多変量解析 第 10 回: 重回帰モデル **5 重回帰モデル**確率変数ベク

$$\left(\begin{array}{c} Y \\ \boldsymbol{X} \end{array}\right) \sim N\left(\left(\begin{array}{c} \mu_{Y} \\ \boldsymbol{\mu_{X}} \end{array}\right), \left(\begin{array}{cc} \sigma_{Y} & \boldsymbol{\sigma}' \\ \boldsymbol{\sigma} & \boldsymbol{\Sigma_{X}} \end{array}\right)\right)$$

$$Y|X = x \sim N\left(\mu_Y + \sigma' \Sigma_X^{-1}(x - \mu_X), \sigma^2\right)$$

$$\sigma^2 = \sigma_Y - \boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}}^{-1} \boldsymbol{\sigma}$$

$$E(Y|X = x) = \mu_Y + \sigma' \Sigma_X^{-1} (x - \mu_X)$$
$$= \beta_0 + \beta' x$$

:02 PM GMT+9 $=eta_0+eta'x$ である。つまり,XへのYの回帰関数は, $eta_0+eta'x$ である。また,Xを 用いてYを予測することを考えるならば,第8回:重相関係数の講義資料より $\mu_Y + \sigma' \Sigma_{\boldsymbol{X}}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu_X})$ and $\Sigma_{\boldsymbol{X}}$

$$\mu_Y + \boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}_{m{X}}^{-1} (m{x} - m{\mu}_{m{X}})$$

はYの最良線形予測量にX = xを代入したものであることがわかる。つ まり、Y を X = x を用いて予測する際には $\beta_0 + \beta'x$ の形式が良さそう であることがわかる.

X = xを与えたとき、

$$Y = \beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{x} + \epsilon \tag{16}$$

- x & を連想させる。これらのことから、次の重回帰モデルを考える。

ATINO DM GMT+9

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p + \epsilon$$

 6^3 となるようなYと (x_1,\ldots,x_p) の関係が成り立つことである。ただし、 $E(\epsilon) = 0$, $V(\epsilon) = \sigma^2 \, \text{Tb} \, 3^1$.

ここでのる。ただし, こので、ただし, 互いに独立なn 個の標本を $(Y_i, X_{i1}, \dots, X_{ip})'$ $(i=1,\dots,n)$ とする。たし,n>p+1 とする。このとき,重回帰モデルを仮定すると。i=1対して だし、n>p+1とする。このとき、重回帰モデルを仮定すると、 $i=1,\ldots,n$ $Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i$ に対して

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i \tag{17}$$

が成り立つ。ただし、 $\{\epsilon_i\}$ は互いに無相関 $(Cov(\epsilon_i,\epsilon_j)=0,\ i\neq j)$ であ り, $E(\epsilon_i) = 0$, $V(\epsilon_i) = \sigma^2$ である. また, 重回帰モデルでは $\{X_{ij}\}$ を非 確率的変数値として扱うことから、小文字 $\{x_{ij}\}$ を用いた。式 (17) はべ クトルと行列を用いて

と表せる。ここで、
$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$
 (18)
$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$
とすると、式 (18) は、
$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$
 (19)

$$\boldsymbol{X} = \left(\begin{array}{cccc} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{np} \end{array}\right)$$

$$Y = X\beta + \epsilon \tag{19}$$

 $Y = X\beta + \epsilon$ (19) と表せる。ここに、Y を目的変数ベクトル、X を説明変数行列、 β を回帰 所数ベクトル、 ϵ を誤差ベクトルという。また、 $E(\epsilon)=0$ 、 $V(\epsilon)=\sigma^2 I_n$ であることに注意する。ここでの関心は、互いに独立なn 個の標本を用いて、未知パラメータ β を推定することである。そのために トル微分を用いる 6321120@ed.tus.ac.jp-Jul 6

ATINO DM GMT+9

 $^{^{1}\}epsilon$ が正規分布に従うことを仮定していないことに注意しよう.

多変量解析 第 10 回: 重回帰モデル ベクトル ボ ベクトル変数 $oldsymbol{eta}=(eta_1,\dots,eta_p)'$ の実数値関数 $S(oldsymbol{eta})$ のベクトル微分は

$$\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \left(\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_1}, \dots, \frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_p}\right)'$$

$$\bullet \ \frac{\partial \boldsymbol{c}' \boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{c}$$

義される。
$$\frac{\partial \boldsymbol{c}'\boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{c}$$
確認: $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{c} = c_1 \beta_1 + \dots + c_p \beta_p \, \boldsymbol{\sharp} \, \boldsymbol{b}$
$$\frac{\partial \boldsymbol{c}'\boldsymbol{\beta}}{\partial \beta_1} = \frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{c}}{\partial \beta_1} = c_1, \dots, \frac{\partial \boldsymbol{c}'\boldsymbol{\beta}}{\partial \beta_p} = \frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{c}}{\partial \beta_p} = c_p$$
であるから、
$$\frac{\partial \boldsymbol{c}'\boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}_1} = \frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{\beta}_1} = c_1, \dots, \frac{\partial \boldsymbol{c}' \boldsymbol{\beta}}{\partial \beta_p} = c_p$$

$$\frac{\partial \mathbf{c}' \boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \mathbf{c}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = (c_1, \dots, c_p)' = \mathbf{c}$$

$$ullet \ rac{\partial oldsymbol{eta}' oldsymbol{A} oldsymbol{eta}}{\partial oldsymbol{eta}} = \left(oldsymbol{A} + oldsymbol{A}'
ight) oldsymbol{eta}$$

確認: $\beta' A \beta = \sum_{i} \sum_{j} a_{ij} \beta_{i} \beta_{j}$ より

M GMT+9

$$\frac{\partial \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{A} \boldsymbol{\beta}}{\partial \beta_k} = \sum_j a_{kj} \beta_j + \sum_i a_{ik} \beta_i = (\boldsymbol{a}_k + \boldsymbol{a}_k^t) \boldsymbol{\beta}$$

 $egin{aligned} egin{aligned} egin{aligned} egin{aligned} egin{aligned} rac{\partial oldsymbol{eta}' oldsymbol{A}oldsymbol{eta}}{\partial eta_k} &= \sum_j a_{kj} eta_j + \sum_i a_{ik} eta_i &= (oldsymbol{a}_k + oldsymbol{a}_k^t) oldsymbol{eta} \end{aligned}$ ただし、 $oldsymbol{a}_k & oldsymbol{a}_k^t$ はそれぞれ $oldsymbol{A}^t$ トルである。したがって ある.ただし, $oldsymbol{a}_k$ と $oldsymbol{a}_k^t$ はそれぞれ $oldsymbol{A}$ と $oldsymbol{A}'$ の第k行に対応 ベクトルである.したがって**,**

$$rac{\partial oldsymbol{eta}' oldsymbol{A} oldsymbol{eta}}{\partial oldsymbol{eta}} = \left(egin{array}{c} oldsymbol{a}_1 + oldsymbol{a}_1^t \ dots \ oldsymbol{a}_p + oldsymbol{a}_p^t \end{array}
ight) oldsymbol{eta} = (oldsymbol{A} + oldsymbol{A}') oldsymbol{eta}$$

• もし $m{A}$ が対称行列 ($m{A}=m{A}'$) ならば, $rac{\partial m{eta}'m{A}m{eta}}{\partial m{eta}}=2m{A}m{eta}$

多変量解析 第 10 回:重回帰モデル

βの推定量を**最小 2 乗法** (う、標本 (*Y_i*, *X*す z する.最小 2 乗法は誤差の 2 乗和を最小にするように β を定める方法で ある. $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ とすると、誤差の2乗和は

$$2$$
乗法は誤差の 2 乗和を最小にするように $oldsymbol{eta}$ を定める方法で $(y_1,\dots,y_n)'$ とすると、誤差の 2 乗和は $\epsilon_1^2+\dots+\epsilon_n^2=\epsilon'\epsilon=(y-Xeta)'(y-Xeta)=y'y-y'Xeta-eta'X'y+eta'X'Xeta$, $oldsymbol{eta}$ でベクトル微分すると $rac{\partial\epsilon'\epsilon}{\partialeta}=egin{bmatrix} 読者の演習=-2X'y+2X'Xeta \\ =0$ を満たす $oldsymbol{eta}$ を $oldsymbol{eta}$ とする。これは $oldsymbol{eta}$ に 1 次方程式であり,**正規方程式**(normal equation)と呼ばれ

であるから, βでベクトル微分すると

$$\frac{\partial \epsilon' \epsilon}{\partial \boldsymbol{\beta}} =$$
 読者の演習 $= -2 \boldsymbol{X}' \boldsymbol{y} + 2 \boldsymbol{X}' \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta}$

である.ここで,X'y-X'Xeta=0を満たすetaを \hat{eta} とする.これはetaに 関する連立1次方程式であり、正規方程式 (normal equation) と呼ばれ る. X'X の階数 (ランク) がp+1 ならば X'X は正則行列であるから,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$$

:02 PM GMT+9 ンだ 6, 2023, 12 - Jul 6, 2023, 12 (20) であるから を得る. また、 $\beta = \hat{\beta}$ のとき、誤差の2乗和は最小値に到達する. した がって、βの最小2乗推定量 (leasts squares estimator) は

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{Y} \tag{20}$$

である. $E(\boldsymbol{Y}) = E(\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}) = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + E(\boldsymbol{\epsilon}) = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}$ であるから,

$$E\left(\hat{oldsymbol{eta}}
ight)=E\left((oldsymbol{X}'oldsymbol{X})^{-1}oldsymbol{X}'oldsymbol{Y}
ight)$$
 $=(oldsymbol{X}'oldsymbol{X})^{-1}oldsymbol{X}'oldsymbol{E}(oldsymbol{Y})$ $=(oldsymbol{X}'oldsymbol{X})^{-1}oldsymbol{X}'oldsymbol{X}oldsymbol{eta}$ $=oldsymbol{eta}$ より最小2乗推定量 $\hat{oldsymbol{eta}}$ は $oldsymbol{eta}$ の不偏推定量である.

PM GMT+9

6321120@ed.tus.ac.jp-Jul 6

多変量解析 第 10 回: 重回帰モデル

5.1 **演習問題**問1 行列 P $(X X)^{-1}$ $(X X)^{-1} X'$ 」直交射影行列という。n>p+1と X'X の階数(ランク)がp+1であることを仮定して、式 (19) の X を用いた行列のなかで、直交 射影行列であるものはどれか.次の 🕦 ~ 🛭 のうちから適切なもの を一つ選べ、

(1) X'X

- $(3) X'(X'X)^{-1}X$

式 (20) の β の最小 2 乗推定量 $\hat{\beta}$ を用いて,

$$e_i = Y_i - \hat{Y}_i = Y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \dots + \hat{\beta}_p x_{ip}) \quad (i = 1, \dots, n)$$

:02 PM GMT+9 を残差という。残差ベクトル $e = (e_1, \dots, e_n)'$ を表したものとして $-\beta$ ④ $(I_n - X(X'X)^{-1}X')Y$ 正しいものはどれか.次の①~④のうちから適切なものを一つ選

 $(1) Y - \beta$

 $\mathfrak{G} Y - X\beta$

式 (20) の β の最小 2 乗推定量 $\hat{\beta}$ に対して 問3

PM GMT+9

$$E\left((\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})'(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})\right)$$

はいくらか. 次の ① ~ ④ のうちから最も適切なものを一つ選べ. 023, 12:41:02 PM 3 6321120@ed.tus.ac.jp-Jul 6

 $\bigcirc \beta' X' X \beta$

(3) $\beta'(X'X)^{-1}\beta$

4) 1