの条件が成り立っていると仮定すると,

$$\widetilde{\beta} = \beta + \sum_{i=1}^{n} (\omega_i + d_i) u_i$$

を利用して,

$$\mathrm{V}(\widetilde{\beta}) = \mathrm{E}(\widetilde{\beta} - \beta)^2 = \mathrm{E}(\sum_{i=1}^{n}(\omega_i + d_i)u_i)^2 = \sum_{i=1}^{n}(\omega_i + d_i)^2 \mathrm{E}(u_i^2)$$

$$= \sigma^2 \left(\sum_{i=1}^{n} \omega_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{n} \omega_i d_i + \sum_{i=1}^{n} d_i^2 \right) = \sigma^2 \left(\sum_{i=1}^{n} \omega_i^2 + \sum_{i=1}^{n} d_i^2 \right)$$

$\widetilde{\beta}$ の不偏性の条件 $\sum_{i=1}^{n} d_i = 0$, $\sum_{i=1}^{n} d_i X_i = 0$ を利用すると,

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i d_i = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})d_i}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i d_i - \overline{X}\sum_{i=1}^{n} d_i}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2} = 0$$

を得る。

まとめると, $\widetilde{\beta}$ の分散は,

$$\mathrm{V}(\widetilde{\beta}) = \sigma^2 \left(\sum_{i=1}^{n} \omega_i^2 + \sum_{i=1}^{n} d_i^2 \right)$$

となる。$\hat{\beta}$ の分散は,

$$\mathrm{V}(\hat{\beta}) = \sigma^2 \sum_{i=1}^{n} \omega_i^2$$

なので,

$$\mathrm{V}(\widetilde{\beta}) \geq \mathrm{V}(\hat{\beta})$$

となる。等号が成り立つときは，$\sum_{i=1}^{n} d_i^2 = 0$，すなわち，$d_1 = d_2 = \cdots = d_n = 0$ のときとなり，これは $\hat{\beta}$ に一致する。

よって，$\hat{\beta}$ は最小分散線型不偏推定量，または，最良線型不偏推定量であると言える。

$\Longrightarrow$ ガウス=マルコフの定理

$\hat{\alpha}$ についても，同様で，α の最小分散線型不偏推定量となる。

証明は,

$$\hat{\alpha} - \alpha = -(\hat{\beta} - \beta)\overline{X} + \overline{u}$$

を利用すればよい。

推定量の関係 $\Longrightarrow$

最小分散 (最良) 線型不偏推定量 $\subset$ 線型不偏推定量 $\subset$ 線型推定量 $\subset$ 全推定量

一致性： $\mathrm{E}(\hat{\beta}) = \beta$ となることが分かった。

n が大きくなると，$\hat{\beta}$ は β に近づくかどうかを調べる。

$$\mathrm{V}(\hat{\beta}) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2}$$

$n \longrightarrow \infty$ のとき，$\mathrm{V}(\hat{\beta}) \longrightarrow 0$ となれば，$\hat{\beta}$ は β の一致推定量となる。

最小二乗法の仮定の一つに,「$n \longrightarrow \infty$ のとき，$\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2 \longrightarrow \infty$」というものがあった。この仮定は,「$n \longrightarrow \infty$ のとき，$\mathrm{V}(\hat{\beta}) \longrightarrow 0$」を保証する。よって，$\hat{\beta}$ は β の一致推定量である。

$\hat{\alpha}$ についても，同様に，$\mathrm{E}(\hat{\alpha}) = \alpha$ であることは分かっている。

$$\mathrm{V}(\hat{\alpha}) = \sigma^2\left(\frac{1}{n} + \frac{\overline{X}^2}{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2}\right)$$

となり,「$n \longrightarrow \infty$ のとき，$\mathrm{V}(\hat{\alpha}) \longrightarrow 0$」となるので，$\hat{\alpha}$ も α の一致推定量であると言える。

6.3.4　誤差項 (または，攪乱項) u_i の分散 σ^2 について

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

誤差項 (または，攪乱項) の仮定：$u_i \sim N(0, \sigma^2)$

$$Y_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta} X_i + \hat{u}_i,$$

u_i の分散 σ^2 の不偏推定量：

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i^2}{自由度}$$

$$\begin{aligned} 自由度 &= 標本数\,(n) - 推定すべき係数値の数\,(2) \\ &= n - 2 \end{aligned}$$

誤差項 (または，攪乱項) の母分散 σ^2 の不偏推定量 s^2 は，

$$s^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i^2, = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta} X_i)^2,$$

によって与えられる。