김은영

제3장 중선형회귀모형

3.4.2 제곱합의 분포

1. 확률벡터 y가 정규분포를 따른다는 가정 하에 앞의 이차형식들은 χ^2 분포와 관련이 있음을 보일 수 있다.

[정리 3.2]

$y \sim N_n(\mu,\ V)$

y의 이차형식 $y^t Ay \sim \chi^2\left(rank(AV), \frac{1}{2}\mu^t A\mu\right) \Leftrightarrow AV$: 멱등행렬

여기서, $rank(AV)$: $y^t Ay$의 자유도, $\lambda = \frac{1}{2}\mu^t A\mu$: 비중심모수

$SST = y^t Ty$	$T = I - \frac{1}{n}J$: 멱등행렬
	자유도: $rank(T) = n-1$
$SSR = y^t Ry$	$R = H - \frac{1}{n}J$: 멱등행렬
	자유도: $rank(R) = p-1$
$SSE = y^t Ey$	$E = I - H$: 멱등행렬
	자유도: $rank(E) = n-p$

$$\frac{SST}{\sigma^2} \sim \chi^2\left(n-1,\ \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t\left(I - \frac{1}{n}J\right)X\beta\right)$$

$$\frac{SSE}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-p)$$

$$\frac{SSR}{\sigma^2} \sim \chi^2\left(p-1,\ \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t\left(H - \frac{1}{n}J\right)X\beta\right)$$

▸ $\frac{SST}{\sigma^2}$와 $\frac{SSR}{\sigma^2}$는 비중심 χ^2분포를 따르게 되는데, 만약 $\beta = 0$이라면 비중심모수 λ가 0이 되므로 모두 중심 χ^2분포를 따르게 된다.

[증명]

(1) $\dfrac{SST}{\sigma^2} = y^t \left(\dfrac{I - \frac{1}{n}J}{\sigma^2} \right) y = y^t A y$

$$AV = \frac{I - \frac{1}{n}J}{\sigma^2} \bullet I\sigma^2 = I - \frac{1}{n}J \text{ : 멱등행렬}$$

$$\lambda = \frac{1}{2}\mu^t A \mu = \frac{1}{2}(X\beta)^t \left(\frac{I - \frac{1}{n}J}{\sigma^2} \right) X\beta = \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t \left(I - \frac{1}{n}J \right) X\beta \text{ : 비중심모수}$$

(2) $\dfrac{SSE}{\sigma^2} = y^t \left(\dfrac{I - H}{\sigma^2} \right) y = y^t A y$

$$AV = \frac{I - H}{\sigma^2} \bullet I\sigma^2 = I - H \text{ : 멱등행렬}$$

$$\lambda = \frac{1}{2}\mu^t A \mu = \frac{1}{2}(X\beta)^t \left(\frac{I - H}{\sigma^2} \right) X\beta = \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t (I - H) X\beta$$

$$= \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t \left(I - X\left(X^t X\right)^{-1} X^t \right) X\beta = \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t \left(X^t - X^t X\left(X^t X\right)^{-1} X^t \right) \beta$$

$$= \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t \left(X^t - X^t \right) \beta = 0$$

(3) $\dfrac{SSR}{\sigma^2} = y^t \left(\dfrac{H - \frac{1}{n}J}{\sigma^2} \right) y = y^t A y$

$$AV = \frac{H - \frac{1}{n}J}{\sigma^2} \bullet I\sigma^2 = H - \frac{1}{n}J \text{ : 멱등행렬}$$

$$\lambda = \frac{1}{2}\mu^t A \mu = \frac{1}{2}(X\beta)^t \left(\frac{H - \frac{1}{n}J}{\sigma^2} \right) X\beta = \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t \left(H - \frac{1}{n}J \right) X\beta \text{ : 비중심모수}$$

2. 비중심 χ^2분포의 평균

만약 $Q \sim \chi^2(n, \lambda)$이면, $E(Q) = n + 2\lambda$가 된다.

$$E\left(\frac{SST}{\sigma^2}\right) = (n-1) + 2 \cdot \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t \left(I - \frac{1}{n}J\right) X\beta = (n-1) + \frac{1}{\sigma^2}\beta^t X^t \left(I - \frac{1}{n}J\right) X\beta$$

$$\rightarrow E(SST) = (n-1)\sigma^2 + \beta^t X^t \left(I - \frac{1}{n}J\right) X\beta$$

$$E\left(\frac{SSE}{\sigma^2}\right) = (n-p) + 2 \cdot 0 = (n-p)$$

$$\rightarrow E(SSE) = (n-p)\sigma^2$$

$$E\left(\frac{SSR}{\sigma^2}\right) = (p-1) + 2 \cdot \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t \left(H - \frac{1}{n}J\right) X\beta = (p-1) + \frac{1}{\sigma^2}\beta^t X^t \left(H - \frac{1}{n}J\right) X\beta$$

$$\rightarrow E(SSR) = (n-1)\sigma^2 + \beta^t X^t \left(H - \frac{1}{n}J\right) X\beta$$

3. 확률벡터와 이차형식의 독립성 조건

F비가 F분포를 따르기 위해서는 SSR과 SSE가 서로 독립이라는 사실이 필요하다.

[정리 3.3]

$y \sim N_n(\mu, V)$

(1) 두 이차형식 $y^t Ay$와 $y^t By$는 $AVB = 0$ 또는 $BVA = 0$이면 서로 독립이다.

(2) 이차형식 $y^t Ay$와 y의 선형변환 By는 $BVA = 0$이면 서로 독립이다.

제곱합 SSR과 SSE에 대해서 살펴보면

$$R \cdot (I\sigma^2) \cdot E = \sigma^2\left[\left\{X(X^t X)^{-1} X^t - \frac{1}{n}J\right\}\left\{I - X(X^t X)^{-1} X^t\right\}\right]$$

$$= \sigma^2\left[X(X^t X)^{-1} X^t - X(X^t X)^{-1} X^t - \frac{1}{n}J + \frac{1}{n}JX(X^t X)^{-1} X^t\right] = 0$$

여기서, $JX(X^t X)^{-1} X^t = J$

→ [정리 3.3]에 의해서 제곱합 SSR과 SSE는 서로 독립이다.

< 중선형회귀에서의 분산분석표(ANOVA table) >

요인	제곱합	자유도	평균제곱합	F비
회귀	SSR	$p-1$	$MSR=\dfrac{SSR}{(p-1)}$	$F_0=\dfrac{MSR}{MSE}=\dfrac{SSR/(p-1)}{SSE/(n-p)}$
오차	SSE	$n-p$	$MSE=\dfrac{SSE}{(n-p)}$	
전체	SST	$n-1$		

$$\Rightarrow F_0=\frac{\dfrac{SSR}{\sigma^2}/(p-1)}{\dfrac{SSE}{\sigma^2}/(n-p)}=\frac{MSR}{MSE}\sim F\left(p-1,\ n-p;\ \frac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t\left(H-\frac{1}{n}J\right)X\beta\right)$$

↳ 비중심 F-분포

여기서, $\dfrac{SSR}{\sigma^2}\sim\chi^2(p-1;\lambda)$ $\qquad\lambda=\dfrac{1}{2\sigma^2}\beta^t X^t\left(H-\dfrac{1}{n}J\right)X\beta$

$\dfrac{SSE}{\sigma^2}\sim\chi^2(n-p)$

■ $H_0:\ \beta=0$ 하에서 $F\sim F(p-1,\ n-p)$ ← 중심 F-분포

4. 정규분포의 가정을 사용하지 않고 이차형식의 기댓값을 직접 구할 수 있는 유용한 정리

[정리 3.4]

$y\sim N_n(\mu,\ V)$

y의 이차형식 $y^t Ay$의 기댓값

$$E(y^t Ay)=E[tr(y^t Ay)]=E[tr(Ayy^t)]=tr[E(Ayy^t)]=tr[A\bullet E(yy^t)]=tr[A\bullet(\mu\mu^t+V)]$$

$$=tr[A\mu\mu^t+AV]=tr(A\mu\mu^t)+tr(AV)=tr(\mu^t A\mu)+tr(AV)=\mu^t A\mu+tr(AV)$$

여기서, $Cov(y)=E[(y-\mu)(y-\mu)^t]=E[yy^t-\mu y^t-y\mu^t+\mu\mu^t]$

$$=E(yy^t)-\mu\mu^t=V$$

$$\rightarrow E(yy^t)=\mu\mu^t+V$$

[정리 3.4]를 이용하여 SSR, SSE, SST의 기댓값을 구해보면,

$$E(SSR) = E(y^t Ry) = \mu^t R\mu + tr(RV)$$
$$= \beta^t X^t\left(H - \frac{1}{n}J\right)X\beta + \sigma^2 tr(R) = \beta^t X^t\left(H - \frac{1}{n}J\right)X\beta + \sigma^2 tr\left(H - \frac{1}{n}J\right)$$
$$= \beta^t X^t\left(H - \frac{1}{n}J\right)X\beta + \sigma^2(p-1)$$

$$E(SSE) = E(y^t Ey) = \mu^t E\mu + tr(EV)$$
$$= \beta^t X^t(I-H)X\beta + \sigma^2 tr(E) = \beta^t X^t(I-H)X\beta + \sigma^2 tr(I-H)$$
$$= \beta^t X^t(I-H)X\beta + \sigma^2(n-p)$$

$$E(SST) = E(y^t Ty) = \mu^t T\mu + tr(TV)$$
$$= \beta^t X^t\left(I - \frac{1}{n}J\right)X\beta + \sigma^2 tr(T) = \beta^t X^t\left(I - \frac{1}{n}J\right)X\beta + \sigma^2 tr\left(I - \frac{1}{n}J\right)$$
$$= \beta^t X^t\left(I - \frac{1}{n}J\right)X\beta + \sigma^2(n-1)$$

여기서, $\mu = E(y) = X\beta$, $V = I\sigma^2$