

Restricted ridge estimator と他の推定量との比較

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がついたときの最小 2 乗推定量 (RLSE) との比較については Trenkler([6]), 工藤他 ([4]), Ujiie and Ishii ([8]) 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 ([7]) 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 ([3]) ら多くの研究者によって研究されている。本研究では Sarkar([5]) 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) 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、さらに多重共線性のある説明変数行列を用いた数値計算例も挙げる。

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.

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

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

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

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

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 を求めると

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

という形になる. これを Restricted Least Square Estimator (RLSE) と呼ぶ. $R\beta = r$ の下での $\hat{\beta}, b$ の共分散と b のバイアスは

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 S^-, \text{cov}(b_1) = \sigma^2 S^- - \sigma^2 S^-R'(RS^-R')^-RS^-,$$

$$B(b) = E(b) - \beta = S^-R'(RS^-R')^-(r - R\beta)$$

である. よって $R\beta = r$ の下では b は不偏性を持つ. この RLSE と OLSE の間に次のような関係がある.

定理 1 ([6]) 次の (1), (2) は同値である.

- (1) b は $\hat{\beta}$ よりも良い推定量. すなわち $M(\hat{\beta}) - M(b)$ が非負定値行列である.
 (2) $\delta = R\beta - r$ とすると $\delta'(RS^{-1}R')^{-1}\delta \leq \sigma^2$

この定理を証明するために以下の補題1,2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、 $a'A^{-}a \leq c$
 \therefore (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。 \square

補題2 ([6]) β の2つの推定量 $\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2$ について、次の2つは同値である。

(1) $\tilde{\beta}_2$ は $\tilde{\beta}_1$ より良い推定量。

(2) $C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)$ は非負定値であり、 $B(\tilde{\beta}_2) \in \mathcal{M}(C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2))$, d を $B(\tilde{\beta}_2) = C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)d$ を満たすベクトルとすると、 $d'C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)d \leq 1$

$\therefore M(\tilde{\beta}_1) - M(\tilde{\beta}_2) = C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2) - B(\tilde{\beta}_2)B(\tilde{\beta}_2)'$ より補題1で A を $C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)$ に、 a を $B(\tilde{\beta}_2)$ に対応させることにより、

$$\begin{aligned} & B(\tilde{\beta}_2)'C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2) - B(\tilde{\beta}_2) \\ &= d'C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)'C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2) - C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)d \\ &= d'C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2) - C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)d \\ &= d'C(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2)d \leq 1 \quad \square \end{aligned}$$

定理1は、補題2より証明することができる。

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 [3] によって

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

が提案された。ここで $S, S + I$ は正則なものとして扱う。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 [5] によって提案された

$$b_{rk} = W_k b$$

を β の Restricted Ridge Estimator (RRE) という。この推定量の平均は

$$E(b_{rk}) = W_k\beta + W_kS^{-1}R'(RS^{-1}R')^{-1}\delta$$

であり、 $\Sigma := S^{-1} - S^{-1}R'(RS^{-1}R')^{-1}RS^{-1}$ とおくと分散共分散行列は

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

となる。またバイアスは

$$B(b_{rk}) = (W_k - I)\beta = -k(S + kI)^{-1}\beta$$

である。

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. MSE 行列はそれぞれ

$$\begin{aligned} M(\mathbf{b}) &= \sigma^2 \Sigma \\ M(\mathbf{b}_{rk}) &= \text{cov}(\mathbf{b}_{rk}) + \mathbf{B}(\mathbf{b}_{rk})\mathbf{B}'(\mathbf{b}_{rk}) \\ &= \sigma^2 \mathbf{W}_k \Sigma \mathbf{W}_k' + (\mathbf{W}_k - \mathbf{I})\beta\beta'(\mathbf{W}_k - \mathbf{I})' \end{aligned}$$

となる. ここで

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

より, 2つの推定量の MSE 行列の差は

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

となる. この差が非負定値行列となるための条件について考察を行う. \mathbf{S} は正定値行列より, $\mathbf{P}'\mathbf{S}\mathbf{P} = \Delta$ となるような直交行列 \mathbf{P} と正値対角行列 Δ が存在する. \mathbf{P} は直交行列であることより $\mathbf{P}'\mathbf{P} = \mathbf{P}\mathbf{P}' = \mathbf{I}$ を満たす. $\mathbf{B} = \mathbf{P}'\Sigma\mathbf{P}$ とおく. Σ は非負定値行列より \mathbf{B} も非負定値であり, \mathbf{B} の対角成分は全て非負である. $\gamma = \mathbf{P}'\beta$ とおくと $\beta = \mathbf{P}\gamma$ となる. また $\mathbf{R}\beta = \mathbf{R}\mathbf{P}\gamma = \mathbf{r}$ が成り立つ. よって

$$\begin{aligned} M(\mathbf{b}) - M(\mathbf{b}_{rk}) &= (\mathbf{P}\Delta\mathbf{P}' + k\mathbf{P}\mathbf{P}')^{-1} [\sigma^2 k \{ \mathbf{P}\Delta\mathbf{P}'\Sigma + \Sigma\mathbf{P}\Delta\mathbf{P}' + k\Sigma \} - k^2 \mathbf{P}\gamma\gamma'\mathbf{P}'] (\mathbf{P}\Delta\mathbf{P}' + k\mathbf{P}\mathbf{P}')^{-1} \\ &= \mathbf{P}(\Delta + k\mathbf{I})^{-1} [\sigma^2 k \{ \mathbf{B}\Delta + \Delta\mathbf{B} + k\mathbf{B} \} - k^2 \gamma\gamma'] (\Delta + k\mathbf{I})^{-1} \mathbf{P}' \end{aligned}$$

となる. これより次のことがいえる.

定理2 制約条件 $\mathbf{R}\beta = \mathbf{r}$ を満たしているとき, β の2つの推定量 $\mathbf{b}, \mathbf{b}_{rk}$ について, 次

の (1),(2) は同値である.

(1) b_{rk} は b より良い推定量. つまり

$$M(b) - M(b_{rk}) = k^2 P(\Delta + kI)^{-1} \left[\frac{\sigma^2}{k} E - \gamma\gamma' \right] (\Delta + kI)^{-1} P'$$

は非負定値行列である. ここで $E = B\Delta + \Delta B + kB$ とする.

(2) E は非負定値であり, γ は E が生成するベクトル空間に属し, E^- を E の一般逆行列 ($EE^-E = E$ を満たす E^-) とすると,

$$\gamma' E^- \gamma \leq \frac{\sigma^2}{k}, \quad (k > 0)$$

定理2の証明. 補題1において, A を E , a を γ , c を σ^2/k とおくことにより証明できる.

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 ならびに restricted Liu 推定量 (RLE)

$$(S + I)^{-1}(S + dI)b \quad (0 < d < 1)$$

を数値的に比較するため, 数式処置ソフトウェア Mathematica Ver.5.1. を用いて1000回のシミュレーションを行った. ここで, $\sigma = 1$, RREでは k を 0.1, 0.5, 1, 2, 3 とし, RLEでは d を 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 とした. 表1では, 各推定量の平均を, 表2では分散を成分ごとに表している. 表2よりこのシチュエーションでは RRE も RLE も RLSE より有効であることが示されている.

6. 今後の課題について

Ujii and Ishii [8] が提案した RLSE

$$b = \hat{\beta} - S^- R' (I - RS^- SR^-) (RS^- R')^{-1} r$$

を用いた RRE について, 有効性の検討を行い, また制約条件付きの Liu 推定量 (RLE) との比較について, どのようなシチュエーションにおいてどちらの推定量がより有効であるかの考察を行う.

$\sigma = 1$	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
RLE $d = 0.1$	1.16208	1.01170	1.86428
$d = 0.3$	1.11496	1.00535	1.90400
$d = 0.5$	1.06785	0.99901	1.94373
$d = 0.7$	1.02074	0.99266	1.98345
$d = 0.9$	0.97363	0.98632	2.02318

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
RLE $d = 0.1$	0.27338	0.04741	0.14616
$d = 0.3$	1.43500	0.05595	0.72156
$d = 0.5$	3.59481	0.06991	1.75625
$d = 0.7$	6.68435	0.08931	1.95247
$d = 0.9$	10.7264	0.11414	2.04960

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] Hoerl, A.E. and Kennard, R.W. (1970) Ridge regression: biased estimation for non-orthogonal problems. *Technometrics*, **12**, 55-67.
- [4] 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
- [5] 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.
- [6] Trenkler, G. (1987) mean square error matrix comparisons among restricted least squares estimators, *Sankhya, Series A*, **49**, 96-104.
- [7] Torigoe, N. and Ujiie, K. (2006) On the restricted Liu estimator in Gauss-Markov model, *Communications in Statistics, Theory and Methods*, **35**, in Print.
- [8] 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.