

4.10 HW 10

作业 10 链接

练习 4.1 对于一般线性模型 $\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$, $\boldsymbol{\epsilon} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2 I_n)$, 我们知道 $(I_n - P_X)X = \mathbf{0}$, 其中 $P_X = X(X^\top X)^{-1}X^\top$ 是投影阵, 所以

$$RSS = \mathbf{y}^\top (I_n - P_X) \mathbf{y} = \boldsymbol{\epsilon}^\top (I_n - P_X) \boldsymbol{\epsilon},$$

即 RSS 不依赖于 $\boldsymbol{\beta}$ 。基于上述观点重新证明第 6 讲引理 1(2): 对于简单线性模型, 残差平方和 $RSS = s_{\epsilon\epsilon} - s_{\epsilon x}^2 / s_{xx}$ 。

解

简单线性模型

$$y_i = a + bx_i + \varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$$

其矩阵-向量形式为 $\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$, 其中

$$X = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

设

$$\tilde{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \frac{1}{\sqrt{s_{xx}}}(\mathbf{x} - \mathbf{1}\bar{x}) \end{pmatrix}$$

则 $C(X) = C(\tilde{X})$

$$P_X = P_{\tilde{X}} = \tilde{X}(\tilde{X}^\top \tilde{X})^{-1} \tilde{X}^\top = \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{s_{xx}} \right)_{n \times n}$$

所以

$$\begin{aligned} RSS &= \boldsymbol{\epsilon}^\top (I_n - P_X) \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^\top P_X \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 - \sum_{i,j=1}^n \varepsilon_i \varepsilon_j \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{s_{xx}} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 - \sum_{i,j=1}^n \frac{\varepsilon_i \varepsilon_j}{n} - \frac{1}{s_{xx}} \sum_{i,j=1}^n \varepsilon_i \varepsilon_j (x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x}) \\ &= \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n \varepsilon_i \right)^2 - \frac{1}{s_{xx}} \left(\sum_{i=1}^n \varepsilon_i (x_i - \bar{x}) \right)^2 \\ &= s_{\varepsilon\varepsilon} - \frac{s_{\varepsilon x}^2}{s_{xx}} \end{aligned}$$

注 注意 $s_{\varepsilon\varepsilon}$ 是中心化的形式!

练习 4.2 假设数据 $(y_i, x_i, z_i), i = 1, \dots, n$ 满足线性模型

$$y_i = a + bx_i + cz_i + \epsilon_i, \epsilon_i \sim (0, \sigma^2), \epsilon_i \text{ 与 } x_i, z_i \text{ 独立}$$

或等价地 $(\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top, \mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n)^\top)$

$$\mathbf{y} = \mathbf{1}a + \mathbf{x}b + \mathbf{z}c + \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} \sim (0, \sigma^2 I_n), \quad \boldsymbol{\epsilon} \perp (\mathbf{x}, \mathbf{z}).$$

(a) 记 $\hat{c}_0 = S_{xz}/S_{zz}$, $S_{xz} = \frac{1}{n-1} \sum (x_i - \bar{x})(z_i - \bar{z})$, $S_{zz} = \frac{1}{n-1} \sum (z_i - \bar{z})^2$, 试用第 11 讲命题 4 证明 1 的投影方法 (即先将三个向量 $\mathbf{1}, \mathbf{x}, \mathbf{z}$ 正交化, 再投影) 而不是直接应用命题 4 的结论, 证明 b 的 LS 估计

$$\hat{b} = \frac{\sum [(x_i - \bar{x} - (z_i - \bar{z})\hat{c}_0) y_i]}{\sum [(x_i - \bar{x} - (z_i - \bar{z})\hat{c}_0)^2]}.$$

(注: 该表达式表明, 为了求解 b 的 LS 估计, 我们可以分两步回归: (1) $\text{lm}(x \sim z): x_i = a_0 + c_0 z_i + \delta_i$, 求得回归系

数 $\hat{c}_0 = s_{xz}/s_{zz}$ 以及 $\hat{a}_0 = \bar{x} - \bar{z}\hat{c}_0$, 得到残差 $x_i^\perp = x_i - \bar{x} - (z_i - \bar{z})\hat{c}_0$. (2) $y \sim x^\perp : y_i = \alpha + \beta x_i^\perp + \text{error}$, 由此得到的斜率 LS 估计 $\hat{\beta}$ 就是 \hat{b})

(b) 证明

$$R^2 = \frac{r_{yx}^2 + r_{yz}^2 - 2r_{yx}r_{yz}r_{xz}}{1 - r_{xz}^2},$$

其中 r_{xz} 为两个自变量之间的样本相关系数。

证明 记

$$s_{xy} = \sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

对 $X = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{x} & \mathbf{z} \end{pmatrix}$ 正交化得到:

于是

$$\hat{\mathbf{y}} = P_X \mathbf{y} = P_{\tilde{X}} \mathbf{y} = \mathbf{1}\hat{a} + \mathbf{x}\hat{b} + \mathbf{z}\hat{c}$$

关注 x 的系数, 可得

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \left[\frac{\mathbf{x}^T - \bar{x}\mathbf{1}^T}{s_{xx}} - \frac{\frac{s_{xz}}{s_{xx}} \left[\mathbf{z}^T - \mathbf{1}\bar{z} - \frac{s_{xz}}{s_{xx}}(\mathbf{x} - \mathbf{1}\bar{x})^T \right]}{s_{zz} - s_{zx}^2/s_{xx}} \right] \mathbf{y} \\ &= \frac{s_{xy}}{s_{xx}} - \frac{s_{xz} \left(s_{zy} - \frac{s_{xz}}{s_{xx}} s_{xy} \right)}{s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2} \\ &= \frac{s_{xy}s_{xx}s_{zz} - s_{xy}s_{xz}^2 - s_{xz}s_{zy}s_{xx} + s_{xy}s_{xz}^2}{s_{xx}(s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2)} \\ &= \frac{s_{xy}s_{zz} - s_{xz}s_{zy}}{s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2} = \frac{s_{xy} - s_{zy}}{s_{xx} - s_{xz}\hat{c}_0} = \frac{\sum [x_i - \bar{x} - (z_i - \bar{z})\hat{c}_0] y_i}{\sum [x_i - \bar{x} - (z_i - \bar{z})\hat{c}_0]^2} \end{aligned}$$

同时, x 和 z 地位对等, 交换位置即有

$$\hat{c} = \frac{s_{zy}s_{xx} - s_{xz}s_{xy}}{s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2}$$

考虑 $R^2 = \text{var}(\hat{\mathbf{y}})/\text{var}(\mathbf{y}) = (n-1)\text{var}(\hat{\mathbf{y}})/s_{yy}$,

$$\text{var}(\hat{\mathbf{y}}) = \text{var}(\mathbf{x}\hat{b} + \mathbf{z}\hat{c})$$

$$= \text{var}(\mathbf{x})\hat{b}^2 + \text{var}(\mathbf{z})\hat{c}^2 + 2\hat{b}\hat{c}\text{cov}(\mathbf{x}, \mathbf{z})$$

$$= \frac{1}{n-1} \left(s_{xx}\hat{b}^2 + s_{zz}\hat{c}^2 + 2s_{xz}\hat{b}\hat{c} \right)$$

$$= \frac{1}{n-1} \frac{s_{xx}(s_{xy}s_{zz} - s_{xz}s_{zy})^2 + s_{zz}(s_{zy}s_{xx} - s_{xz}s_{xy})^2 + 2s_{xz}(s_{zy}s_{xx} - s_{xz}s_{xy})(s_{xy}s_{zz} - s_{xz}s_{zy})}{(s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2)^2}$$

$$= \frac{1}{n-1} \frac{s_{xy}^2 s_{zz} + s_{yz}^2 s_{xx} - 2s_{xy}s_{yz}s_{xz}}{s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2}$$

$$R^2 = \frac{s_{xy}^2 s_{zz} + s_{yz}^2 s_{xx} - 2s_{xy}s_{yz}s_{xz}}{(s_{zz}s_{xx} - s_{xz}^2) s_{yy}}$$

注意到

$$r_{xy}^2 = \frac{s_{xy}^2}{s_{xx}s_{yy}}$$

于是

$$R^2 = \frac{r_{yx}^2 + r_{yz}^2 - 2r_{yx}r_{yz}r_{xz}}{1 - r_{xz}^2}$$

练习 4.3 假设线性模型 $\mathbf{y} = X_1\beta_1 + X_2\beta_2 + \boldsymbol{\epsilon}$, 其中 X_1 为 $n \times (p-q)$ 矩阵, X_2 为 $n \times q$ 矩阵, β_2 为 $q \times 1$ 参数向量。记 $X_2^\perp = X_2 - P_{X_1}X_2$ 。假设 W 是任何 $n \times q$ 矩阵使得 $W^\top X_1 = 0, W^\top X_2$ 可逆, 证明 $\tilde{\beta}_2 = (W^\top X_2)^{-1} W^\top \mathbf{y}$ 是 β_2 的无偏估计, 并证明 $\text{var}(\tilde{\beta}_2 | X) \geq \sigma^2 (X_2^\perp X_2^\perp)^\perp$, 当 $W = X_2^\perp$ 时等号成立。

证明

$$\begin{aligned} E(\tilde{\beta}_2 | X) &= (W^T X_2)^{-1} W^T (X_1 \beta_1 + X_2 \beta_2) \\ &= (W^T X_2)^{-1} W^T X_2 \beta_2 = \beta_2 \end{aligned}$$

因此: $E(\tilde{\beta}_2) = E(E(\tilde{\beta}_2 | X)) = \beta_2$.

记 $C = (W^T X_2)^{-1} W^T$, 则 $CX_2 = I$, 根据投影阵 $P \leq I$,

$$\begin{aligned} \text{var}(\tilde{\beta}_2 | X) &= \sigma^2 CC^T \\ (X_2^{\perp T} X_2^{\perp})^{-1} &= (X_2^T (I_n - P_{X_1})^T (I_n - P_{X_1}) X_2)^{-1} \\ &= (X_2^T (I_n - P_{X_1}) X_2)^{-1} \\ &\leq (X_2^T X_2)^{-1} \\ &= CX_2 (X_2^T X_2)^{-1} X_2^T C^T \\ &= CP_{X_2} C^T \leq CC^T \\ \Rightarrow \text{var}(\tilde{\beta}_2 | X) &\geq \sigma^2 (X_2^{\perp T} X_2^{\perp})^{-1} \end{aligned}$$

练习 4.4 假设 A 为任一 $n \times p$ 列满秩矩阵, 其各列为 $A = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_p)$, 我们知道 $A^T A$ 的 (i, j) 元为 $\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_j$. 记 $\mathbf{a}_i^{\perp} = \mathbf{a}_i - P_{A_{(-i)}} \mathbf{a}_i$, 其中 $A_{(-i)}$ 为 A 删除第 i 列后剩余的列组成的矩阵. 证明 $(A^T A)^{-1}$ 的 (i, j) 元等于 $\frac{\mathbf{a}_i^{\perp T} \mathbf{a}_j^{\perp}}{\|\mathbf{a}_i^{\perp}\|^2 \|\mathbf{a}_j^{\perp}\|^2}$. 提示: 假设线性模型 $\mathbf{y} = A\beta + \epsilon, \epsilon \sim (0, \sigma^2 I_n)$, $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)^T$, 注意这里 A 的第一列未必是 \mathcal{K} , 但 LS 估计仍具有形式 $\hat{\beta} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{y}$, 方差矩阵为 $\text{var}(\hat{\beta} | A) = \sigma^2 (A^T A)^{-1}$, 其 (i, j) 元为 $\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j$ 的协方差, 因此只需计算 $\text{cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j | A)$ (利用 11 讲命题 4 给出 $\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j$ 的表达).

解

线性模型可以写为: $\mathbf{y} = a_1 \beta_1 + \dots + a_p \beta_p + \epsilon$. 由前已知 β_i 的 LS 估计为 $\hat{\beta}_i = (a_i^{\perp T} a_i^{\perp})^{-1} a_i^{\perp T} \mathbf{y}$, 于是:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j | A) &= (a_i^{\perp T} a_i^{\perp})^{-1} a_i^{\perp T} \text{Var}(y | A) a_j^{\perp} (a_j^{\perp T} a_j^{\perp})^{-1} \\ &= \sigma^2 \frac{a_i^{\perp T} a_j^{\perp}}{\|\mathbf{a}_i^{\perp}\|^2 \|\mathbf{a}_j^{\perp}\|^2} \end{aligned}$$

所以 $(A^T A)^{-1}$ 的 (i, j) 元为 $\frac{a_i^{\perp T} a_j^{\perp}}{\|\mathbf{a}_i^{\perp}\|^2 \|\mathbf{a}_j^{\perp}\|^2}$.