ガウスマルコフの定理の証明

係数 $\boldsymbol{\beta}\,(K\times 1)$ のベクトル $\mathbf{y}\,(N\times 1)$ に関して線形な任意の推定量 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ は $\tilde{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ と表せる。ここで $\mathbf{C}$ は 任意の $N\times K$ 行列である。最小二乗推定量は $\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\,\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ であるから $\mathbf{C}=\mathbf{X}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$ に相当する。

さらに $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ として線形で不偏な推定量に限定しているので $\mathbf{C}$ は $E[\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}]=\boldsymbol{\beta}$ を満たさないといけない。まず $\mathbf{C}$ がこの条件を満たすためのより具体的な条件を導こう。

$\mathbf{y}=\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$ を $\tilde{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ に代入すると $\tilde{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}+\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}$ となる。さらにこの両辺の期待値をとると $E[\tilde{\boldsymbol{\beta}}]=\boldsymbol{\beta}$ という条件より $\boldsymbol{\beta}=\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ を得る。これより $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ が不偏であるためには $\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}=\mathbf{I}$ とならなければいけないことがわかる。この時 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{\beta}+\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}$ であるので

$$
\begin{aligned}
\mathrm{var}(\tilde{\boldsymbol{\beta}}) &= E(\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}) \\
&= \sigma^2\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{C} \\
&= \sigma^2(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}+\sigma^2[\mathbf{C}^{\mathrm{T}}-(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}][\mathbf{C}^{\mathrm{T}}-(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
$$

を得る。この第 2 項は正値半定符号なの(任意の行列 $\mathbf{A}$ に対して $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ は正値半定符号になる事に注意)のでその対角成分は全て 0 以上。よって証明終わり。