$(X, Y)'$ が pdf $f(x, y)$ をもつとする．このとき，$X = x$ を与えたときの条件付き期待値

$$E(Y|X = x) = \int y f(y|x) dy$$

を x の関数とみて $g(x) = E(Y|X = x)$ とする．この $g(x)$ を X への Y の回帰関数という．一般に，$(\boldsymbol{X}^{(1)\prime}, \boldsymbol{X}^{(2)\prime})'$ が pdf $f(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})$ をもつとする．このとき，$\boldsymbol{X}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(1)}$ を与えたときの条件付き期待値

$$E(\boldsymbol{X}^{(2)}|\boldsymbol{X}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(1)})$$

を $\boldsymbol{x}^{(1)}$ の関数とみて $g(\boldsymbol{x}^{(1)}) = E(\boldsymbol{X}^{(2)}|\boldsymbol{X}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(1)})$ とする．この $g(\boldsymbol{x}^{(1)})$ を $\boldsymbol{X}^{(1)}$ への $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の回帰関数という．

まず，2 変量正規分布の場合について回帰関数を考える．

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \sim N\left(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}\right)$$

とする．このとき，$X = x$ を与えたとき Y の条件付き分布は，

$$Y|X = x \sim N\left(\mu_2 + \rho\frac{\sigma_2}{\sigma_1}(x - \mu_1), \sigma_2^2(1 - \rho^2)\right) \tag{9}$$

であるから，X への Y の回帰関数は，

$$g(x) = \rho\frac{\sigma_2}{\sigma_1}x + \mu_2 - \rho\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\mu_1$$

である．$y = g(x)$ とすれば，2 次元平面における直線の方程式である．

次に，p 変量正規分布の場合について回帰関数を考える．

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

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

$$\boldsymbol{X}^{(2)}|\boldsymbol{X}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(1)} \sim N\left(\boldsymbol{\mu}^{(2)} + \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)}), \boldsymbol{\Sigma}_{22\cdot1}\right)$$

であるから，$\boldsymbol{X}^{(1)}$ への $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の回帰関数は，

$$g(\boldsymbol{x}^{(1)}) = \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{x}^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)} - \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\mu}^{(1)}$$

である．ただし，

$$\boldsymbol{\Sigma}_{22\cdot1} = \boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}$$

である．

定義 3. 行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}$ は $\boldsymbol{x}^{(2)}$ への $\boldsymbol{X}^{(1)}$ の**回帰係数の行列**（matrix of regression coefficient）である．

同様に，行列 $\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}$ は $\boldsymbol{x}^{(1)}$ への $\boldsymbol{X}^{(2)}$ の回帰係数の行列である．

定義 4. $X_{q+1},\ldots,X_p$ を与えたときの X_i と X_j の**偏相関係数**（partial correlation coefficient）は，

$$\rho_{ij\cdot q+1,\ldots,p} = \frac{\sigma_{ij\cdot q+1,\ldots,p}}{\sqrt{\sigma_{ii\cdot q+1,\ldots,p}}\sqrt{\sigma_{jj\cdot q+1,\ldots,p}}}$$

である．ただし，

$$\boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2} = \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$$

の (i,j) 要素を $\sigma_{ij\cdot q+1,\ldots,p}$ とかき**偏共分散**（partial covariance）とよび，特に $\sigma_{ii\cdot q+1,\ldots,p}$ を**偏分散**（partial variance）という．

単相関係数

共分散行列が

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \cdots & \sigma_{pp} \end{pmatrix}$$

で与えられるとき，$Cov(X_i,X_j)=\sigma_{ij}$，$V(X_i)=\sigma_{ii}$ である．このとき，$V(X_i)=\sigma_i^2$ と表し，単相関係数[a]を

$$\rho_{ij} = \frac{Cov(X_i,X_j)}{\sqrt{V(X_i)}\sqrt{V(X_j)}} = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_i\sigma_j}$$

とすると，

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & \rho_{1p}\sigma_1\sigma_p \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{p1}\sigma_p\sigma_1 & \cdots & \sigma_p^2 \end{pmatrix}$$

とも表せる．

[a] この後に学ぶ重相関係数と対比して単相関係数と呼ぶ．

単相関係数 ρ_{ij} は -1 以上 1 以下の値を取り[1]，$\rho_{ij}=0$ は X_i と X_j が無相関であることと同値である．また，X_i と X_j が独立ならば，$\rho_{ij}=0$ であるが，一般にその逆は成り立たない．しかし，$\boldsymbol{X}$ が p 変量正規分布に従う場合には，X_i と X_j の（単）相関係数が 0 であることと X_i と X_j が独立であることは同値である（定理 2 参照）．

偏相関係数を単相関係数を用いて表すことを考える．

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \sim N\left(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \right)$$

とする．このとき，

$$\rho_{12\cdot 3} = \frac{\sigma_{12\cdot 3}}{\sqrt{\sigma_{11\cdot 3}}\sqrt{\sigma_{22\cdot 3}}} = \frac{\rho_{12}-\rho_{13}\rho_{23}}{\sqrt{1-\rho_{13}^2}\sqrt{1-\rho_{23}^2}}$$

であることを確認しよう．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}_{11\cdot 2} &= \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix} - \frac{1}{\sigma_{33}} \begin{pmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{pmatrix} (\sigma_{31}, \sigma_{32}) \\ &= \boxed{\text{読者の演習}} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_1^2(1-\rho_{13}^2) & \sigma_1\sigma_2(\rho_{12}-\rho_{13}\rho_{23}) \\ \sigma_1\sigma_2(\rho_{12}-\rho_{13}\rho_{23}) & \sigma_2^2(1-\rho_{23}^2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

以上から，

$$\begin{aligned} \rho_{12\cdot 3} &= \frac{\sigma_1\sigma_2(\rho_{12}-\rho_{13}\rho_{23})}{\sqrt{\sigma_1^2(1-\rho_{13}^2)}\sqrt{\sigma_2^2(1-\rho_{23}^2)}} \\ &= \frac{\rho_{12}-\rho_{13}\rho_{23}}{\sqrt{1-\rho_{13}^2}\sqrt{1-\rho_{23}^2}} \end{aligned}$$

定理 5.

$$\rho_{ij\cdot q+1,\ldots,p} = \frac{\rho_{ij\cdot q+2,\ldots,p} - \rho_{i,q+1\cdot q+2,\ldots,p}\,\rho_{j,q+1\cdot q+2,\ldots,p}}{\sqrt{1-\rho_{i,q+1\cdot q+2,\ldots,p}^2}\sqrt{1-\rho_{j,q+1\cdot q+2,\ldots,p}^2}}$$

定理 5 より，単相関係数 $\{\rho_{ij}\}$ を用いて，再帰的に $\{\rho_{ij\cdot p}\}$，$\{\rho_{ij\cdot p-1,p}\}$，…，$\rho_{12\cdot 3,\ldots,p}$ を計算することができる．

[1] 一般に単相関係数 ρ_{ij} は，-1 以上 1 以下の値をとる．p 変量正規分布を考える場合には，共分散行列が正定値対称行列でなければならないため $-1<\rho_{ij}<1$ とする．退化正規分布を含めて正規分布を定義する場合には $-1\le\rho_{ij}\le 1$ で良い．

3.7 演習問題

問 1 $(X, Y)'$ が平均ベクトル $(0, 1)'$，共分散行列

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

の 2 変量正規分布に従うとする．このとき，X への Y の回帰関数として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べ． $\boxed{\mathbf{1}}$

① $\dfrac{1}{4}x - 1$　② $\dfrac{1}{4}x - \dfrac{1}{2}$

③ $\dfrac{1}{2}x + 1$　④ $x + 1$

問 2 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．X_3 を与えたときの，X_1 と X_2 の偏相関係数 $\rho_{12\cdot 3}$ 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． $\boxed{\mathbf{2}}$

① 0.12　② 0.18　③ 0.21　④ 0.38

問3 以下の文章は，式(9)に関連する文章であり，T. W. Andersonの *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis, 2nd edition* のp.37からの引用である[2].

> The mean of this conditional distribution increases with x when ρ is positive and decreases with x when ρ is negative. It may be noted that when $\sigma_1 = \sigma_2$, for example, the mean of the conditional distribution of Y does not increase relative to μ_2 as much as x increases relative to μ_1. [Galton (1889) observed that the average heights of sons whose fathers' heights were above average tended to be less than the fathers' heights; he called this effect "regression towards mediocrity."]

この文章から読み取れることとして，次の①～④のうちから最も適切なものを一つ選べ. $\boxed{\textbf{3}}$

① $\rho > 0$ のとき，x とともに条件付き期待値 $E(Y|X=x)$ は減少する.

② $\rho < 0$ のとき，x とともに条件付き期待値 $E(Y|X=x)$ は増加する.

③ $\sigma_1 = \sigma_2$ のとき，$x - \mu_1 = k > 0$ とすると $E(Y|X=x) - \mu_2$ は k より小さくなる.

④ 父親の身長が（父親の）平均身長より高いとき，その息子の身長は父親の身長よりも必ず大きくなる.

[2]使用している記号に若干の変更あり