SVD에 의한 多變量 誤差變量의 回歸分析

李　鍾　厚

Use of the Singular Value Decomposition in Multivariate Errors in Variables Regression Analysis

Jong-Hoo Lee

〈目　　次〉

1. 序　言
2. 母數의 推定
　參考文獻

Abstract

The underlying model ;

$$(1)\begin{cases} \underset{(p\times n)}{X} = \underset{(p\times n)}{\Xi} + \underset{(p\times n)}{E}, & E=(\mathbf{e}_1, \cdots\cdots, \mathbf{e}_n),\ e_i \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_P) \\ \underset{(p\times n)}{Y} = \underset{(p\times p)}{B}\underset{(p\times n)}{\Xi} + \underset{(p\times n)}{F} & \end{cases}$$

Where F has the same distribution as E, (X', Y') is observation matrix, $\Xi = (\boldsymbol{\xi}_1, \cdots\cdots, \boldsymbol{\xi}_n)$, B and σ^2 are unknown parameters, was proposed by Gleser and Watson[2] and studied by Bhargava.[1] They gave the estimations of B, Ξ and σ^2 by the maximum likelihood method under the assumption of normality as belows ;

$$(2)\quad\begin{cases}\hat{B} = ML^{-1}\\ \hat{\Xi} = LL'X + LM'Y\\ \hat{\sigma}^2 = (2np)^{-1}(trW - trD)\end{cases}$$

Where $W = \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}'$, $W\begin{bmatrix} L \\ M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L \\ M \end{bmatrix} D$, the rows of (L', M') are orthonomal and so are eigenvectors of matrix W, D a diagonal matrix of eigenvalues.

In this note we used the form of the singular value decomposition (SVD) in multivariate errors in variables' regression analysis, in order to estimate unknown parameters B, Ξ and σ^2.

As the conclusion, we have confirmed all the same results as the above equation (2) and the same estimators for B and Ξ, without the assumption of normality.

1. 序 言

多變量 誤差變量에 關한 回歸分析問題를 Gleser 및 Watson[2] 에 의하여 1973年에 紹介되었고 그 뒤 Bhargava[1]에 의하여 特殊한 경우에 대해서 回歸係數의 MLE의 存在性, 그리고 回歸係數의 MLE의 分布에 關한 研究를 1977年에 報告했다.

여기서는 多變量 誤差變量에 關한 回歸分析을 Singular Value Decomposition (SVD) 方法으로 分析한다.

$$(1\text{-}1)\quad\begin{cases} \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{\xi}_i + \mathbf{e}_i \\ \boldsymbol{y}_i = B\boldsymbol{\xi}_i + \mathbf{f}_i \end{cases},\quad i = 1, \cdots\cdots, n$$

여기서 $\mathbf{e}_i$ 와 $\mathbf{f}_i$ 는 서로 獨立이며 同一한 正規分布 $N(\mathbf{0}, \sigma^2 I_p)$를 따르는 確率變數이고, B, ξ, σ^2은 未知의 母數이다.

이들을 $n \geqq 2p$란 假定에서

$$(1\text{-}2)\quad\begin{cases} X = (\boldsymbol{x}_1, \cdots\cdots, \boldsymbol{x}_n),\quad Y = (\boldsymbol{y}_1, \cdots\cdots, \boldsymbol{y}_n),\quad \Xi = (\boldsymbol{\xi}_1, \cdots\cdots, \boldsymbol{\xi}_n) \\ E = (\mathbf{e}_1, \cdots\cdots, \mathbf{e}_n),\quad F = (\mathbf{f}_1, \cdots\cdots, \mathbf{f}_n) \end{cases}$$

으로 두면 X, Y, Ξ, E, F는 $(p\times n)$型이고 다음의 關係式이 成立한다.

$$(1\text{-}3)\quad \underset{(2p\times n)}{\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}} = \underset{(2p\times p)}{\begin{bmatrix} I_p \\ B \end{bmatrix}} \underset{(p\times n)}{\Xi} + \underset{(2p\times n)}{\begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix}}$$

그리고 X, Y 의 結合確率密度函數는

$$(1\text{-}4)\quad P(X, Y \mid \Xi, B, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-np} \exp\left[(-2\sigma^2)^{-1}\left\{ tr(X-\Xi)(X-\Xi)' + tr(Y-B\Xi)(Y-B\Xi)'\right\}\right]$$

이다. 이 線型回歸模型에서 未知母數 Ξ, B, σ^2 의 最尤推定量을 SVD에 의하여 求하고 Gleser가 求한 것과 比較하여 본다.

2. 母數의 推定

假定 (1-3)으로부터 期待값 $\varepsilon\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_p \\ B \end{bmatrix}\Xi$ 를 얻는다.

다음에 共分散行列을 생각해 본다.

$$(2\text{-}1)\quad tr\left[\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}'\right] = tr(X-\Xi)(X-\Xi)' + tr(Y-B\Xi)(Y-B\Xi)'$$

(2-1)의 값이 最小가 되는 뜻에서의 推定量 B, Ξ 를 求한다. 이 경우는 반드시 正規分布라는 條件은 必要하지 않는다. 위의 條件을 만족하는 B는 (2-2)로 주어진다.

$$(2\text{-}2)\quad B = Y\Xi'(\Xi\Xi')^{-}$$

다음에 $(X', Y')'$ 를 SVD에 의하여 (2-3)으로 表示한다.

$$(2\text{-}3)\quad \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = U\Theta V' = \begin{pmatrix} \Xi \\ B\Xi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}$$

$U(2p\times 2p)$, $\Theta(2p\times 2p)$, $V'(2p\times n)$, $U'U = I_{2p}$, $V'V = I_{2p}$ 行列 Θ 는 對角行列이고 모든 對角要素 θ_k는 陽이며 正方行列 $X'X+Y'Y$ 卽 正方行列 $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}'$의 零이 아닌 固有値의 제곱근이다. 그리고 U의 列은 $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}'$의 固有 vector이고 또 V'의 行은 $(X', Y')\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = X'X+Y'Y$의 固有 vector이다. 그러므로 $(X'X+Y'Y)V = V\Theta^2$, $\Theta = \mathrm{diag}(\theta_1, \cdots\cdots, \theta_{2p})$ $\theta_1 > \theta_2 > \cdots\cdots > \theta_{2p}$. 단 rank $(X'X+Y'Y)$ = rank $\left[\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}'\right] = 2p$ 라 둔다.

(2-3)에서 다음을 얻는다.

$$(2\text{-}4)\qquad \binom{E}{F} = \binom{X}{Y} - \binom{\Xi}{B\Xi} = U\Theta V' - \binom{\Xi}{B\Xi}$$

$$\varepsilon\begin{bmatrix}E\\F\end{bmatrix} = \varepsilon(U\Theta V') - \begin{bmatrix}\Xi\\B\Xi\end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

이므로 $U\Theta V'$는 $\begin{matrix}\Xi\\B\Xi\end{matrix}$ 의 하나의 推定量이다.

$$U = \begin{bmatrix}U_{11} & U_{21}\\ U_{12} & U_{22}\end{bmatrix},\quad \Theta = \begin{bmatrix}\Theta_1 & O\\ O & \Theta_2\end{bmatrix}, V = [V_1, V_2], V_1(n\times p)$$

으로 두면

$$(2\text{-}5)\qquad \begin{bmatrix}X\\Y\end{bmatrix} = U\Theta V' = \begin{bmatrix}U_{11}\Theta_1 V_1' + U_{21}\Theta_2 V_2'\\ U_{12}\Theta_1 V_1' + U_{22}\Theta_2 V_2'\end{bmatrix}$$

이므로

$$U_{11}\Theta_1 = XV_1,\qquad U_{12}\Theta_1 = YV_1$$
$$U_{11}'U_{11} + U_{12}'U_{12} = I_P,\quad U_{11}'U_{21} + U_{21}'U_{22} = \mathbf{0}$$
$$U_{21}'U_{11} + U_{22}'U_{12} = \mathbf{0},\quad U_{21}'U_{21} + U_{21}'U_{22} = I_P$$

가 成立하고 $\varepsilon\begin{bmatrix}X\\Y\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\Xi\\B\Xi\end{bmatrix}$ 이므로 Ξ, B의 推定量 $\widetilde{\Xi}$, $\widetilde{B}$를

$$(2\text{-}6)\qquad \begin{cases}\widetilde{\Xi} = U_{11}\Theta_1 V_1' + U_{21}\Theta_2 V_2'\\ \widetilde{B}\widetilde{\Xi} = U_{12}\Theta_1 V_1' + U_{22}\Theta_2 V_2'\end{cases}$$

으로 잡아본다. 이 때 (2-6)의 두 式에서

$$(2\text{-}7)\qquad \widetilde{B} = U_{12}U_{11}^{-1}$$

를 얻는다. 또 (2-6)에서 $\widetilde{\Xi}V_1 = U_{11}\Theta_1$, $XV_1 = U_{11}\Theta_1$ 이므로

$$(2\text{-}8)\qquad \widetilde{\Xi}V_1 = XV_1$$

을 얻는다. 그리고 假定에서

$$(2\text{-}9)\quad \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = X'X + Y'Y$$
$$= \begin{bmatrix} U_{11}\Theta_1 V_1' + U_{21}\Theta_2 V_2' \\ U_{12}\Theta_1 V_1' + U_{22}\Theta_2 V_2' \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} U_{11}\Theta_1 V_1' + U_{21}\Theta_2 V_2' \\ U_{12}\Theta_1 V_1' + U_{22}\Theta_2 V_2' \end{bmatrix}$$
$$= V_1\Theta_1^2 V_1' + V_2\Theta_2^2 V_2'$$

이며 (2-8), (2-9)에서 Ξ의 推定量을 다시

$$(2\text{-}10)\quad \hat{\Xi} = U_{11}\Theta_1 V_1'$$

로 두고 (2-2)에 代入하면 B의 推定量 $\hat{B}$는

$$(2\text{-}11)\quad \hat{B} = U_{12}U_{11}^{-1}$$

이며 (2-7)과 一致한다. 그리고 $\hat{\Xi}$는 다음 式으로 表示된다.

$$(2\text{-}12)\quad \hat{\Xi} = XV_1 V_1'$$

또 다음 式들이 成立한다.

$$(2\text{-}13)\quad W = \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} XX' & XY' \\ YX' & YY' \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} U_{11}\Theta_1^2 U_{11}' + U_{21}\Theta_2^2 U_{21}', & U_{11}\Theta_1^2 U_{12}' + U_{21}\Theta_2^2 U_{22}' \\ U_{12}\Theta_1^2 U_{11}' + U_{22}\Theta_2^2 U_{21}', & U_{12}\Theta_1^2 U_{12}' + U_{22}\Theta_2^2 U_{22}' \end{bmatrix}$$

$$(2\text{-}14)\quad X\hat{\Xi}'(\hat{\Xi}\hat{\Xi}')^{-1} = I_P$$

다음에 σ^2의 推定量을 求해 보자. 便宜上

$$(2\text{-}15)\quad \begin{cases} R = \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Xi \\ B\Xi \end{pmatrix} \\ \hat{R} = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{\Xi} \\ \hat{B}\hat{\Xi} \end{pmatrix} \end{cases}$$

으로 둔다.

$$(2\text{-}16)\qquad \varepsilon(trRR') = \varepsilon tr \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}'$$

$$= \varepsilon tr \begin{bmatrix} \sum_1^n (e_{1i}^2 + f_{1i}^2) & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_1^n (e_{pi}^2 + f_{pi}^2) \end{bmatrix}$$

$$= 2np\sigma^2$$

이다. 다음에 $\hat{R}\hat{R}'$를 셈하자. (2-11), (2-12)로부터

$$(2\text{-}17)\qquad \hat{R}\hat{R}' = \left[\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{\Xi} \\ \hat{B}\hat{\Xi} \end{pmatrix}\right]\left[\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{\Xi} \\ \hat{B}\hat{\Xi} \end{pmatrix}\right]'$$

$$= W - \begin{bmatrix} \hat{\Xi}\hat{\Xi}' & \hat{\Xi}\hat{\Xi}'\hat{B}' \\ \hat{B}\hat{\Xi}\hat{\Xi}' & \hat{B}\hat{\Xi}\hat{\Xi}'\hat{B}' \end{bmatrix}$$

$$= W - U_1\Theta_1^2 U_1'$$

임을 알 수 있다. 따라서

$$(2\text{-}18)\qquad tr\hat{R}\hat{R}' = trW - trU_1\Theta_1^2 U_1' = trW - tr\Theta_1^2$$

이므로

$$(2\text{-}19)\qquad \varepsilon(trW - tr\Theta_1^2) = \varepsilon tr\hat{R}\hat{R}' = 2np\sigma^2$$

이다. 그러므로 $(trW - tr\Theta_1^2)/2np$를 σ^2의 推定量으로 할 수 있다.

$$(2\text{-}20)\qquad \hat{\sigma}^2 = (trW - tr\Theta_1^2)/2np$$

으로 두면 $\hat{\sigma}^2$은 σ^2의 不偏推定量이며 Gleser[2)]에 의하여 一致推定量임을 알 수 있다. 이로써 다음의 定理를 얻는다.

定理, 多變量線型假說 (1-3)의 未知母數 B, Ξ, σ^2의 推定量은

$$
(2\text{-}21)\quad
\begin{cases}
\hat{B} = U_{12}U_{11}^{-1}\,(=ML^{-1}) \\
\hat{\Xi} = XV_1V_1'\,(=U_1U_1'X+U_1U_2'Y=LL'X+LM'Y) \\
\hat{\sigma}^2 = \dfrac{1}{2np}\,(tr\,W - tr\Theta_1^2)
\end{cases}
$$

으로 두면 B, Ξ의 推定量은 誤差變量의 正規性의 假定없이 求해지며 B, Ξ는 正規分布일 때 最尤推定量이 되고 σ^2은 不偏推定量이며 Gleser 가 求한 推定量과 同一하다.

(注意) 이 方法에서는 (2-5)에서 $X=U_{11}\Theta_1V_1'+U_{21}\Theta_2V_2'=XV_1V_1'+XV_2V_2'=XVV'$와 같이 되므로 內容分析에 特別한 注意가 要望된다.

參 考 文 獻

1. Anil K. Bhargava (1977), Maximum Likelihood Estimation in a Multivariate "Errors in variables" Regression Model with unknown Error Covariance matrix, Commun. Statist. pp. 587~601.
2. Gleser, L. J. and Watson, G. S. (1973), Estimation of a linear transformation. Biometrica 60, pp. 525~534.
3. C. Radhakrishna Rao (1973), Linear Statistical Inference and Its Applications 2nd ed. John Wiley.
4. John Mandel (1982), Use of the Singular Value Decomposition in Regression Analysis. The American Statistician. 36, 15~24.
5. 李鍾厚, 崔在龍 (1979), 多變量回歸模型에 있어서의 誤差變量의 한 推定法, 海大論文集 自然科學篇, (14).
6. R. L. Eubank and J. T. Webster (1985), The Singular Value Decomposition as a Tool for Solving Estimability Problems. The American Statistician Vol. 39 No. 1. 64~66.