3.8 重相関係数

確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ が p 変量正規分布に従うとする．つまり

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix} \sim N\left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}\right)$$

とする．このとき，$\boldsymbol{X}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(2)}$ を与えたとき $\boldsymbol{X}^{(1)}$ の条件付き分布は，

$$\boldsymbol{X}^{(1)} | \boldsymbol{X}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(2)} \sim N\left(\boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}), \boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}\right)$$

であった．ここで，

$$\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)} = \boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{B}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})$$

とおく．ただし，$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}$ である．また，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}$ の第 i 番目の行ベクトルを $\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}$，$\boldsymbol{B}$ の第 i 番目の行ベクトルを $\boldsymbol{\beta}'_{(i)}$ とする．

補足

新しい記号を導入したので，確認しておく．

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}'_{(1)} \\ \boldsymbol{\sigma}'_{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\sigma}'_{(q)} \end{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}'_{(1)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{\sigma}'_{(2)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\sigma}'_{(q)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \end{pmatrix}$$

であるから，$\boldsymbol{\beta}'_{(i)} = \boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}$ であることに注意しよう．

定理 6. 任意のベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ に対して，

$$V(X_i^{(1\cdot 2)}) \leq V(X_i - \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)})$$

ただし，$X_i^{(1\cdot 2)}$ は確率ベクトル $\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)}$ の第 i 番目の成分である．

証明．定理3の証明において，

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_q & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{p-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{pmatrix}$$

とするとき，

$$E\begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\mu}^{(2)} \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{pmatrix}$$

であり，

$$V\begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}^{(1)} \\ \boldsymbol{Y}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}$$

であることを確かめた．このとき，$\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)}$ を $\boldsymbol{Y}^{(1)}$ を用いて表すと

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)} &= \boldsymbol{X}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \boldsymbol{B}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \\ &= \boxed{\text{読者の演習}} \\ &= \boldsymbol{Y}^{(1)} - E(\boldsymbol{Y}^{(1)}) \end{aligned}$$

であることに注意すると，

$$E(\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)}) = E(\boldsymbol{Y}^{(1)} - E(\boldsymbol{Y}^{(1)})) = E(\boldsymbol{Y}^{(1)}) - E(\boldsymbol{Y}^{(1)}) = \boldsymbol{0}$$

であり，

$$\begin{aligned} &E((\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)} - E(\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)}))(\boldsymbol{X}^{(2)} - E(\boldsymbol{X}^{(2)}))') \\ &\quad = E((\boldsymbol{Y}^{(1)} - E(\boldsymbol{Y}^{(1)}))(\boldsymbol{Y}^{(2)} - E(\boldsymbol{Y}^{(2)}))') \\ &\quad = \boldsymbol{O} \end{aligned}$$

である．したがって，

$$\begin{aligned} V(X_i - \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}) &= E((X_i - \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)} - E(X_i - \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}))^2) \\ &= E((X_i - \mu_i - \boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))^2) \\ &= E((X_i - \mu_i - \boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \\ &\qquad + \boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) - \boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))^2) \\ &= E((X_i^{(1\cdot 2)} + (\boldsymbol{\beta}'_{(i)} - \boldsymbol{\alpha}')(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))^2) \\ &= \boxed{\text{読者の演習}} \\ &= V(X_i^{(1\cdot 2)}) + (\boldsymbol{\beta}'_{(i)} - \boldsymbol{\alpha}')\boldsymbol{\Sigma}_{22}(\boldsymbol{\beta}'_{(i)} - \boldsymbol{\alpha}')' \end{aligned}$$

$\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ が正定値（対称）行列なので，右辺第 2 項の二次形式は非負であり，$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta}_{(i)}$ のとき最小値 0 となる． □

定理 6 は，回帰分析に対する重要な示唆を与える．定理 6 の証明の中で，$E(\boldsymbol{X}^{(1\cdot 2)}) = \boldsymbol{0}$ を示した．このことから，$V(X_i^{(1\cdot 2)}) = E((X_i^{(1\cdot 2)})^2)$ である．X_i を $\mu_i + \boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \mu^{(2)})$ で説明（予測）することを考えると，

$$X_i - (\mu_i + \boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \mu^{(2)}))$$

は，その**残差**（residual）と考えることができるから，$E((X_i^{(1\cdot 2)})^2)$ を**平均二乗誤差**（mean squared error）と解釈することができる．定理 6 より，

$$E((X_i^{(1\cdot 2)})^2) = V(X_i^{(1\cdot 2)}) \leq V(X_i - \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}) = V(X_i - \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)} - c)$$

であるから，$\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)} + c$ で与えられる $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の関数の中で，$\boldsymbol{\beta}_{(i)}$ を用いた $\mu_i + \boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \mu^{(2)})$ は X_i の**最良線形予測量**（best linear predictor）であることがわかる．

定理 7. 任意のベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ に対して，

$$Corr(X_i, \boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)}) \geq Corr(X_i, \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)})$$

証明.

$$\begin{aligned}
&Corr(X_i, \boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)}) - Corr(X_i, \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}) \\
&\quad = \frac{E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))}{\sqrt{\sigma_{ii}V(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)})}} - \frac{E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))}{\sqrt{\sigma_{ii}V(\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)})}} \\
&\quad = \frac{E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) - E((X_i - \mu_i)c\boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))}{\sqrt{\sigma_{ii}V(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)})}}
\end{aligned}$$

ただし，c は $V(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)}) = c^2V(\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)})$ を満たす．このとき，

$$\begin{aligned}
V(X_i^{(1\cdot 2)}) &= E((X_i - \mu_i - \boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))^2) \\
&= E((X_i - \mu_i)^2) - 2E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) \\
&\quad + E((\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))^2) \\
&= \sigma_{ii} - 2E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) + V(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)})
\end{aligned}$$

であり，同様にして，

$$\begin{aligned}
V(X_i - c\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}) &= V(X_i - \mu_i - c\boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) \\
&= \sigma_{ii} - 2E((X_i - \mu_i)c\boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) + c^2V(\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)})
\end{aligned}$$

である．定理 6 より，

$$V(X_i^{(1\cdot 2)}) \leq V(X_i - c\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)})$$

であるから，

$$E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) \geq E((X_i - \mu_i)c\boldsymbol{\alpha}'(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}))$$

を得る．したがって，

$$Corr(X_i, \boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)}) - Corr(X_i, \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}) \geq 0$$

□

定義 5. X_i と線形結合 $\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{X}^{(2)}$ の最大相関は，X_i と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の**重相関係数**（multiple correlation coefficient）という．

重相関係数を $\bar{R}_{i\cdot q+1,\ldots,p}$ で表すと，

$$\begin{aligned}
\bar{R}_{i\cdot q+1,\ldots,p} &= \frac{E(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})(X_i - \mu_i))}{\sqrt{\sigma_{ii}}\sqrt{V(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)})}} \\
&= \frac{\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{(i)}}{\sqrt{\sigma_{ii}}\sqrt{\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{(i)}}} \\
&= \sqrt{\frac{\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{(i)}}{\sigma_{ii}}}
\end{aligned}$$

である．

定理 8. 重相関係数 $\bar{R}_{i\cdot q+1,\ldots,p}$ は，0 以上 1 以下の値をとる．

証明. 定理 7 の証明より，

$$\begin{aligned}
V(X_i^{(1\cdot 2)}) &= \sigma_{ii} - 2E((X_i - \mu_i)\boldsymbol{\beta}'_{(i)}(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})) + V(\boldsymbol{\beta}'_{(i)}\boldsymbol{X}^{(2)}) \\
&= \boxed{\text{読者の演習}} \\
&= \sigma_{ii}(1 - \bar{R}_{i\cdot q+1,\ldots,p}^2)
\end{aligned}$$

である．したがって，$V(X_i^{(1\cdot 2)}) \geq 0$ と重相関係数の分子が正定値行列の二次形式であることから $0 \leq \bar{R}_{i\cdot q+1,\ldots,p} \leq 1$ を得る． □

3.9 演習問題

問 1 $\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2}$ の (i,i) 成分 $\sigma_{ii\cdot q+1,\dots,p}$ を偏分散と呼んだ．$\sigma_{ii\cdot q+1,\dots,p}$ を $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ の (i,i) 成分 σ_{ii}，$\boldsymbol{\sigma}_{(i)}$，$\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ を用いて表すと（ア）である．文中の（ア）に当てはまるものとして，次の ① 〜 ④ のうちから適切なものを一つ選べ． $\boxed{\mathbf{1}}$

① $\sigma_{ii} + \boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{(i)}$　② $\sigma_{ii} + \boldsymbol{\sigma}_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}$

③ $\sigma_{ii} - \boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{(i)}$　④ $\sigma_{ii} - \boldsymbol{\sigma}_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}$

問 2 $V(X_i) - V(X_i^{(1\cdot 2)}) = 0$ となる条件として，間違っているものはどれか．次の ① 〜 ④ のうちから適切なものを一つ選べ． $\boxed{\mathbf{2}}$

① $\bar{R}^2_{i\cdot q+1,\dots,p} = 0$　② $\boldsymbol{\sigma}'_{(i)}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{(i)} = 0$

③ $\boldsymbol{\sigma}_{(i)} = \mathbf{0}$　④ $\bar{R}^2_{i\cdot q+1,\dots,p} = 1$

問 3 確率ベクトル $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, X_3)'$ が平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$，共分散行列

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0.4 & 0.8 \\ 0.4 & 4 & 0.4 \\ 0.8 & 0.4 & 4 \end{pmatrix}$$

の 3 変量正規分布に従うとする．$\boldsymbol{X}^{(2)} = (X_2, X_3)'$ とする．X_1 と $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の重相関係数の 2 乗 $\bar{R}^2_{1\cdot 2,3}$ 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． $\boxed{\mathbf{3}}$

① 0.19　② 0.24　③ 0.29　④ 0.34