統計科学同演習第 5 回

武山尚生

2020 年 5 月 24 日

問題 1 (1) 線形回帰モデルは，ベクトルと行列を用いて $y = X\beta + \varepsilon$ と表すことができる. これが単回帰モデルの場合，式に現れるベクトル・行列のサイズをすべて答えなさい. ただし，標本サイズを n とする.
y: n 次元ベクトル，　X: $n \times 2$ 型行列，　β: 2 次元ベクトル，　ε: n 次元ベクトル

問題 1 (2) 単回帰モデルについて，最小二乗推定値 $\hat{\beta}$ の各成分を具体的に表しなさい。
単回帰モデルを $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$ とし、$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$ とする。$S(\beta)$ を β_0 で偏微分すると

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \{y_i - \beta_0 + \beta_1 x_i\}^2 \tag{1}$$

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_0} = 0 \tag{2}$$

$$-2\sum_{i=1}^{n} \{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i\} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \{y_i - \beta_1 x_i\} = \beta_0 \tag{4}$$

$$\beta_0 = \bar{y} - \beta_1 \bar{x} \tag{5}$$

次に β_1 を導出する。

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \{y_i - \beta_0 + \beta_1 x_i\}^2 \tag{6}$$

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_1} = 0 \tag{7}$$

$$-2\sum_{i=1}^{n} \{x_i(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))\} = 0 \tag{8}$$

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \left\{x_i y_i - (\bar{y} - \beta_1 \bar{x})x_i - \beta_1 x_i^2\right\} = 0 \tag{9}$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \bar{y} = \beta_1 \sum_{i=1}^{n} (x_i^2 - x_i \bar{x}) \tag{10}$$

これより β_1 は、

$$\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i y_i - \bar{x}\bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \tag{11}$$

$$= \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})\right\}^2}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \tag{12}$$

x, y の共分散 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})\right\}^2$ を $S_x y$、x の分散 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$ を S_{x^2} とすると、$\beta_1 = \frac{S_{xy}}{S_{x^2}}$、$\beta_0 = \bar{y} - \frac{S_{xy}}{S_{x^2}}\bar{x}$ となる。

問題 1 (3) 射影行列 P の固有値は 1 または 0 であることを示しなさい。

射影行列 P の固有値を λ、対応する固有ベクトルを x_λ とする。この時、

$$\lambda P = \lambda x_\lambda \quad (x_\lambda \neq 0) \tag{13}$$

これより、Px_λ 同士の内積は、

$$\langle \lambda x_\lambda, \lambda x_\lambda \rangle = \lambda^2 x_\lambda^T x_\lambda \tag{14}$$

と表せる。内積と転置行列の性質より、

$$\langle x, Ay \rangle = \langle Bx, y \rangle \Leftrightarrow B = A^T \tag{15}$$

が成り立つ。射影行列の定義から $P^2 = P^T$ であるため、

$$\langle Px_\lambda, Px_\lambda \rangle = \langle P^2 x_\lambda, x_\lambda \rangle \tag{16}$$

$$= \langle Px_\lambda, x_\lambda \rangle \tag{17}$$

$$= \lambda x_\lambda^T x_\lambda \tag{18}$$

$x_\lambda \neq 0$ であることから、(14)(18) 式より、

$$(\lambda^2 - \lambda) x_\lambda^T x_\lambda = 0 \tag{19}$$

$$\lambda(\lambda - 1) = 0 \tag{20}$$

$$\lambda = 0, 1 \tag{21}$$

よって、P の固有値は 0 か 1 である。

問題 1 (4) 射影行列 P について、$tr(P) = p + 1$ を示しなさい.

P の固有値を $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ とすると、$tr(P) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$ である。また、$rank(P)$ は P の 0 でない固有値の個数と同じである。P の固有値は 0 か 1 のみであることから、$tr(P) = rank(P)$ である。

次に、$rank(P) = p+1$ であることを示す。$rank(X) < p+1$ と仮定すると、$rank(X^T X) < p+1$ より、$X^T X a = 0$ かつ $a \neq 0$ を満たす a が存在する。しかし、射影行列の定義から $X^T X$ が正則でなければばならないため、$X^T X a = 0$ は $a = 0$ の時となり、矛盾する。

故に $rank(X) = rank(X^T X) = p + 1$ より、$rank(P) = p + 1$ が導かれ $tr(P) = p + 1$ となる。

問題 1 (5) $Var[\hat{e}]$ を計算しなさい.

最小二乗法の仮定より、以下の性質を要請する。

$$E[\varepsilon] = 0 \tag{22}$$
$$E[\varepsilon^T \varepsilon] = \sigma^2 I_n \tag{23}$$

最小二乗法は誤差同士が無相関かつ、誤差の期待値が 0 であること、誤差が誤差分散 σ^2 に従うことを前提としている。残差ベクトル $\hat{e}$ を求めると、

$$\begin{aligned}
\hat{e} &:= y - X\hat{\beta} && (24)\\
&= y - X\beta - X(\hat{\beta} - \beta) && (25)\\
&= e - P(y - X\beta) && (26)\\
&= e - P(y - X\beta) && (27)\\
&= e(I_n - P) && (28)
\end{aligned}$$

これより誤差分散を求めると、

$$\begin{aligned}
Var[\hat{e}] &= E[\hat{e}^T \hat{e}|X] && (29)\\
&= E[e^T (I_n - P)(I_n - P)e|X] && (30)\\
&= E[e^T (I_n - P)e|X] && (31)
\end{aligned}$$

行列の二次形式とトレースの性質より、 $b^T A b = tr(bb^T A)$ である。よって、

$$E[e^T (I_n - P)e|X] = E[tr(ee^T (I_n - P))|X] \tag{32}$$

(23) の仮定より、y の標本分散を $tr(ee^T) = \sigma^2 I_n$ とすると、トレースの線形性より、

$$\begin{aligned}
E[tr(ee^T (I_n - P))|X] &= \sigma^2 E[tr(I_n - P)|X] && (33)\\
&= \sigma^2 (n - (p + 1)) && (34)
\end{aligned}$$

と求まる。故に $Var[\hat{e}] = \sigma^2 (n - (p + 1))$ である。