第三章：参数估计与分布理论

3.1 最小二乘估计(Least Squared Estimate)

线性模型

$$Y_{n\times1}=X_{n\times p}\beta_{p\times1}+e_{n\times1},$$

其中$Ee=0$，通常对误差 e两种假定：

1.$Cov(e)=\sigma^2 I_n$，σ^2未知；

2.$e\sim N(0,\sigma^2 I_n)$，σ^2未知(比 1 强)。

由最小二乘法的思想，β的估计应选择使得$Q(\beta)=\|e\|^2=\|Y-X\beta\|^2=(Y-X\beta)'(Y-X\beta)$ 达到最小。

若$\hat\beta$使得$\|Y-X\hat\beta\|^2=\min\limits_{\beta}\|Y-X\beta\|^2$，则称$\hat\beta$为$\beta$的一个最小二乘解。极小化$Q(\beta)$，则$\beta$需满足方程$\frac{\partial Q(\beta)}{\partial\beta}=0$，即得到正规方程

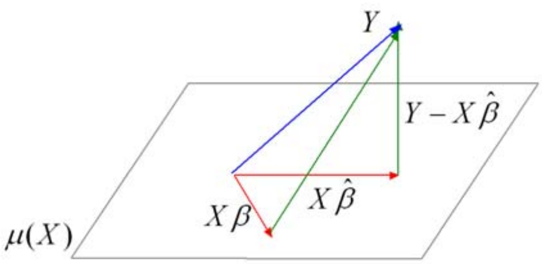
$$X'X\beta=X'Y。$$

正规方程的所有解为$(X'X)^- X'Y$。

定理 3.1.1：$\hat\beta$是最小二乘解$\Leftrightarrow\hat\beta$是正规方程的解，即$\hat\beta=(X'X)^- X'Y$。

最小二乘法几何解释：

$$\min_{\beta}\|Y-X\beta\|^2=\min_{\theta\in\mu(X)}\|Y-\theta\|^2$$



当$rank(X)=p$时，最小二乘解有唯一解$\hat\beta=(X'X)^{-1}X'Y$，且此时$\hat\beta$为β的无偏估计，即$E\hat\beta=\beta$，方差$Var(\hat\beta)=\sigma^2(X'X)^{-1}$。

当$rank(X)<p$时，最小二乘解不唯一，此时最小二乘解中无 $\hat\beta$能作为 β的无偏估计。此外可以证明此时β的无偏估计不存在，此时β称为不可估的(nonestimable)。

定义 3.1.1:$c'\beta$为 β的某一线性函数（c已知），若存在Y的线性函数$a'Y$使得$Ea'Y=c'\beta$，$\forall\beta$，则称 $c'\beta$是可估函数。

可估性的含义可由下面的例子形象说明。

例 1：设两个物体重量β_1,β_2未知，把它们同时放在天平上称 n次，第 i次结果为y_i，模型为

$$y_i=\beta_1+\beta_2+e_i, i=1,\cdots,n.$$

其中e_i为第 i次称量误差，且设$e=(e_1,\cdots,e_n)'$，$Ee=0, Var(e)=\sigma^2 I_n$。

令$c=(1,1)', \beta=(\beta_1,\beta_2)'$，则$c'\beta=\beta_1+\beta_2$是可估的,，例如$y_1$就是其一个无偏估计，但$\beta_1,\beta_2$都不可估。$\beta_1$(或$\beta_2$)不可估的理由很清楚，因为每次称量都是两物体一起称，当然无法由结果对其中单独一个物体的重量作“估计”。

定理 3.1.2：以下三条等价

1.$c'\beta$可估；

2.$X\beta_1=X\beta_2 \Rightarrow c'\beta_1=c'\beta_2$；

3.$c\in\mu(X')$。

注：1.一切$c'\beta$可估$\Leftrightarrow rank(X)=p$。

2. 若 $c_1'\beta, c_2'\beta$ 可估，则任线性组合$\lambda_1 c_1'\beta+\lambda_2 c_2'\beta$也是可估。若$c_1,c_2$线性无关，称$c_1'\beta, c_2'\beta$也线性无关。对线性模型来说之多有$rank(X)$个线性无关的可估函数。

3.若$c'\beta$可估，$\hat\beta$是最小二乘解，则$c'\hat\beta$值唯一，与广义逆$(X'X)^-$的选取无关；此外$c'\hat\beta$是$c'\beta$的无偏估计。

定义 3.1.2：设$c'\beta$可估，称$c'\hat\beta$为$c'\beta$的最小二乘估计。

例 2：考虑如下模型

$$y_{ij}=\mu+\alpha_i+e_{ij}, i=1,2; j=1,2.$$

$$e_{ij}\ \ i.i.d\ \ Ee_{ij}=0, Ee_{ij}^2=\sigma^2.$$

μ,α_1,α_2不可估，但$\alpha_1-\alpha_2$可估。

若$c'\beta$可估，$a'Y$为其一无偏估计，对$\forall b\in\mu(X)^{\perp}$，$(a+b)'Y$都是$c'\beta$的无偏估计。在所有线性无偏估计中，找出方差最小的估计，此估计称为最优线性无偏估计(Best Linear Unbiased Estimate，简写成 BLUE)，或称为 Gauss-Markov 估计(GM 估计)。

定理 3.1.3: (Gauss-Markov 定理)若$c'\beta$可估，则$c'\hat{\beta}$是其唯一的 GM 估计($\hat{\beta}$为 β的 LS 估计)。

注：在一切线性无偏估计类中，$c'\hat{\beta}$是方差最小的，但不排除比$c'\hat{\beta}$方差更小的非线性无偏估计；但若误差分布还是正态分布，则这种可能性不存在。

下面考虑σ^2的估计。令$\hat{e}=Y-X\hat{\beta}=(I_n-P_X)Y$，称为残差(residual)向量，$E\hat{e}=0, Cov(\hat{e})=\sigma^2(I_n-P_X)$。

定理 3.1.4：设$r=rank(X_{n\times p})$，则

$$\hat{\sigma}^2=\frac{\hat{e}'\hat{e}}{n-r}=\frac{\|Y-X\hat{\beta}\|^2}{n-r}=\frac{Y'(I_n-P_X)Y}{n-r}$$

为σ^2的无偏估计。

3.2 分布理论

迄今为止，关于误差的假定是满足 GM 条件，若误差还服从正态分布即$e\sim N_n(0,\sigma^2 I_n)$，则可以确定一些估计量的精确分布。

定理 3.2.1：在误差正态分布假设下，设$c'\beta$为可估函数，$\hat{\beta}=(X'X)^{-}X'Y$，$rank(X)=r$，则：

1. $c'\hat{\beta}$为$c'\beta$的极大似然估计(MLE)，且$c'\hat{\beta}\sim N\left(c'\beta,\sigma^2 c'(X'X)^{-}c\right)$;
2. $\frac{n-r}{n}\hat{\sigma}^2$是$\sigma^2$的 MLE，且$\frac{(n-r)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2}\sim\chi^2_{n-r}$；
3. $c'\hat{\beta}$与$\hat{\sigma}^2$独立。

注：对可估函数来说，其 LSE 与 MLE 一致；但对误差方差的估计，LSE 是无偏的，MLE 是有偏的。

*定理 3.2.2：在正态误差假设下

1.$T_1 = Y'Y$，$T_2 = X'Y$是完全、充分统计量；

2.若$c'\beta$可估，则$c'\hat{\beta}$是唯一最小方差无偏估计(Minimum Variance Unbiased Estimate，简写 MVUE)；

3.$\hat{\sigma}^2$为σ^2的 MVUE。

3.3 有线性约束时的估计

考虑线性模型，其系数 β满足线性约束条件$L\beta = d$(此约束为相容性方程)。不失一般性可假设$d = 0$(否则，取β_0使得$L\beta_0 = d$，令$\tilde{Y} = Y - X\beta_0, \tilde{\beta} = \beta - \beta_0$，考虑线性模型$\tilde{Y} = X\tilde{\beta} + e$，此时线性约束变为$L\tilde{\beta} = 0$)。本节考虑线性模型如下

$$Y = X\beta + e, Ee = 0, Cov(e) = \sigma^2 I_n$$

$$L_{q\times p}\beta = 0$$

由最小二乘法，此时β的估计应选择在$L\beta = 0$的条件下极小化$\|Y - X\beta\|^2$，即选择$\hat{\beta}_L = Arg\min_{L\beta=0}\|Y - X\beta\|^2$。引入 Lagrange 乘子$\lambda_{q\times 1}$，考虑$Q(\beta,\lambda) = \|Y - X\beta\|^2 + 2\lambda' L\beta$，由$\frac{\partial Q}{\partial \beta} = 0, \frac{\partial Q}{\partial \lambda} = 0$得到方程$X'X\beta + L'\lambda = X'Y$，$L\beta = 0$，即

$$\begin{pmatrix} X'X & L' \\ L & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \beta \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X'Y \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (*)$$

引理 3.3.1：设$S = \{A_{n\times m}x \mid B_{k\times m}x = 0, x \in R^m\}$，则 S 为线性子空间且$\dim S = rank\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} - rank(B)$。

引理 3.3.2：设$V_{p\times p} \geq 0$，A为$p\times q$矩阵，则

1.$\mu(A) \cap \mu(VA^{\perp}) = \{0\}$；

2.$\mu(V \vdots A) = \mu(VA^{\perp} \vdots A)$。

回到方程(*)，由 $L\beta=0$ 解得 $\beta=(I_p-L^- L)z,\forall z_{p\times 1}$，代入前一个方程得

$$X'X(I_p-L^- L)z+L'\lambda=X'Y \quad (**)$$

由引理 3.3.2，注意到 $I_p-L^- L=(L')^\perp$，有 $\mu(X')=\mu(X'X)\subset\mu(X'X \vdots L')=\mu(X'X(I_p-L^- L)\vdots L')$。因此方程(**)是相容得，从而方程(*)也是相容的。

定义 3.3.1: 若存在 a 使得 $Ea'Y=c'\beta$ 对所有满足 $L\beta=0$ 的 β 成立，则称 $c'\beta$ 是条件可估函数，$a'Y$ 为 $c'\beta$ 的条件无偏估计。

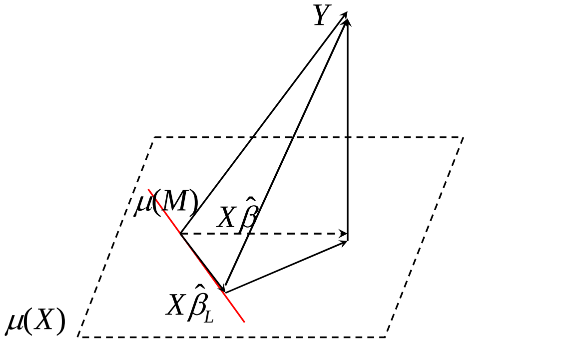
定理 3.3.1：在线性约束 $L\beta=0$ 的条件下，线性函数 $c'\beta$ 是条件可估函数 $\Leftrightarrow c\in\mu(X'\vdots L')$。

定理 3.3.2：在线性约束 $L\beta=0$ 的条件下，

1. 约束最下二乘解为 $\hat{\beta}_L=G_{11}X'Y$，其中，$\begin{pmatrix} X'X & L' \\ L & 0\end{pmatrix}^- = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22}\end{pmatrix}$；
2. 对任何条件可估函数 $c'\beta$，$c'\hat{\beta}_L$ 值唯一(不依赖广义逆的选取)且 $Var(c'\hat{\beta}_L)=\sigma^2 c'G_{11}c$；
3. $c'\hat{\beta}_L$ 是条件可估函数 $c'\beta$ 的唯一 BLUE。

几何解释：

$X\hat{\beta}_L$ 是 Y 到子空间 $\mu(M)=\{X\beta | L\beta=0\}$ 的正交投影，这里 $M=X(L')^\perp=X(I_p-L^- L)$。由于 $X\hat{\beta}_L=XG_{11}X'Y$，故 $XG_{11}X'$ 为 $\mu(M)$ 上的投影算子，即 $P_M=XG_{11}X'$。



推论 3.3.2：在一些条件下$\hat{\beta}_L$有简单的形式。设$rank(L_{q\times p})=q$，

1. 若$\mu(L')\subset\mu(X')$，则

$$\hat{\beta}_L=\hat{\beta}-(X'X)^{-}L'\left[L(X'X)^{-}L'\right]^{-1}L\hat{\beta}$$

其中$\hat{\beta}=(X'X)^{-}X'Y$；

2. 若$rank(X_{n\times p})=p$，则

$$\hat{\beta}_L=\hat{\beta}-(X'X)^{-1}L'\left[L(X'X)^{-1}L'\right]^{-1}L\hat{\beta}$$

其中$\hat{\beta}=(X'X)^{-1}X'Y$。

定理 3.3.3：在线性约束$L\beta=0$条件下，

$\hat{\sigma}_L^2=\dfrac{\left\|Y-X\hat{\beta}_L\right\|^2}{n-s}=\dfrac{Y'(I_n-P_M)Y}{n-s}$为 σ^2的条件无偏估计，这里 $M=X(L')^{\perp}$

$s=rank\begin{pmatrix}X\\L\end{pmatrix}-rank(L)$。

定理 3.3.4：在约束$L\beta=0$的条件下，若进一步假设误差还是正态分布，$c'\beta$条件可估，则：

1.$c'\hat{\beta}_L\sim N(c'\beta,\sigma^2c'G_{11}c)$；

2.$\dfrac{(n-s)\hat{\sigma}_L^2}{\sigma^2}\sim\chi^2_{n-s}$，$s=rank\begin{pmatrix}X\\L\end{pmatrix}-rank(L)$；

3.$c'\hat{\beta}_L$与$\hat{\sigma}_L^2$独立。

当 $rank(X_{n\times p})<p$ 时， β 不可估， 对 $c\in\mu(X')$，$c'\beta$可估；在带有约束$L\beta=0$的条件下，对$c\in\mu(X'\vdots L')$，$c'\beta$(条件)可估。增加约束后，可估函数的选取范围“扩大”了。加上怎样的约束$L\beta=0$，当然，加上约束后要与原模型一致(等价)，可以使得$\forall c$，$c'\beta$(条件)可估？

设线性模型$Y=X\beta+e, r=rank(X)<p$，由最小二乘法，实质是找 Y在空间$\mu(X)$的投影；加上约束$L\beta=0$后，找 Y在空间

$S=\{X\beta | L\beta=0,\beta\in R^p\}$上的投影，要使两模型等价， 由于 $S\subset\mu(X)$， 要求 $S=\mu(X)\Leftrightarrow \dim S=\dim\mu(X)=rank(X)$，

由于$\dim S=rank\begin{pmatrix}X\\L\end{pmatrix}-rank(L)$，所以当

$$rank\begin{pmatrix}X\\L\end{pmatrix}-rank(L)=rank(X)$$

即$\mu(X')\cap\mu(L')=\{0\}$时，加上约束与原模型本质上一样。

另一方面，在约束$L\beta=0$下，要对$\forall c$，$c'\beta$(条件)可估， 则 $\mu(X'\vdots L')=R^p$， 即 $rank\begin{pmatrix}X\\L\end{pmatrix}=p$。因此，若$L_{q\times p}$满足条件：

$$\mu(X')\cap\mu(L')=\{0\}\text{且}rank\begin{pmatrix}X\\L\end{pmatrix}=p \qquad (\#)$$

则加上约束与不加约束线性模型等价，此时对对$\forall c$，$c'\beta$在条件$L\beta=0$下可估。若 L满足条件(#)， 则称约束 $L\beta=0$ 为 side condition(边界条件)。

以下不失一般性，可以假设$L_{q\times p}$是行满秩的， 若 L 满足条件(#)， 则 $q=p-rank(X)$。

引理 3.3.1：设$L\beta=0$为 side condition，则

$$X'X(X'X+L'L)^{-1}X'=X',$$
$$L(X'X+L'L)^{-1}X'=0。$$

定理 3.3.5：设有约束$L\beta=0$的线性模型，若$L\beta=0$为 side condition，则

1. 约束最小二乘问题的解$\hat{\beta}_L$唯一且 $\hat{\beta}_L=(X'X+L'L)^{-1}X'Y$；
2. $\hat{\beta}_L$为方程$\begin{cases}X'X\beta=X'Y\\ L\beta=0\end{cases}$的唯一解；
3. $\hat{\beta}_L$为β在$L\beta=0$条件下的无偏估计且对任何可估函数$c'\beta$ ($c\in\mu(X')$)，$c'\hat{\beta}_L=c'\hat{\beta}$(这里$\hat{\beta}=(X'X)^{-}X'Y$)。

上述定理表明，对通常线性模型，正规方程$X'X\beta=X'Y$的解$\hat{\beta}$一般不唯一。若加上一个 side condition，问题转化求解$\begin{cases}X'X\beta=X'Y\\ L\beta=0\end{cases}$，此时解$\hat{\beta}_L$唯一，且对任可估$c'\beta$，$c'\hat{\beta}_L=c'\hat{\beta}$。Side condition 让线性模型正规方程有一个特殊的解。由于满足 side condition 的L选择并不唯一，$\forall D_{q\times q}$可逆，$DL\beta=0$都是一个 side condition。

可以选择一个“好”的 side condition 使得方程$\begin{cases}X'X\beta=X'Y\\ L\beta=0\end{cases}$解很容易求出。

例 3：考虑下面线性模型：

$$y_{ij}=\mu+\alpha_i+e_{ij}, i=1,\cdots,n;\ j=1,\cdots,m.$$

写成矩阵形式$Y=X_{nm\times(n+1)}\beta+e$，$\beta=(\mu,\alpha_1,\cdots,\alpha_n)'$，$rank(X)=n<n+1$，side condition 为一个方程，选择$L\beta=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=0$，易解的$\hat{\mu}=\frac{1}{nm}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}y_{ij}$，$\hat{\alpha}_i=\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}y_{ij}-\hat{\mu}$。

3.4 Aitken 模型与广义最小二乘

到目前为止,我们都是在误差$Cov(e)=\sigma^2 I_n$下讨论估计问题，此时任何可估函数的 LS 估计与其 GM 估计一致。但在许多实际情况下，误差协方差阵为$Cov(e)=\sigma^2\Sigma$，$\Sigma>0$(已知)，在此条件下线性模型$Y=X\beta+e, Ee=0$，称为 Aitken 模型。

由于$\Sigma>0$为已知，则作变换$\tilde{Y}=\Sigma^{-1/2}Y, \tilde{X}=\Sigma^{-1/2}X, \tilde{e}=\Sigma^{-1/2}e$，此时$\tilde{Y}=\tilde{X}\beta+\tilde{e}, E\tilde{e}=0, Cov(\tilde{e})=\sigma^2 I_n$。

令 $Q(\beta)=\|\tilde{Y}-\tilde{X}\beta\|^2=(Y-X\beta)'\Sigma^{-1}(Y-X\beta)$，由最小二乘法原理，此时 β 的估计应选择 $\beta^*=Arg\min_{\beta}Q(\beta)$。此时得到 Aitken 方程：

$$X\Sigma^{-1}X\beta=X\Sigma^{-1}Y,$$

解 $\beta^*=\left(X\Sigma^{-1}X\right)^{-}X\Sigma^{-1}Y$，称为广义最小二乘解。

注：如果 Σ 为对角阵 $diag(\sigma_{11},\sigma_{22},\cdots\sigma_{nn})$，令 $W=\Sigma^{-1}=diag(w_1,w_2,\cdots w_n)$，这里 $w_i=\sigma_{ii}^{-1}$，此时 β^* 也称加权最小二乘估计。

由于可估性只涉及 Y 的均值与其方差无关，且 $\mu(\tilde{X})=\mu(X')$，故此时 $c'\beta$ 可估 $\Leftrightarrow c\in\mu(X')$。

注：由于 $X\left(X'\Sigma^{-1}X\right)^{-}X'$ 不依赖于广义逆的选取，令 $A=X\left(X'\Sigma^{-1}X\right)^{-}X'\Sigma^{-1}$，由于 $AX=X$，因此 $A^2=A$ 为幂等矩阵。

定理 3.4.1：对任何可估函数 $c'\beta$，$c'\beta^*$ 是唯一的 BLUE，其方差 $Var(c'\beta^*)=\sigma^2c'\left(X\Sigma^{-1}X\right)^{-}c$。

定理 3.4.2：$\sigma^{*2}=\dfrac{\left(Y-X\beta^*\right)'\Sigma^{-1}\left(Y-X\beta^*\right)}{n-r}$，$r=rank(X)$ 为 σ^2 的无偏估计。

定理 3.4.3：若假设 $e\sim N(0,\sigma^2\Sigma),\Sigma>0$，则

1. 对任何可估 $c'\beta$，$c'\beta^*\sim N\left(c'\beta,\sigma^2c'(X\Sigma^{-1}X)^{-}c\right)$；

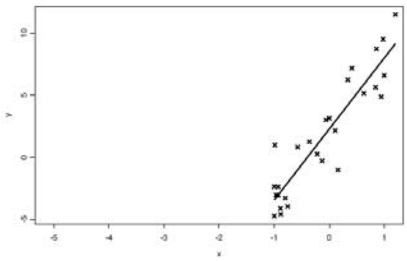
2. $\dfrac{(n-r)\sigma^{*2}}{\sigma^2}\sim\chi^2_{n-r}$ 且 $c'\beta^*$ 与 σ^{*2} 独立；

3. 若 $rank(X_{n\times p})=p$，则 $\beta^*\sim N_p\left(\beta,\sigma^2(X\Sigma^{-1}X)^{-1}\right)$ 且与 σ^{*2} 独立。

3.5 稳健回归与 M-估计

到目前为止，我们对线性模型都采用最小二乘法给出回归系数的参数估计。前面也指出，在误差 $e\sim N(0,\sigma^2I_n)$ 条件下，回归系数的最小二乘估计还是极大似然估计。但也很多证据表明当误差分布偏离正态分布时，最小二乘估计可能不再是有效的估计(估计的方差会偏大)。即便误差正态分布，如果有些异常值影响，最小二乘法都会过于敏感，给出很“坏”的估计。

例 3.5.1:下图显示异常值对线性模型最小二乘估计的影响。



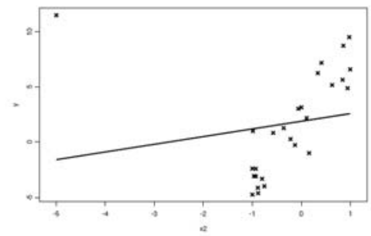


Figure *Data with 27 points and the corresponding least squares regression line (top) and the sensitivity of least squares regression to an outlier in the x-direction (bottom).*

Huber(1964) 首先考虑位置参数的稳健(robust)估计，提出一类现在称为M-估计的估计方法。对线性模型来说，给定一合适的函数$\rho(\cdot)$，考虑最小化问题

$$\min_{\beta}\sum_{i=1}^{n}\rho(y_i - x_i'\beta),$$

上式最小化问题的解$\hat{\beta}_n$，称为回归系数β的M-估计。

注：最小二乘法相当于$\rho(x)=x^2$。

如果，函数ρ的导数$\varphi=\dot{\rho}$处处存在且连续，则M-估计$\hat{\beta}_n$为下面方程的一解

$$\sum_{i=1}^{n}x_i\varphi(y_i - x_i'\beta)=0。$$

注：在一些情况下，导函数$\varphi=\dot{\rho}$不连续或者函数ρ在一些至多可数的点不存在，即$\varphi=\dot{\rho}$除去这些点存在，此时上方程可能无解。此时，M-估计的定义只能回到原始的极值问题。

M-估计的一个常用特例是取L_1范数，对应函数$\rho(x)=|x|$，此时最小化

$$\min_{\beta}\sum_{i=1}^{n}|y_i-x_i'\beta|,$$

其解$\hat{\beta}_n$，称为 least absolute deviation（LAD）估计。研究表明，最小二乘法之所以不稳健是因为$\rho(x)=x^2$，$|\varphi(x)|=|\dot{\rho}(x)|=2|x|$，当$|x|$过大时增长太快，会“放大”异常值的影响。而 LAD 方法是稳健的方法，因为$\rho(x)=|x|$，$|\varphi(x)|=|\dot{\rho}(x)|=1$(在 0 处导数不存在)，增长平缓。

Huber(1964)提出一类函数，现在称为 Huber 函数，设$\varphi=\dot{\rho}$，取

$$\varphi_H(x)=\begin{cases} x & |x|\le k \\ k\,sign(x) & |x|>k \end{cases},$$

此时得到的估计称为 *Huber* 估计。

一些人建议减少异常值影响，当$x\to\pm\infty$时$\varphi(x)\to 0$，由此可取$\varphi(x)=\dfrac{2x}{1+x^2}$。

注：关于M-估计的渐近理论可参见陈希孺，赵林城(1996)，线性模型中的 M 方法，上海科学技术出版社。

3.6*最小二乘统一理论

对线性模型：

$$Y=X\beta+e,\quad Ee=0, Cov(e)=\sigma^2\Sigma(\Sigma\text{已知})$$

若$\Sigma>0$，按照广义最小二乘法，只需求解关于参数β的二次函数$Q(\beta)=(Y-X\beta)'\Sigma^{-1}(Y-X\beta)$的极小值问题；

若$|\Sigma|=0$，此时称为奇异线性模型，由于Σ^{-1}不存在，$Q(\beta)$无定义，若用广义逆Σ^{-}代替Σ^{-1}，把$Q(\beta)$定义为$Q(\beta)=(Y-X\beta)'\Sigma^{-}(Y-X\beta)$，

则由于$Q(\beta)$与广义逆Σ^{-}的选择有关，不同的Σ^{-}，$Q(\beta)$不同，因此极小化$Q(\beta)$无意义。因此对于奇异线性模型，一个核心问题是寻找一个新矩阵 T，能够充当$Q(\beta)$中Σ^{-1}所担负的作用。C.R.Rao 成功的解决了这个问题，他定义

$$T=\Sigma+XUX',\quad \text{其中}U\ge 0,$$

且使得 $rank(T)=rank(\Sigma\vdots X)$，然后令$Q(\beta)=(Y-X\beta)'T^{-}(Y-X\beta)$，$\beta$的估计应选择$\beta_R^*=Arg\min_{\beta}Q(\beta)$。

后面将证明，对于可估函数$c'\beta$，其 BLUE 就是$c'\beta_R^*$。而且此方法适用于设计矩阵X列满秩或不满秩，Σ奇异或非奇异的所有情形，因此此方法和结果称为最小二乘的统一理论。

引理 3.6.1：对本节线性模型，$Y \in \mu(\Sigma \vdots X)$以概率 1 成立。

引理 3.6.2：对上述定义的 T，

1. $\mu(\Sigma \vdots X) = \mu(T)$；

2. $X'T^-X, X'T^-Y$和$Q(\beta)$不依赖广义逆 T^-的选取。

引理 3.6.3：对线性模型，可估函数$c'\beta$的某一个无偏估计$a'Y$为其 BLUE$\Leftrightarrow$对任意0的无偏估计$b'Y$总有$Cov(a'Y, b'Y) = 0$。

注：满足 Rao 定义的 T总是存在的，例如取 $U = k \cdot I_n (k > 0)$ 。特别当 $\Sigma > 0$ 或$\mu(X) \subset \mu(\Sigma)$时，可以取$U = 0$，此时$T = \Sigma$。

极小化 $Q(\beta)$ 得相容性方程$X'T^-X\beta = X'T^-Y$，解$\beta_R^* = \left(X'T^-X\right)^- X'T^-Y$。

定理 3.6.1：对本节线性模型

1. 对任何可估函数$c'\beta$，其 BLUE 为$c'\beta_R^*$；

2. $Var(c'\beta_R^*) = \sigma^2 c'[\left(X'T^-X\right)^- - U]c$；

3. σ^2的无偏估计为

$$\sigma_R^{*^2} = \frac{\left(Y - X\beta_R^*\right)' T^- \left(Y - X\beta_R^*\right)}{q}$$

这里$q = rank(T) - rank(X)$。

最后作为本章结束提一下两步估计方法。当$Cov(e) = \sigma^2 \Sigma(\theta)$，其中$\Sigma(\theta) > 0$含有未知参数 θ，先设法对 θ作估计，得到 $\hat{\theta}$，从而得到$\Sigma(\theta)$的估计$\hat{\Sigma}(\hat{\theta})$，最后用广义最小二乘的思想得到 β的估计$\hat{\beta}(\hat{\theta}) = \left(X'\left[\hat{\Sigma}(\hat{\theta})\right]^{-1} X\right)^- X'\left[\hat{\Sigma}(\hat{\theta})\right]^{-1} Y$。对于可估函数 $c'\beta$，在一定条件下$c'\hat{\beta}(\hat{\theta})$为 $c'\beta$的无偏估计。