

New type RLSE を用いた Restricted ridge 推定量と他の推定量との 比較について

東海大学・理学部 鳥越 規央 (Norio Torigoe)

School of Science,
Tokai University

1. はじめに

ガウスマルコフモデル $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ における最小 2 乗推定量 (OLSE) とパラメータに制約条件ついたときの最小 2 乗推定量 (RLSE) との比較については Trenkler([7]), 工藤他 ([5]), Ujiie and Ishii ([9]) が研究を行ってきた。また最小 2 乗推定量と制約条件付き Liu 推定量との比較については Akdeniz and Kaçiranlar ([1]) などが先駆け、最近では Torigoe and Ujiie ([8]) によって制約付き Liu 推定量が RLSE よりも MSE 基準で良い推定量である条件について考察を行い、さらに制約条件の下での係数行列の一般逆行列を用いた場合 RLSE と Liu 推定量について、MSE 基準で Liu 推定量が良い推定量である条件について同様の考察を行った。また、Ridge 推定量を含めた biased estimator についても Hoerl and Kennard ([4]) ら多くの研究者によって研究されている。本研究では Sarkar([6]) によって提案された、制約条件 $R\boldsymbol{\beta} = \mathbf{r}$ の下での ridge 推定量 (RRE) に Ujiie and Ishii ([9]) によって提案された新しい形の RLSE を融合させた RRE が RLSE よりも MSE 基準で良い推定量である条件について考察を行った。

2. 推定量について

$n \times 1$ 観測ベクトル $\mathbf{y}$, $n \times p$ 説明変数行列 $\mathbf{X}$, $p \times 1$ パラメータベクトル $\boldsymbol{\beta}$, $n \times 1$ 残差ベクトル $\boldsymbol{\epsilon}$ による線形モデル

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

において $E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$, $V(\mathbf{y}) = \sigma^2\mathbf{I}$ を満たす $\mathbf{y}$ はモデル $(\mathbf{y}, \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ に従うという。 σ^2 は未知である。ここで $R\boldsymbol{\beta} = \mathbf{r}$ の下での推定量について比較を行う。 $\boldsymbol{\beta}$ の推定量 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ の評価については、MSE 行列 $M(\tilde{\boldsymbol{\beta}}) = E(\tilde{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})(\tilde{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})'$ を用いて論じる。 $\boldsymbol{\beta}$ の推定量 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_1, \tilde{\boldsymbol{\beta}}_2$ に対して、 $M(\tilde{\boldsymbol{\beta}}_1) - M(\tilde{\boldsymbol{\beta}}_2)$ が非負定値行列が成り立つとき $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_2$ が $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_1$ よりも良い推定量であるということにする。なお非負定値行列について次の 4 つは同値であることが知られている。

(i) $n \times n$ 対称行列 A は非負定値行列である

(ii) 任意の n 次ベクトル $\mathbf{x}$ に対して $\mathbf{x}'A\mathbf{x} \geq 0$

(iii) A の固有値 $\lambda_i (i = 1, \dots, n)$ について $\lambda_i \geq 0$

(iv) $A = B'B$ となる行列 B が存在する.

なお MSE 行列の差を共分散行列 $\text{cov}(\tilde{\beta}) = E(\tilde{\beta} - E(\tilde{\beta}))(\tilde{\beta} - E(\tilde{\beta}))'$ と偏り (バイアス) $B(\tilde{\beta}) = E(\tilde{\beta}) - \beta$ を用いて変形すると

$$M(\tilde{\beta}) = \text{cov}(\tilde{\beta}) + B(\tilde{\beta})B(\tilde{\beta})'$$

であり, さらに $C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2) = \text{cov}(\tilde{\beta}_1) - \text{cov}(\tilde{\beta}_2)$ とおくと,

$$M(\tilde{\beta}_1) - M(\tilde{\beta}_2) = C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2) + B(\tilde{\beta}_1)B(\tilde{\beta}_1)' - B(\tilde{\beta}_2)B(\tilde{\beta}_2)'$$

である.

$(\mathbf{y}, \mathbf{X}\beta, \sigma^2\mathbf{I})$ における最小 2 乗法による β の推定量 $\hat{\beta}$ は $S = \mathbf{X}'\mathbf{X}$ が正則ならば

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} = S^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$$

であり, S が正則でないならば ムーア・ペンローズ型一般逆行列 S^- を用いて

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{y} = S^-\mathbf{X}'\mathbf{y}$$

となる. これを Ordinary Least Square Estimator (OLSE) という. $\hat{\beta}$ は β の不偏推定量である. なお, ムーア・ペンローズ型一般逆行列 S^- は S に対して次の性質を持つ.

$$(i) SS^-S = S$$

$$(ii) S^-SS^- = S^-$$

$$(iii) (S^-S)' = S^-S$$

$$(iv) (SS^-)' = SS^-$$

次に β について $R\beta = r$ なる制約条件を設ける. ここで R をランク m ($m < p$) の $m \times p$ 行列, r を $m \times 1$ ベクトルとし, R, r とも既知とする. この条件の下での最小 2 乗推定量 b を求めるのだが, Ujiie and Ishii([9]) は, $R\beta = r$ より, $\hat{\beta}$ について $\hat{\beta} = R^-r$ が成り立つものとし, . また正規方程式より

$$S\beta + R'\lambda = \mathbf{X}'\mathbf{y}$$

が成り立つことを利用して RLSE を導いた. ここで λ はラグランジュ乗数ベクトル ($m \times 1$) である. この方程式より

$$\lambda = (R')^-(\mathbf{X}'\mathbf{y} - S\beta)$$

がいえ.

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \lambda' \lambda = -SR^-(R')^-(X'y - S\beta) = 0$$

より

$$\beta = (SR^-(R')^-S)^-SR^-(R')^-X'y$$

がいえ,

$$\lambda = (R')^-X'y - (R')^-S(SR^-(R')^-S)^-SR^-(R')^-X'y$$

であることがいえる. よって RLSE b は

$$b = \hat{\beta} - S^-R'(I - RS^-SR^-)(RS^-R')^-r$$

と表されることを示した. このとき次の定理が成り立つ.

定理 1 ([9]) 制約条件 $R\beta = r$ を満たしているとき, β の 2 つの推定量 $b, \hat{\beta}$ について, 次の (1),(2),(3) は同値である.

(1) b は $\hat{\beta}$ より良い推定量.

(2) $T = (S^-S - I)\beta$, $n = S^-R'(I - RS^-SR^-)(RS^-R')^-r$ とおくと

$$n'(Tn' + nT')^-n \leq 1$$

(3) $B(b) = cB(\hat{\beta})$ をみたす $c \in [-1, 1]$ が存在する.

3. Ridge Estimator と Restricted Ridge Estimator (RRE)

多重共線性の問題の解決法として, Hoerl and Kennard [4] によって

$$\hat{\beta}_k = (S + kI)^{-1}X'y \quad (k \geq 0)$$

が提案された. また

$$W_k = (I + kS^{-1})^{-1}$$

とおくと $\hat{\beta}_k = W_k\hat{\beta}$ となる. ここで制約条件 $R\beta = r$ を考慮した推定量として Sarkar [6] によって提案された

$$b_{rk} = W_k b$$

を β の Restricted Ridge Estimator (RRE) という. ただしここで用いる b は Ujiie and Ishii([9]) による新しい形の RLSE なので従来の推定量とは形が異なる. この推定量の平均は $E(b_{rk}) = W_k(T - n)$ であり, 分散共分散行列は

$$\text{cov}(b_{rk}) = \sigma^2 W_k S^- W_k'$$

となる.

4. RLSE と RRE の比較について

制約条件の下, RRE と RLSE を MSE を用いて比較してみる. 従来の正規方程式より導出された $\mathbf{b}$ と それに作用素 $\mathbf{W}_k$ を作用させた $\mathbf{b}_{rk}$ の比較を行う. ここで

$$\begin{aligned} C(\mathbf{b}, \mathbf{b}_{rk}) &= \sigma^2 \{ \mathbf{S}^- - (\mathbf{I} + k\mathbf{S}^{-1})^{-1} \mathbf{S}^- ((\mathbf{I} + k\mathbf{S}^{-1})^{-1})' \} \\ &= \sigma^2 k (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \{ \mathbf{S} \mathbf{S}^- + \mathbf{S}^- \mathbf{S} + k\mathbf{S}^- \} (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned} &B(\mathbf{b})B(\mathbf{b})' - B(\mathbf{b}_{rk})B(\mathbf{b}_{rk})' \\ &= (\mathbf{T} - \mathbf{n})(\mathbf{T} - \mathbf{n})' - \{ (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} - \mathbf{W}_k \mathbf{n} \} \{ (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} - \mathbf{W}_k \mathbf{n} \}' \\ &= \mathbf{T} \mathbf{T}' - \mathbf{n} \mathbf{T}' - \mathbf{T} \mathbf{n}' + \mathbf{n} \mathbf{n}' - (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})' \\ &\quad + (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \mathbf{n}' \mathbf{W}_k' + \mathbf{W}_k \mathbf{n} \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})' - \mathbf{W}_k \mathbf{n} \mathbf{n}' \mathbf{W}_k', \end{aligned}$$

より, 2つの推定量の MSE 行列の差は

$$\begin{aligned} M(\mathbf{b}) - M(\mathbf{b}_{rd}) &= \text{cov}(\mathbf{b}) - \text{cov}(\mathbf{b}_{rd}) + B(\mathbf{b})B(\mathbf{b})' - B(\mathbf{b}_{rd})B(\mathbf{b}_{rd})' \\ &= \sigma^2 k (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \{ \mathbf{S} \mathbf{S}^- + \mathbf{S}^- \mathbf{S} + k\mathbf{S}^- \} (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \\ &\quad + \mathbf{T} \mathbf{T}' - \mathbf{n} \mathbf{T}' - \mathbf{T} \mathbf{n}' + \mathbf{n} \mathbf{n}' - (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})' \\ &\quad + (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \mathbf{n}' \mathbf{W}_k' + \mathbf{W}_k \mathbf{n} \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})' - \mathbf{W}_k \mathbf{n} \mathbf{n}' \mathbf{W}_k'. \end{aligned}$$

となる. ここで $\mathbf{S}^- \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^-$ とし

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= \sigma^2 k (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \{ \mathbf{S} \mathbf{S}^- + \mathbf{S}^- \mathbf{S} + k\mathbf{S}^- \} (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \\ &\quad + \mathbf{T} \mathbf{T}' - (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})' \\ \Sigma_2 &= (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \mathbf{n}' \mathbf{W}_k' + \mathbf{W}_k \mathbf{n} \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})' - \mathbf{W}_k \mathbf{n} \mathbf{n}' \mathbf{W}_k' \\ &\quad - \mathbf{n} \mathbf{T}' - \mathbf{T} \mathbf{n}' + \mathbf{n} \mathbf{n}', \end{aligned}$$

とおくと, $M(\mathbf{b}) - M(\mathbf{b}_{rd}) = \Sigma_1 + \Sigma_2$ となる. そこでそれぞれの行列が非負正定値となるための条件について考察を行う.

まず $\mathbf{W}_k \mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I} = -k(\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1}$ と $\mathbf{T} \mathbf{T}' = k^2(\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S}^- \mathbf{S} - \mathbf{I})\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{S} \mathbf{S}^- - \mathbf{I})'(\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1}$ であることより

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= \sigma^2 k (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \{ \mathbf{S}^- \mathbf{S} + \mathbf{S} \mathbf{S}^- + k\mathbf{S}^- \} (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \\ &\quad + k^2 (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \{ \mathbf{S}^- \mathbf{S} \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}' \mathbf{S} \mathbf{S}^- - \mathbf{S}^- \mathbf{S} \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}' - \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}' \mathbf{S} \mathbf{S}^- \} (\mathbf{S} + k\mathbf{I})^{-1} \end{aligned}$$

がいえる。\$S\$ は正定値行列より、\$P'SP = \Delta\$ となるような直交行列 \$P\$ と正値対角行列 \$\Delta\$ が存在する。\$P\$ は直交行列であることより \$P'P = PP' = I\$ を満たす。また \$\gamma = P'\beta\$, \$\eta = \Delta^-\Delta\gamma\$ とおくと

$$\begin{aligned}\Sigma_1 &= \sigma^2 k(P\Delta P' + kI)^{-1} \{P\Delta^- P' P\Delta P' + P\Delta P' P\Delta^- P' + kP\Delta^- P'\} (P\Delta P' + kI)^{-1} \\ &\quad + k^2(P\Delta P' + kI)^{-1} \{P\Delta^- P' P\Delta P' \beta\beta' P\Delta P' P\Delta^- P' \\ &\quad - P\Delta^- P' P\Delta P' \beta\beta' - \beta\beta' P\Delta P' P\Delta^- P'\} (P\Delta P' + kI)^{-1}, \\ &= kP(\Delta + kI)^{-1} \{\sigma^2(\Delta^-\Delta + \Delta\Delta^- + k\Delta^-) + k(\eta\eta' - \eta\gamma' - \gamma\eta')\} (\Delta + kI)^{-1} P',\end{aligned}$$

となる。ここで \$\Delta^-\$ は \$\Delta\$ のムーア・ペンローズ型一般逆行列である。ここで \$\Delta\$ は非負正定値なので \$\Delta^- = \Delta\$ となり、\$\eta = \gamma\$ である。よって

$$\Sigma_1 = kP(\Delta + kI)^{-1} \{\sigma^2(2I + k\Delta^{-1}) - k\eta\eta'\} (\Delta + kI)^{-1} P'$$

である。これより次のことがいえる。

定理2 制約条件 \$R\beta = r\$ を満たしているとき、次の (1),(2) は同値である。

(1)

$$\Sigma_1 = k^2 P(\Delta + kI)^{-1} \left(\frac{\sigma^2}{k} E_1 - \eta\eta' \right) (\Delta + kI)^{-1} P'$$

が非負定値行列である。ここで \$E_1 = 2I + k\Delta^{-1}\$ とする。

(2) \$E_1\$ は非負定値であり、\$\eta\$ は \$E_1\$ が生成するベクトル空間に属し、

$$\eta' E_1^{-1} \eta \leq \frac{\sigma^2}{k}. \quad (k > 0)$$

同様に \$\Sigma_2\$ についても次のことがいえる。

定理3 制約条件 \$R\beta = r\$ を満たしているとき、次の (1),(2) は同値である。

(1) \$\xi = P'n\$ とおくと、

$$\Sigma_2 = P(\Delta + kI)^{-1} [E_2 + k\eta\xi'(k^2I - 2\Delta) + k(k^2I - 2\Delta)\xi\eta'] (\Delta + kI)^{-1} P'$$

が非負定値行列である。ここで \$E_2 = k\xi\xi'\Delta + k\Delta\xi\xi' + \Delta\xi\xi'\Delta\$ とする。

(2) \$E_2\$ は非負定値であり、\$\alpha\$ を

$$\alpha\alpha' = k\eta\xi'(k^2I - 2\Delta) + k(k^2I - 2\Delta)\xi\eta', \quad (k > 0)$$

をみたすベクトルとすると、\$\alpha\$ は \$E_2\$ が生成するベクトル空間に属し、

$$\alpha' E_2^{-1} \alpha \leq 1.$$

以上より 2 つの定理を満たすとき, $M(b) - M(b_{rd})$ が非負正定値となり, RRE が RLSE よりも良い推定量となる. 上の定理を証明するために以下の補題を紹介する.

補題 1 ([2]). A を $n \times n$ 対称行列, a を $n \times 1$ ベクトル, c を正の実数とする. このとき次の 2 つは同値である.

(1) $cA - aa'$ は非負定値行列.

(2) A は非負定値であり, $a \in \mathcal{M}(A)$, A^- を A の一般逆行列 ($AA^-A = A$ を満たす A^-) とすると, $a'A^-a \leq c$

($\because$)

(2) $\Rightarrow$ (1): $a \in \mathcal{M}(A)$ より任意の a について $a = Ax$ なる x が存在し, $x = A^-a$ と表現できる. また A は非負定値より $x'Ax \geq 0$ である.

$$\begin{aligned}
 x'(cA - aa')x &= cx'Ax - x'aa'x \\
 &= cx'Ax - (x'Ax)x'Ax \\
 &= x'Ax(c - x'Ax) \\
 &= x'Ax(c - x'AA^-Ax) \\
 &= x'Ax(c - a'A^-a) \geq 0
 \end{aligned}$$

よって $cA - aa'$ は非負定値行列.

(1) $\Rightarrow$ (2): $cA - aa'$ を非負定値行列とすると, 任意の n 次元ベクトル x に対して $x'(cA - aa')x \geq 0$. よって

$$\begin{aligned}
 x'(cA - aa')x &\geq 0 \\
 cx'Ax &\geq x'aa'x \\
 cx'Ax &\geq (a'x)'a'x = (a'x)^2 \geq 0
 \end{aligned}$$

$c > 0$ より $x'Ax \geq 0$ なので A は非負定値である.

また $cA - aa'$ は非負定値行列より $cA = aa' + G = aa' + FF'$ なる非負定値行列 G が存在し,

$$cA = (a:F)(a:F)'$$

である. これより $\mathcal{M}(A) = \mathcal{M}(a:F)$ となるので $a \in \mathcal{M}(A)$ である.

定理 2 の略証 補題 1 において, A を E_1 , a を η , c を $\frac{\sigma^2}{k}$ とおくと証明できる.

定理 3 の略証 補題 1 において, A を E_2 , a を α , c を 1 とおくと証明できる.

5. 数値計算

パラメータ, 説明変数行列, 制約条件行列が

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 2 \\ 2 & 3 & 3.5 \\ 3 & 4 & 4.5 \\ 4 & 2 & 6 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad r = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

であるときの, RLSE, RRE について, シミュレーションを行った. 計算は数式処理ソフトウェア Mathematica Ver.5.2. を用い, 各推定値を 1000 回発生させ, それぞれの推定量の平均, 分散を算出し, 表 1, 表 2 に表記した. 条件を満たす範囲で, RRE が RLSE よりよい推定量であることがわかる

$\sigma = 1$	β_1	β_2	β_3
RLSE	0.95007	0.98314	2.04304
RRE $k = 0.1$	1.12587	0.99792	1.91736
$k = 0.5$	1.18266	1.00802	1.86386
$k = 1$	1.18563	1.01487	1.84442
$k = 2$	1.17592	1.02545	1.81855
$k = 3$	1.16330	1.03362	1.79678

表 1: The mean of estimators for β

$\sigma = 1$	β_1	β_2	β_3
RLSE	13.8403	0.12420	6.64665
RRE $k = 0.1$	1.52437	0.05784	0.73420
$k = 0.5$	0.12367	0.04876	0.06731
$k = 1$	0.04119	0.04555	0.02856
$k = 2$	0.01708	0.04035	0.01682
$k = 3$	0.01165	0.03604	0.01369

表 2: The variance of estimators for β

参考文献

- [1] Akdeniz, F. and Kaçiranlar, S. (2001) More on the new biased estimator in linear regression, *Sankhya, Series B*, **63**, 321-325.

- [2] Baksalary, J. K. and Kala, R. (1983) Partial orderings between matrices one of which is of rank one. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences, Mathematics*, **31**,5-7.
- [3] Goldberger, Arthur S.(1964) *Ecomometrical Theory*, John Wiley and Sons, Inc., New York.
- [4] Hoerl, A.E. and Kennard, R.W. (1970) Ridge regression: biased estimation for non-orthogonal problems. *Technometrics*, **12**, 55-67.
- [5] 工藤昭夫, 氏家勝巳, 松尾延明 (1993) 制約条件の下での線形モデルにおける推定量について. 日本数学会統計分科会講演アブストラクト
- [6] Sarker, N.(1992) A new estimator combining the ridge regression and the restricted least squares methods of estimation, *Communications in Statistics, Series A*,**21**,1987-2000.
- [7] Trenkler, G. (1987) mean square error martix comparisons among restricted least squares estimators, *Sankhya, Series A*, **49**, 96-104.
- [8] Torigoe, N. and Ujiie, K. (2006) On the restricted Liu estimator in Gauss-Markov model, *Communications in Statistics, Theory and Methods*, **35**, in Print.
- [9] Ujiie,K. and Ishii, N. (2005) On the comparisons of estimators in Gauss-Markov models, *Proceedings of the School of Science,Tokai University*, **40**, 25-37.