

and $\left(\frac{1}{n} \frac{\partial^2 \log L(\theta; X)}{\partial \theta \partial \theta'}\right)^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial \log L(\theta; X)}{\partial \theta}\right)$ has the same asymptotic distribution as $\Sigma^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial \log L(\theta; X)}{\partial \theta}\right)$.

11. Optimization (最適化):

MLE of θ results in the following maximization problem:

$$\max_{\theta} \log L(\theta; x).$$

We often have the case where the solution of θ is not derived in closed form.

\implies Optimization procedure

$$0 = \frac{\partial \log L(\theta; x)}{\partial \theta} = \frac{\partial \log L(\theta^*; x)}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 \log L(\theta^*; x)}{\partial \theta \partial \theta'} (\theta - \theta^*).$$

Solving the above equation with respect to θ , we obtain the following:

$$\theta = \theta^* - \left(\frac{\partial^2 \log L(\theta^*; x)}{\partial \theta \partial \theta'} \right)^{-1} \frac{\partial \log L(\theta^*; x)}{\partial \theta}.$$

Replace the variables as follows:

$$\theta \rightarrow \theta^{(i+1)}, \quad \theta^* \rightarrow \theta^{(i)}.$$

Then, we have:

$$\theta^{(i+1)} = \theta^{(i)} - \left(\frac{\partial^2 \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta \partial \theta'} \right)^{-1} \frac{\partial \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta}.$$

⇒ **Newton-Raphson method** (ニュートン・ラプソン法)

Replacing $\frac{\partial^2 \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta \partial \theta'}$ by $E\left(\frac{\partial^2 \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta \partial \theta'}\right)$, we obtain the following optimization algorithm:

$$\begin{aligned}\theta^{(i+1)} &= \theta^{(i)} - \left(E\left(\frac{\partial^2 \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta \partial \theta'}\right) \right)^{-1} \frac{\partial \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta} \\ &= \theta^{(i)} + \left(I(\theta^{(i)}) \right)^{-1} \frac{\partial \log L(\theta^{(i)}; x)}{\partial \theta}\end{aligned}$$

⇒ **Method of Scoring** (スコア法)

3 変数変換

確率変数 X の密度関数を $f(x)$, 分布関数を $F(x) \equiv P(X < x)$ とする。 $Y = aX + b$ とするとき , Y の密度関数 $g(y)$ を求める。

Y の分布関数を $G(y)$ として , 次のように変形できる。

$$\begin{aligned} G(y) &= P(Y < y) = P(aX + b < y) \\ &= \begin{cases} P\left(X < \frac{y-b}{a}\right), & a > 0 \text{ のとき} \\ P\left(X > \frac{y-b}{a}\right), & a < 0 \text{ のとき} \end{cases} \\ &= \begin{cases} P\left(X < \frac{y-b}{a}\right), & a > 0 \text{ のとき} \\ 1 - P\left(X < \frac{y-b}{a}\right), & a < 0 \text{ のとき} \end{cases} \\ &= \begin{cases} F\left(\frac{y-b}{a}\right), & a > 0 \text{ のとき} \\ 1 - F\left(\frac{y-b}{a}\right), & a < 0 \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned}$$

分布関数と密度関数との関係は、

$$\frac{dF(x)}{dx} = f(x) \quad \frac{dG(x)}{dx} = g(x)$$

であるので、 Y の密度関数は、

$$g(y) = \frac{dG(y)}{dy} = \begin{cases} \frac{1}{a}f\left(\frac{y-b}{a}\right), & a > 0 \text{ のとき} \\ -\frac{1}{a}f\left(\frac{y-b}{a}\right), & a < 0 \text{ のとき} \end{cases}$$
$$= \left| \frac{1}{a} \right| f\left(\frac{y-b}{a}\right)$$

と表される。

一般に、確率変数 X の密度関数を $f(x)$ とする。単調変換 $X = h(Y)$ とするとき、 Y の密度関数 $g(y)$ は、

$$g(y) = |h'(y)|f(h(y))$$

となる。

4 回帰分析への応用

回帰モデル

$$Y_i = \alpha + \beta X_i + u_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

u_1, u_2, \dots, u_n は互いに独立で、すべての i について $u_i \sim N(0, \sigma^2)$ を仮定する。

u_i の密度関数は、

$$f(u_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}u_i^2\right)$$

となる。

Y_i の密度関数 $g(Y_i)$ は、

$$g(Y_i) = |h'(Y_i)|f(h(Y_i))$$

によって求められる。

この場合、 $h(Y_i) = Y_i - \alpha - \beta X_i$ なので、 $h'(Y_i) = 1$ となる。

したがって， Y_i の密度関数は，

$$\begin{aligned}g(Y_i) &= |h'(Y_i)| f(h(Y_i)) = f(h(Y_i)) \\&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(Y_i - \alpha - \beta X_i)^2\right)\end{aligned}$$

となる。

u_1, u_2, \dots, u_n は互いに独立であれば， Y_1, Y_2, \dots, Y_n も互いに独立になるので， Y_1, Y_2, \dots, Y_n の結合密度関数は，

$$g(Y_1, Y_2, \dots, Y_n) = \prod_{i=1}^n g(Y_i) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2\right)$$

となる。これは α, β, σ^2 の関数となっている。

よって，尤度関数は，

$$l(\alpha, \beta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2\right)$$

となる。

対数尤度関数は、

$$\log l(\alpha, \beta, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2$$

となる。

$\log l(\alpha, \beta, \sigma^2)$ を最大にするために、

$$\frac{\partial \log l(\alpha, \beta, \sigma^2)}{\partial \alpha} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta X_i) = 0$$

$$\frac{\partial \log l(\alpha, \beta, \sigma^2)}{\partial \beta} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n X_i (Y_i - \alpha - \beta X_i) = 0$$

$$\frac{\partial \log l(\alpha, \beta, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2} \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2 = 0$$

の連立方程式を解く。

上 2 つの式は σ^2 に依存していない。 α, β の最尤推定量は最小二乗推定量と同じになる。

すなわち，

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

σ^2 の最尤推定量は，

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

となり， s^2 とは異なる。

$\hat{\theta} = (\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\sigma}^2)'$, $\theta = (\alpha, \beta, \sigma^2)'$ とする。 n が大きいとき ,

$$\hat{\theta} \sim N(\theta, \Sigma_{\theta})$$

ただし ,

$$\Sigma_{\theta} = \left(\sum_{i=1}^n E \left[\left(\frac{\partial \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta} \right) \left(\frac{\partial \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta} \right)' \right] \right)^{-1} = - \left(\sum_{i=1}^n E \left[\frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta \partial \theta'} \right] \right)^{-1}$$

Y_i の密度関数 $g(Y_i; \theta)$ の対数は ,

$$\log g(Y_i; \theta) = -\frac{1}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2$$

となる。一階微分は ,

$$\frac{\partial \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \log g(Y_i; \theta)}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial \log g(Y_i; \theta)}{\partial \beta} \\ \frac{\partial \log g(Y_i; \theta)}{\partial \sigma^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma^2} (Y_i - \alpha - \beta X_i) \\ \frac{1}{\sigma^2} X_i (Y_i - \alpha - \beta X_i) \\ -\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2 \end{pmatrix}$$

となる。二階微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta \partial \theta'} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \alpha^2} & \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \alpha \partial \beta} & \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \alpha \partial \sigma^2} \\ \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \beta \partial \alpha} & \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \beta^2} & \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \beta \partial \sigma^2} \\ \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \sigma^2 \partial \alpha} & \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \sigma^2 \partial \beta} & \frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial (\sigma^2)^2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma^2} & -\frac{X_i}{\sigma^2} & -\frac{u_i}{\sigma^4} \\ -\frac{X_i}{\sigma^2} & -\frac{X_i^2}{\sigma^2} & -\frac{X_i u_i}{\sigma^4} \\ -\frac{u_i}{\sigma^4} & -\frac{X_i u_i}{\sigma^4} & \frac{1}{2\sigma^4} - \frac{u_i^2}{\sigma^6} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ただし、 $u_i = Y_i - \alpha - \beta X_i$

期待値をとると、

$$E\left(\frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta \partial \theta'}\right) = E\left(\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma^2} & -\frac{X_i}{\sigma^2} & -\frac{u_i}{\sigma^4} \\ -\frac{X_i}{\sigma^2} & -\frac{X_i^2}{\sigma^2} & -\frac{X_i u_i}{\sigma^4} \\ -\frac{u_i}{\sigma^4} & -\frac{X_i u_i}{\sigma^4} & \frac{1}{2\sigma^4} - \frac{u_i^2}{\sigma^6} \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma^2} & -\frac{X_i}{\sigma^2} & 0 \\ -\frac{X_i}{\sigma^2} & -\frac{X_i^2}{\sigma^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\sigma^4} \end{pmatrix}$$

となる。

したがって，

$$\Sigma_{\theta} = - \left(\sum_{i=1}^n E \left[\frac{\partial^2 \log g(Y_i; \theta)}{\partial \theta \partial \theta'} \right] \right)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{n}{\sigma^2} & \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{\sigma^2} & 0 \\ \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{\sigma^2} & \frac{\sum_{i=1}^n X_i^2}{\sigma^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{n}{2\sigma^4} \end{pmatrix}^{-1}$$
$$= \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i & 0 \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 & 2\sigma^4 \\ 0 & n & n \end{pmatrix}$$

したがって，

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} \sim N \left(\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \sigma^2 \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \right)$$

となる。

→ 最小二乗推定量の分布と同じ。

5 尤度比検定

n 個の確率変数 X_1, X_2, \dots, 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 $\tilde{\theta}$ ，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。

$\frac{l(\tilde{\theta})}{l(\hat{\theta})}$ 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，

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

となるときに，帰無仮説を棄却する。この場合， c を次のようにして求める必要がある。

$$\int \cdots \int \prod_{i=1}^n f(x_i; \tilde{\theta}) dx_1 \cdots dx_n = \alpha$$

ただし， α は有意水準（帰無仮説が正しいときに，帰無仮説を棄却する確率）を表す。

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

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

となる。

この検定を尤度比検定と呼ぶ。

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

σ^2 が既知のとき，尤度関数 $l(\mu)$ は，

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

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。

μ の最尤推定量は，

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

となる。

尤度比検定統計量は，

$$\frac{l(\mu_0)}{l(\bar{X})} = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu_0)^2\right)}{\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2\right)} = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2/n} (\bar{X} - \mu_0)^2\right) < c$$

となる c を求める。

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

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

すなわち，

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

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。

例 2： X_1, X_n, \dots, 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，

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

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 の最尤推定量 \hat{p} は，

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

である。

次の仮説検定を考える。

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

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 , $n \rightarrow \infty$ のとき ,

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

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

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

のとき , 帰無仮説 $H_0 : p = p_0$ を棄却する。

例 3 : 回帰モデル

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

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

について， β_1, \dots, 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

$\theta = (\beta_1, \dots, \beta_k, \sigma^2)$ とする。

尤度関数は，

$$l(\theta) = \prod_{i=1}^n f(Y_i; \theta) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_1 X_{1i} - \dots - \beta_k X_{ki})^2\right)$$

となる。

H_0 の制約つき最尤推定量を $\tilde{\theta} = (\tilde{\beta}_1, \dots, \tilde{\beta}_k, \tilde{\sigma}^2)$ 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 $\hat{\theta} = (\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_k, \hat{\sigma}^2)$ とする。

尤度比

$$\begin{aligned} \frac{l(\tilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} &= \frac{(2\pi\tilde{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2\tilde{\sigma}^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \tilde{\beta}_1 X_{1i} - \dots - \tilde{\beta}_k X_{ki})^2\right)}{(2\pi\hat{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2\hat{\sigma}^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i} - \dots - \hat{\beta}_k X_{ki})^2\right)} \\ &= \frac{(\tilde{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{n-G}{2}\right)}{(\hat{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{n-k}{2}\right)} = \left(\frac{\frac{1}{n-G} \sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^2}{\frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2} \right)^{-n/2} \exp\left(-\frac{k-G}{2}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{k-G}{2}\right) \left(\frac{n-k}{n-G} \right)^{-n/2} \left(\frac{\sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^2}{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2} \right)^{-n/2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \exp\left(-\frac{k-G}{2}\right) \left(\frac{n-k}{n-G}\right)^{-n/2} \left(1 + \frac{\sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2}{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2}\right)^{-n/2} \\
&= \exp\left(-\frac{k-G}{2}\right) \left(\frac{n-k}{n-G}\right)^{-n/2} \left(1 + \frac{G}{n-k} \frac{(\sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2)/G}{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2/(n-k)}\right)^{-n/2} < c
\end{aligned}$$

のとき仮説を棄却する。

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

を利用すると c が求まる。

ただし，途中で以下を利用

$$\begin{aligned}
\tilde{\sigma}^2 &= \frac{1}{n-G} \sum_{i=1}^n (Y_i - \tilde{\beta}_1 X_{1i} - \cdots - \tilde{\beta}_k X_{ki})^2 = \frac{1}{n-G} \sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^2 \\
\hat{\sigma}^2 &= \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i} - \cdots - \hat{\beta}_k X_{ki})^2 = \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2
\end{aligned}$$

近似的には、

$$\begin{aligned} -2 \log \frac{l(\tilde{\theta})}{l(\hat{\theta})} &= -2 \log \frac{(\tilde{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{n-G}{2}\right)}{(\hat{\sigma}^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{n-k}{2}\right)} \\ &= n \log\left(\frac{\tilde{\sigma}^2}{\hat{\sigma}^2}\right) + (k - G) \longrightarrow \chi^2(G) \end{aligned}$$