

多変量ゼミ § 1.11 回帰係数の推定と検定(重回帰の場合)

高見澤 真央

ここでは、単回帰の流れをもとに、重回帰における回帰係数 \hat{a}_j や定数項 \hat{a}_0 の確率分布、母集団での \hat{a}_0, \hat{a}_j の信頼区間、検定について考える。

おおまかな流れとして、

(1) 重回帰モデルの回帰係数 \hat{a}_j と定数項 \hat{a}_0 の推定値から、期待値や分散を計算する

(2) (1)で得られた結果から、信頼区間を求め、検定を行う

(3) 回帰の有意性の検定問題を考える

このように進めていく。

1. 回帰係数の推定と検定(重回帰の場合)

1.1. 回帰係数 \hat{a}_j および定数項 \hat{a}_0 の推定値とその期待値、分散

説明変数の数を p として、母集団において次のような回帰モデルが成り立つと仮定する。

$$y_i = a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} + e_i, \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \quad (1)$$

ここで、 $(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{pi})$ は調査により指定される指定変数、 e_i は独立な確率変数で、正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従うものとする。標本のデータ $(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{pi})$, $i = 1, 2, \cdots, n$ (i は標本の個数を表す)を得たとき、これにもとづく回帰係数 \hat{a}_j は、次のように表される。(§ 1.5 線形重回帰の範囲より)

$$\hat{a}_j = \frac{\begin{matrix} j\text{列} \\ \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{y1} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{y2} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{yp} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix} \end{matrix}}{\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix}}, \quad (j = 1, 2, \cdots, p) \quad (2)$$

式(2)の分母は、分散共分散行列の行列式で、分子は、分母の行列式の j 列を s_{yj} で置き換えたもの。

$x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{pi}$ の分散共分散行列を次のように定義できる

$$V = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1l} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2l} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{j1} & s_{j2} & \cdots & s_{jl} & \cdots & s_{jp} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pl} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix} \quad (3)$$

ただし、

$$s_{jl} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j)(x_{li} - \bar{x}_l), \quad j, l = 1, 2, \cdots, p$$

式(2)の分子の行列式に対し j 列目に関して余因子展開を行い、式(2)を変換する。

余因子展開とは・・・

$n \geq 2$ とする。 n 次正方行列 $V = [s_{jl}]$ の第 j 行と第 l 列を取り除いてできる $n-1$ 次正方行列の行列式を $(-1)^{j+l}$ 倍した数

$$(-1)^{j+l} \begin{vmatrix} s_{11} & \cdots & s_{1l} & \cdots & s_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{j1} & \cdots & s_{jl} & \cdots & s_{jn} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{n1} & \cdots & s_{nl} & \cdots & s_{nn} \end{vmatrix} \leftarrow \begin{array}{l} \text{第 } l \text{ 列を除く} \\ \text{第 } j \text{ 行を除く} \end{array}$$

これを、 V の (j, l) の余因子といい、 V_{jl} で表す。

さらに、 n 次正方行列 $V = [s_{jl}]$ に対して、行列式は次のような展開が可能である。

余因子展開

$$(1) \quad |V| = s_{j1}V_{j1} + s_{j2}V_{j2} + \cdots + s_{jn}V_{jn} \quad (\text{第 } j \text{ 行に関する展開})$$

$$(2) \quad |V| = s_{1l}V_{1l} + s_{2l}V_{2l} + \cdots + s_{nl}V_{nl} \quad (\text{第 } l \text{ 行に関する展開})$$

この変換を余因子展開という。

(3)の分散共分散行列の行列式を $|V|$ 、その j 行と l 列の余因子を V_{jl} とする。 V_{jl} は次のようになる。

$$V_{jl} = \begin{vmatrix} s_{11} & \cdots & s_{1(l-1)} & s_{1(l+1)} & \cdots & s_{1p} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{(j-1)1} & \cdots & s_{(j-1)(l-1)} & s_{(j-1)(l+1)} & \cdots & s_{(j-1)p} \\ s_{(j+1)1} & \cdots & s_{(j+1)(l-1)} & s_{(j+1)(l+1)} & \cdots & s_{(j+1)p} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & \cdots & s_{p2} & s_{p(l+1)} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix} (-1)^{i+j}$$

式(2)の分子の行列式は、第 j 列に関して次のように余因子展開できる。

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1j} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2j} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pj} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix} = s_{y1}V_{1j} + s_{y2}V_{2j} + \cdots + s_{yp}V_{pj}$$

よって、式(2)は次のように表せる。

$$\hat{a}_j = \frac{s_{y1}V_{1j} + s_{y2}V_{2j} + \cdots + s_{yp}V_{pj}}{|V|} \quad (4)$$

ここで、 V の逆行列の (j, l) 要素を s^{jl} と表せば、逆転公式より、次の関係が成り立つ。

$$\frac{V_{lj}}{|V|} = s^{jl} \quad (5)$$

逆転公式とは・・・

n 次正方行列 $V = [s_{jl}]$ における (j, l) の余因子 V_{jl} を (j, l) 成分にもつ n 次正方行列の転置行列を、 V の余因子行列といい、 \tilde{V} で表す。すなわち、

$$\tilde{V} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & V_{1n} \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & V_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n1} & V_{n2} & \cdots & V_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{21} & \cdots & V_{n1} \\ V_{12} & V_{22} & \cdots & V_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{1n} & V_{2n} & \cdots & V_{nn} \end{bmatrix}$$

このとき、 V が正則ならば、次の関係が成り立つ。

逆転公式

$$V^{-1} = \frac{1}{|V|} \tilde{V}$$

これを、逆転公式という。 V^{-1} は、正方行列 V の逆行列。

なお、両辺の行列の要素ごとの関係は次のようになる。

$$s^{jl} = \frac{1}{|V|} V_{lj}$$

ここで、 s^{jl} は逆行列 V^{-1} の (j, l) 成分である。余因子行列を求める過程で、行列を転置させるため、対応する要素の行と列が反転する。

(5)の関係から、式(4)は次のように変換できる。

$$\begin{aligned} \hat{a}_j &= \frac{s_{y1}V_{1j} + s_{y2}V_{2j} + \cdots + s_{yp}V_{pj}}{|V|} \\ &= s^{j1}s_{y1} + s^{j2}s_{y2} + \cdots + s^{jp}s_{yp} \\ &= \sum_{l=1}^p s^{jl}s_{yl} \\ &= \sum_{l=1}^p s^{jl} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(x_{li} - \bar{x}_l) \\ &= \sum_{l=1}^p s^{jl} \frac{1}{n} \left\{ \sum_{i=1}^n (x_{li} - \bar{x}_l)y_i - \bar{y} \sum_{i=1}^n (x_{li} - \bar{x}_l) \right\} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \end{aligned} \quad (6)$$

また、定数項 \hat{a}_0 は、次のように変換できる。

$$\begin{aligned} \hat{a}_0 &= \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \hat{a}_2\bar{x}_2 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) \quad (\S 1.5 \text{ 線形重回帰の範囲より}) \\ &= \bar{y} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j\bar{x}_j \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \bar{x}_j \quad (\text{式(6)より}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ 1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\bar{x}_j \right\} y_i \end{aligned} \quad (7)$$

したがって、 \hat{a}_j, \hat{a}_0 は正規分布に従う変数 $y_i, i = 1, 2, \dots, n$ の1次式で表されることがわかる。
これより、回帰係数 \hat{a}_j および定数項 \hat{a}_0 の期待値と分散、共分散を求めると次のようになる。

$$E(\hat{a}_j) = a_j, \quad (j = 1, 2, \dots, p) \quad (8)$$

$$V(\hat{a}_j) = \frac{s^{jj}\sigma^2}{n}, \quad (j = 1, 2, \dots, p) \quad (9)$$

$$\text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n}, \quad (j \neq l, j = 1, 2, \dots, p) \quad (10)$$

$$E(\hat{a}_0) = a_0 \quad (11)$$

$$V(\hat{a}_0) = \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \frac{\bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}}{n} \right) \sigma^2 \quad (12)$$

$$\text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) = - \sum_{l=1}^p \frac{\bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n}, \quad (j = 1, 2, \dots, p) \quad (13)$$

式(8), 式(11)より、 $\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p$ は母集団における値 a_0, a_1, \dots, a_p に対して不偏推定値になっていることがいえる。

期待値と分散、共分散を求める過程は、長くなるため2.1.にまとめて示す。

1.2. 回帰係数および定数項の信頼区間と検定

単回帰のときと同様に

$$u = \frac{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)}{\sqrt{V(\hat{a}_j)}}, \quad (j = 0, 1, 2, \dots, p)$$

このように標準化することで、 u は標準正規分布 $N(0,1)$ に従う。

このとき、分母に含まれる未知の誤差分散 σ^2 を不偏推定値

$$V_e = \frac{F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)}{n - p - 1} \quad (14)$$

で置き換えて得られる統計量は、1.1.で求めた期待値と分散(式(8),(9),(11),(12))を用いて、

$$t = \frac{\hat{a}_j - a_j}{\sqrt{\frac{s^{jj} V_e}{n}}}, \quad (j = 1, 2, \dots, p) \quad (15)$$

$$t = \frac{\hat{a}_0 - a_0}{\sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right) \frac{V_e}{n}}} \quad (16)$$

となる。これらは、いずれも自由度 $n - p - 1$ の t 分布に従う。

式(14)の V_e が、誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることの証明は、2.3.で行う。

また、式(14)右辺の分子の $F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)$ は、次のような変換できる。

$$\begin{aligned} F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p) &= \sum_{i=1}^n \{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \dots + \hat{a}_p x_{pi})\}^2 \quad (\S 1.5 \text{ 線形重回帰の範囲より}) \\ &= n \left(s_{yy} - \sum_{j=1}^p s_{yj} \hat{a}_j \right) \end{aligned} \quad (17)$$

※この変換によって、式(17)の簡潔な表現になるが、導出まではそこそこ複雑。導出過程は 2.2. に示す。

ここから、 \hat{a}_j, \hat{a}_0 の信頼区間および仮説 $H_0: a_j = a_j^{(0)}$ あるいは $H_0: a_0 = a_0^{(0)}$ の検定($a_j^{(0)}, a_0^{(0)}$ は与えられた値)は次のようになる。

信頼区間は、平均して 100 回中 $100(1 - \alpha)$ 回 母集団の a_0, a_j を含むことが保証された範囲のこと。

● $a_j, j = 1, 2, \dots, p$ の信頼率 $1 - \alpha$ の信頼区間：

$$\hat{a}_j - t_\alpha(n - p - 1) \sqrt{\frac{s^{jj} V_e}{n}} \leq a_j \leq \hat{a}_j + t_\alpha(n - p - 1) \sqrt{\frac{s^{jj} V_e}{n}} \quad (18)$$

● a_0 の信頼率 $1 - \alpha$ の信頼区間：

$$\hat{a}_0 - t_\alpha(n - p - 1) \sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right) \frac{V_e}{n}} \leq a_0 \leq \hat{a}_0 + t_\alpha(n - p - 1) \sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right) \frac{V_e}{n}} \quad (19)$$

● 仮説 $H_0: a_j = a_j^{(0)}$ の検定($j = 1, 2, \dots, p$)：

$$|t| = \frac{|\hat{a}_j - a_j^{(0)}|}{\sqrt{\frac{s^{jj} V_e}{n}}} \geq t_\alpha(n - p - 1) \quad (20)$$

ならば、危険率 α で仮説を棄却し、不等号の向きが逆ならば、仮説を採択する。

● 仮説 $H_0: a_0 = a_0^{(0)}$ の検定：

$$|t| = \frac{|\hat{a}_0 - a_0^{(0)}|}{\sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right) \frac{V_e}{n}}} \geq t_\alpha(n - p - 1) \quad (21)$$

ならば、危険率 α で仮説を棄却し、不等号の向きが逆ならば、仮説を採択する。

1.3. 回帰の有意性の検定

ここでは、回帰の有意性、言いかえると、とりあげた説明変数 x_1, \dots, x_p が全体として y の予測に役立つのかについて検定を考える。そのため、観測値 y_i の変動(平方和)を回帰による変動とそれ以外に分解していく。

まず、予測値 Y_i は指定変数の組 $(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{pi})$ に対して、

$$Y_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \dots + \hat{a}_p x_{pi} \quad (22)$$

このように計算される。

観測値 y_i の変動(平方和)は,

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

で表され, 次のように分解される.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 &= \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2 \\ &\left(\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i + \sum_{i=1}^n e_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i = \bar{Y} \quad \text{よ り} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i + Y_i - \bar{Y})^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2 + \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 + 2 \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)(Y_i - \bar{Y}) \end{aligned} \quad (23)$$

式(23)の第3項について,

$$\begin{aligned} 2 \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)(Y_i - \bar{Y}) &= 2 \sum_{i=1}^n [\{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} \\ &\quad \{\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi} - \bar{Y}\}] \\ &= 2\hat{a}_0 \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} \\ &\quad + 2\hat{a}_1 \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} x_{1i} \\ &\quad + \cdots \\ &\quad + 2\hat{a}_p \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} x_{pi} \\ &\quad - 2\bar{Y} \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} \end{aligned} \quad (24)$$

§ 1.5 線形重回帰の範囲で, 次の関係が成り立つことがわかっている.

$$\begin{aligned} (0) \quad & \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} = 0 \\ (1) \quad & \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} x_{1i} = 0 \\ & \vdots \\ (j) \quad & \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} x_{ji} = 0 \\ & \vdots \\ (p) \quad & \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} x_{pi} = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

これによって、式(24)は、

$$2 \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)(Y_i - \bar{Y}) = 0 \quad (26)$$

これより、式(23)は、

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2 \quad (27)$$

全変動(S_T) 回帰による変動(S_R) 回帰からの残差変動(S_e)

このとき、左辺と全変動(S_T)する。右辺の第1項 S_R は回帰式にもとづく予測値 Y_i の変動、第2項 S_e は残差(残差=観測値-予測値)の変動である。前者は、全変動うち回帰によって説明される部分で、後者は説明されない部分にあたる。

とりあげた説明変数 x_1, \dots, x_p が y の予測に有効であるとすれば、 S_R が大きく(全変動(S_T)は説明変数のとりかたに依存せず一定であるから、 S_e は小さく)、逆に無効であるとすれば、 S_R は小さく(S_e は大きく)なると期待される。

ここで、

$$R^2 = \frac{S_R}{S_T} = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (28)$$

とおけば、 R^2 は全体の変動のうち回帰によって説明される部分の大きさの割合を表し、その意味から決定係数(coefficient of determination)あるいは寄与率と呼ばれる。また、 S_e は最小化された予測誤差の平方和 $F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)$ に等しい。

§ 1.7 重相関係数の範囲より、重相関係数は、次のように表せる。

$$r_{y \cdot 12 \dots p} = \frac{s_{yY}}{\sqrt{s_{yy}s_{YY}}}$$

重相関係数を2乗すると、

$$r_{y \cdot 12 \dots p}^2 = \frac{(s_{yY})^2}{s_{yy}s_{YY}} \quad (29)$$

このとき、

$$\begin{aligned} s_{yY} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(Y_i - \bar{Y}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i + Y_i - \bar{Y})(Y_i - \bar{Y}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (e_i + Y_i - \bar{Y})(Y_i - \bar{Y}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i(Y_i - \bar{Y}) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 \end{aligned} \quad (30)$$

式(30)の第1項について

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i (Y_i - \bar{Y}) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i Y_i - \frac{\bar{Y}}{n} \sum_{i=1}^n e_i \quad (\text{ここで } \sum_{i=1}^n e_i = 0) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi}) \\
 &= \frac{\hat{a}_0}{n} \sum_{i=1}^n e_i + \frac{\hat{a}_1}{n} \sum_{i=1}^n e_i x_{1i} + \cdots + \frac{\hat{a}_p}{n} \sum_{i=1}^n e_i x_{pi} \\
 &= 0 \quad (\text{式(25)より})
 \end{aligned}$$

よって、式(30)は、

$$\begin{aligned}
 s_{yY} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 \\
 &= s_{YY}
 \end{aligned} \tag{31}$$

このような関係が成り立つ。

式(31)を用いて、式(29)を変換すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}
 r_{y \cdot 12 \cdots p}^2 &= \frac{(s_{yY})^2}{s_{yy} s_{YY}} \tag{29} \\
 &= \frac{(s_{YY})^2}{s_{yy} s_{YY}} \quad \text{再掲} \\
 &= \frac{s_{YY}}{s_{yy}} \\
 &= \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \\
 &= R^2 \tag{32}
 \end{aligned}$$

式(30)より、寄与率 R^2 は、重相関係数 $r_{y \cdot 12 \cdots p}$ の2乗に等しいことがわかる。

モデルが適合しているとき、 $\sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2 / \sigma^2$ は自由度 $n - p - 1$ のカイ2乗分布に従う。また、とくに説明変数 x_1, \dots, x_p が y の予測に寄与しない、すなわち母集団における回帰係数の値が $a_1 = \cdots = a_p = 0$ のときには、 $\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 / \sigma^2$ も $\sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2 / \sigma^2$ とは独立に自由度 p のカイ2乗分布に従うことが知られている。これより、次のような分散分析表が構成される。

分散分析表

変動要因	平方和	自由度	不偏分散	分散比
回帰による	$S_R = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2$	p	$V_R = \frac{S_R}{p}$	$F_0 = \frac{V_R}{V_e}$
回帰からの	$S_e = \sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2$	$n - p - 1$	$V_e = \frac{S_e}{n - p - 1}$	
全体	$S_T = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$	$n - 1$		

F_0 が普通より大きい、つまり回帰による変動が残差の変動を凌駕していれば、重回帰式は無意味ではない。
この分散分析表において、分散比 F_0 が

$$F_0 \geq F_{n-p-1}^p(\alpha) \quad (33)$$

ならば、仮説 $H_0: a_1 = \dots = a_p = 0$ は危険率 α で棄却され、とりあげた説明変数は全体として y の予測に役立つと結論付けられる。このとき、回帰は有意であるという。

ここで、 $F_{n-p-1}^p(\alpha)$ は自由度 $(p, n-p-1)$ の F 分布の上限 $100\alpha\%$ 点である。複数の係数についての仮説を検定したいときに、 F 検定がよく用いられる。

F 分布とは・・・

2つの確率分布 U, V が次の条件を満たすとする。

- (a) U は自由度 k_1 のカイ2乗分布 $\chi^2(k_1)$ に従う
- (b) V は自由度 k_2 のカイ2乗分布 $\chi^2(k_2)$ に従う
- (c) U, V は独立である。

ここで、 U と V をそれぞれの自由度で割って調整した後にとった比、すなわちフィッシャー分散比を

$$F = \frac{U/k_1}{V/k_2}$$

と定義すると、 F が従う確率分布を自由度 (k_1, k_2) の F 分布といい、 $F_n^{k_1}$ または $F(k_1, k_2)$ と表す。

2. 式変換の補足

2.0. 式変換に用いる δ 関数および統計量

式変換を行うにあたり、 δ 関数を定義し、そこから導ける様々な関係を示す。

$$\delta(j, l) = \begin{cases} 1 & (j = l) \\ 0 & (j \neq l) \end{cases} \quad (34)$$

これを、 δ 関数として定義する。

ここで、 $V = [s_{jl}]$ と $V^{-1} = [s^{jl}]$ と p 次単位行列 I について

$$V^{-1}V = VV^{-1} = I$$

すなわち

$$\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1l} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2l} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{j1} & s_{j2} & \cdots & s_{jl} & \cdots & s_{jp} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pl} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s^{11} & s^{12} & \cdots & s^{1l} & \cdots & s^{1p} \\ s^{21} & s^{22} & \cdots & s^{2l} & \cdots & s^{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s^{j1} & s^{j2} & \cdots & s^{jl} & \cdots & s^{jp} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s^{p1} & s^{p2} & \cdots & s^{pl} & \cdots & s^{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

行番号と列番号が一致するときのみ1をとることから、

$$\sum_{m=1}^p s^{jm} s_{ml} = \sum_{m=1}^p s_{ml} s^{jm} = \delta(j, l) \quad (35)$$

が成り立つ。また、 δ 関数は、定数 b_j , $j = 1, 2, \dots, p$ について、

$$\sum_{l=1}^p b_l \delta(j, l) = b_j \quad (36)$$

が成り立つ。

続いて、 y_i に関する統計量を計算していく。期待値 $E(y_i)$ は、

$$\begin{aligned} E(y_i) &= E(a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} + e_i) && \text{(式(1)より)} \\ &= a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} + E(e_i) && \text{(なお } E(e_i) = 0 \text{)} \\ &= a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} \end{aligned} \quad (37)$$

y_i, y_k の共分散 $\text{Cov}(y_i, y_k)$ は、

$$\begin{aligned} \text{Cov}(y_i, y_k) &= E[\{y_i - E(y_i)\}\{y_k - E(y_k)\}] \\ &= E[\{y_i - (a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi})\}\{y_k - (a_0 + a_1x_{1k} + \cdots + a_px_{pk})\}] \\ &\quad \text{(式(37)より)} \\ &= E[(e_i)(e_k)] \\ &= E[\{e_i - E(e_i)\}\{e_k - E(e_k)\}] && \text{(} E(e_i) = 0 \text{より)} \\ &= \text{Cov}(e_i, e_k) \end{aligned} \quad (38)$$

$\text{Cov}(e_i, e_k)$ について、 e_i, e_k は互いに独立で無相関であるため、

$$\begin{cases} \text{Cov}(e_i, e_k) = 0 & (i \neq k) \\ \text{Cov}(e_i, e_k) = V(e_i) & (i = k) \end{cases}$$

定数 $c_i, i = 1, 2, \dots, n$ とすると、

$$\sum_{k=1}^n c_k \text{Cov}(e_i, e_k) = c_i V(e_i) = c_i \sigma^2 \quad (39)$$

が成り立つ。共分散 $s_{jl}, j, l = 1, 2, \dots, p$ について、

$$s_{jl} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j)(x_{li} - \bar{x}_l) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ji}x_{li} - \bar{x}_j\bar{x}_l \quad (40)$$

が成り立つ。

これらの式を用いて、変換を行っていく

2.1. 期待値と分散，共分散の計算

式(8) $E(\hat{a}_j) = a_j$ の導出

$$\begin{aligned}
 E(\hat{a}_j) &= E\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i\right\} \quad \left(\text{式(6)} \quad \hat{a}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \text{ より}\right) \\
 &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l) E(y_i) \\
 &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l) (a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi}) \\
 &\quad (\text{式(37)} \quad E(y_i) = a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} \text{ より}) \\
 &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l) (a_0 + \sum_{j'=1}^p a_{j'}x_{j'i}) \\
 &= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^p s^{jl}\left\{a_0\sum_{i=1}^p (x_{li} - \bar{x}_l) + \sum_{j'=1}^p a_{j'}\sum_{i=1}^p (x_{li} - \bar{x}_l)x_{j'i}\right\} \\
 &= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^p s^{jl}\sum_{j'=1}^p a_{j'}\sum_{i=1}^p (x_{li}x_{j'i} - \bar{x}_l x_{j'i}) \\
 &= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^p s^{jl}\sum_{j'=1}^p a_{j'}\left(\sum_{i=1}^p x_{li}x_{j'i} - \bar{x}_l\sum_{i=1}^p x_{j'i}\right) \\
 &= \sum_{l=1}^p s^{jl}\sum_{j'=1}^p a_{j'}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^p x_{li}x_{j'i} - \bar{x}_l\bar{x}_{j'}\right) \\
 &= \sum_{l=1}^p s^{jl}\sum_{j'=1}^p a_{j'} s_{lj'} \quad \left(\text{式(40)} \quad s_{jl} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^p x_{ji}x_{li} - \bar{x}_j\bar{x}_l \text{ より}\right) \\
 &= \sum_{j'=1}^p a_{j'}\sum_{l=1}^p s^{jl} s_{lj'} \\
 &= \sum_{j'=1}^p a_{j'}\delta(j, j') \quad \left(\text{式(35)} \quad \sum_{m=1}^p s^{jm}s_{ml} = \delta(j, l) \text{ より}\right) \\
 &= a_j
 \end{aligned}$$

式(10) $\text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n}$ の導出

$$\begin{aligned}
 \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) &= E[\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}\{\hat{a}_l - E(\hat{a}_l)\}] \\
 &= E\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{j'=1}^p s^{jj'}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})y_i - E\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{j'=1}^p s^{jj'}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})y_i\right)\right\}\right. \\
 &\quad \left.\left\{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^n\sum_{l'=1}^p s^{ll'}(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})y_k - E\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^n\sum_{l'=1}^p s^{ll'}(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})y_k\right)\right\}\right] \\
 &\quad (\text{式(6)} \quad \hat{a}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \text{ より})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E \left[\left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j'=1}^p s^{jj'} (x_{j'i} - \bar{x}_{j'}) (y_i - E(y_i)) \right\} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l'=1}^p s^{ll'} (x_{l'k} - \bar{x}_{l'}) (y_k - E(y_k)) \right\} \right] \\
&= E \left[\frac{1}{n^2} \sum_{j'=1}^p \sum_{l'=1}^p s^{jj'} s^{ll'} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p (x_{j'i} - \bar{x}_{j'}) (x_{l'k} - \bar{x}_{l'}) (y_i - E(y_i)) (y_k - E(y_k)) \right] \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{j'=1}^p \sum_{l'=1}^p s^{jj'} s^{ll'} \sum_{i=1}^n \sum_{j'=1}^p (x_{j'i} - \bar{x}_{j'}) (x_{l'k} - \bar{x}_{l'}) E[(y_i - E(y_i)) (y_k - E(y_k))] \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{j'=1}^p \sum_{l'=1}^p s^{jj'} s^{ll'} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p (x_{j'i} - \bar{x}_{j'}) (x_{l'k} - \bar{x}_{l'}) \text{Cov}(y_i, y_k) \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{j'=1}^p \sum_{l'=1}^p s^{jj'} s^{ll'} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p (x_{j'i} - \bar{x}_{j'}) (x_{l'k} - \bar{x}_{l'}) \text{Cov}(e_i, e_k) \\
&\quad (\text{式(38)} \text{ Cov}(y_i, y_k) = \text{Cov}(e_i, e_k) \text{ より}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{j'=1}^p \sum_{l'=1}^p s^{jj'} s^{ll'} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{j'i} - \bar{x}_{j'}) (x_{l'i} - \bar{x}_{l'}) \sigma^2 \\
&\quad (\text{式(39)} \text{ } \sum_{k=1}^n c_k \text{Cov}(e_i, e_k) = c_i \sigma^2 \text{ より}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{j'=1}^p \sum_{l'=1}^p s^{jj'} s^{ll'} s_{j'l'} \sigma^2 \\
&= \frac{1}{n} \sum_{j'=1}^p s^{jj'} \sigma^2 \sum_{l'=1}^p s^{ll'} s_{l'j'} \\
&= \frac{1}{n} \sum_{j'=1}^p s^{jj'} \sigma^2 \delta(l, j') \quad \left(\text{式(35)} \sum_{m=1}^p s^{jm} s_{ml} = \delta(j, l) \text{ より} \right) \\
&= \frac{s^{jl} \sigma^2}{n} \quad \left(\text{式(36)} \sum_{l=1}^p b_l \delta(j, l) = b_j \text{ より} \right)
\end{aligned}$$

式(9) $V(\hat{a}_j) = \frac{s^{jj} \sigma^2}{n}$ の導出

式(10)において j, l が $j = l$ のとき、式(9)となるため、

$$\begin{aligned}
V(\hat{a}_j) &= \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_j) \\
&= \frac{s^{jj} \sigma^2}{n}
\end{aligned}$$

式(10) $E(\hat{a}_0) = a_0$ の導出

$$E(\hat{a}_0) = E(\bar{y} - \hat{a}_1\bar{x}_1 - \cdots - \hat{a}_p\bar{x}_p) \quad (\bar{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_1\bar{x}_1 \text{ より})$$

$$= E\left(\bar{y} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j\bar{x}_j\right)$$

$$= E(\bar{y}) - E\left(\sum_{j=1}^p \hat{a}_j\bar{x}_j\right)$$

$$= E\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i\right) - \sum_{j=1}^p E(\hat{a}_j)\bar{x}_j$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n E(y_i) - \sum_{j=1}^p a_j\bar{x}_j \quad (\text{式(8) } E(\hat{a}_j) = a_j \text{ より})$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi}) - \sum_{j=1}^p a_j\bar{x}_j$$

(式(37) $E(y_i) = a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi}$ より)

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \left(a_0 + \sum_{j=1}^p a_jx_{ji}\right) - \sum_{j=1}^p a_j\bar{x}_j$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n a_0 + \sum_{j=1}^p a_j \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_{ji} - \sum_{j=1}^p a_j\bar{x}_j$$

$$= a_0 + \sum_{j=1}^p a_j\bar{x}_j - \sum_{j=1}^p a_j\bar{x}_j$$

$$= a_0$$

式(12) $V(\hat{a}_0) = \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \frac{\bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}}{n} \right) \sigma^2$ の導出

$$\begin{aligned}
V(\hat{a}_0) &= E \left[(\hat{a}_0 - E(\hat{a}_0))^2 \right] \\
&= E \left[\left\{ \bar{y} - (\hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p \bar{x}_p) - E \left(\bar{y} - (\hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p \bar{x}_p) \right) \right\}^2 \right] \\
&\quad (\bar{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_1 \bar{x}_1 \text{ より}) \\
&= E \left[\left\{ \bar{y} - (\hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p \bar{x}_p) - (E(\bar{y}) - E(\hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p \bar{x}_p)) \right\}^2 \right] \\
&= E \left[\left\{ (\bar{y} - E(\bar{y})) - \left(\sum_{j=1}^p \hat{a}_j \bar{x}_j - \sum_{j=1}^p E(\hat{a}_j \bar{x}_j) \right) \right\}^2 \right] \\
&= E[\{\bar{y} - E(\bar{y})\}^2] - 2E \left[\{\bar{y} - E(\bar{y})\} \left\{ \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \bar{x}_j - \sum_{j=1}^p E(\hat{a}_j \bar{x}_j) \right\} \right] \\
&\quad + E \left[\left\{ \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \bar{x}_j - \sum_{j=1}^p E(\hat{a}_j \bar{x}_j) \right\}^2 \right] \\
&= V(\bar{y}) - 2E \left[\{\bar{y} - E(\bar{y})\} \sum_{j=1}^p \bar{x}_j \{(\hat{a}_j - E(\hat{a}_j))\} \right] + E \left[\left\{ \sum_{j=1}^p \bar{x}_j (\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)) \right\}^2 \right] \\
&= V(\bar{y}) - 2 \sum_{j=1}^p \bar{x}_j E[\{\bar{y} - E(\bar{y})\} \{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] \\
&\quad + E \left[\left\{ \sum_{j=1}^p \bar{x}_j (\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)) \right\} \left\{ \sum_{l=1}^p \bar{x}_l (\hat{a}_l - E(\hat{a}_l)) \right\} \right] \\
&= V(\bar{y}) - 2 \sum_{j=1}^p \bar{x}_j \text{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l E[\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\} \{\hat{a}_l - E(\hat{a}_l)\}] \\
&= V(\bar{y}) - 2 \sum_{j=1}^p \bar{x}_j \text{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) \tag{41}
\end{aligned}$$

式(41)の第1項について

$$\begin{aligned}
V(\bar{y}) &= V \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \right) \\
&= V \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i) \right) \\
&\quad (\text{式(1)} \ y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i \text{ より}) \\
&= V \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n V(e_i) \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sigma^2 \\
&= \frac{1}{n^2} n \sigma^2 \\
&= \frac{\sigma^2}{n}
\end{aligned} \tag{42}$$

また、式(41)の第2項について

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) &= E[\{\bar{y} - E(\bar{y})\}\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] \\
&= E\left[\left(na_0 + a_1\bar{x}_1 + \cdots + a_p\bar{x}_p + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i\right) - E\left(na_0 + a_1\bar{x}_1 + \cdots + a_p\bar{x}_p + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i\right)\right] \\
&\quad \left\{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)y_k - E\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)y_k\right)\right\} \\
&\quad (\text{式(1)} \ y_i = a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} + e_i \text{ より}) \\
&\quad (\text{式(6)} \ \hat{a}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \text{ より}) \\
&= E\left[\left\{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i - E\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i\right)\right\} \left\{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)y_k - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)E(y_k)\right\}\right] \\
&= E\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{e_i - E(e_i)\} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\{y_k - E(y_k)\}\right] \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l) E[\{e_i - E(e_i)\}\{e_k - E(e_k)\}] \\
&\quad (\text{式(38)} \ \text{Cov}(y_i, y_k) = \text{Cov}(e_i, e_k) \text{ より}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l) \text{Cov}(e_i, e_k) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l) \sigma^2 \quad (\text{式(39)} \ \sum_{k=1}^n c_k \text{Cov}(e_i, e_k) = c_i \sigma^2 \text{ より}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^p s^{jl} \sigma^2 \sum_{i=1}^n (x_{li} - \bar{x}_l) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{43}$$

式(41)に式(42)と式(43)を代入して

$$\begin{aligned}
V(\hat{a}_0) &= V(\bar{y}) - 2 \sum_{j=1}^p \bar{x}_j \text{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) \\
&= \frac{\sigma^2}{n} + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l \left(\frac{s^{jl} \sigma^2}{n}\right) \\
&= \frac{\left(1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right) \sigma^2}{n}
\end{aligned}$$

式(13) $\text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) = -\sum_{l=1}^p \frac{\bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n}$ の導出

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) &= E[\{\hat{a}_0 - E(\hat{a}_0)\}\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] \\
&= E[\{(\bar{y} - \hat{a}_1 \bar{x}_1 - \cdots - \hat{a}_p \bar{x}_p) - E(\bar{y}) + E(\hat{a}_1 \bar{x}_1) + \cdots + E(\hat{a}_p \bar{x}_p)\}\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] \\
&\quad (\bar{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_1 \bar{x}_1 \text{ より}) \\
&= E[\{\bar{y} - E(\bar{y})\}\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] - E[\bar{x}_1\{\hat{a}_1 - E(\hat{a}_1)\}\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] \\
&\quad - \cdots - E[\bar{x}_p\{\hat{a}_p - E(\hat{a}_p)\}\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}] \\
&= \text{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) - \bar{x}_1 \text{Cov}(\hat{a}_1, \hat{a}_j) - \cdots - \bar{x}_p \text{Cov}(\hat{a}_p, \hat{a}_j) \\
&= \text{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) - \sum_{l=1}^p \bar{x}_l \text{Cov}(\hat{a}_l, \hat{a}_j) \\
&= -\frac{\sum_{l=1}^p \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n} \\
&\quad (\text{式(43)} \text{ Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) = 0 \text{ より}) \quad (\text{式(10)} \text{ Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl} \sigma^2}{n} \text{ より})
\end{aligned}$$

2.2. 式(17) $F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p) = n(s_{yy} - \sum_{j=1}^p s_{yj} \hat{a}_j)$ の証明

$$\begin{aligned}
F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p) &= \sum_{i=1}^n \{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi})\}^2 \\
&= \sum_{i=1}^n \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\}^2 \\
&\quad (\bar{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_1 \bar{x}_1 \text{ より}) \\
&= \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) \sum_{j=1}^p \hat{a}_j (x_{ji} - \bar{x}_j) \\
&\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \hat{a}_j (x_{ji} - \bar{x}_j) \hat{a}_l (x_{li} - \bar{x}_l)
\end{aligned} \tag{44}$$

このとき、式(44)の第1項は、

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = n s_{yy} \tag{45}$$

式(44)の第2項は、

$$\begin{aligned}
-2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) \sum_{j=1}^p \hat{a}_j (x_{ji} - \bar{x}_j) &= -2 \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) (x_{ji} - \bar{x}_j) \\
&= -2 \sum_{j=1}^p \hat{a}_j n s_{yj}
\end{aligned} \tag{46}$$

式(44)の第3項は,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \hat{a}_j (x_{ji} - \bar{x}_j) \hat{a}_l (x_{li} - \bar{x}_l) &= \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \hat{a}_j \hat{a}_l \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j)(x_{li} - \bar{x}_l) \\
&= \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \hat{a}_j \hat{a}_l n s_{jl} \\
&= \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \hat{a}_j \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{l'=1}^p s^{ll'} (x_{l'i} - \bar{x}_{l'}) y_i \right\} n s_{jl} \\
&\quad (\text{式(6)} \quad \hat{a}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl} (x_{li} - \bar{x}_l) y_i \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \sum_{i=1}^n \sum_{l'=1}^p (x_{l'i} - \bar{x}_{l'}) y_i \sum_{l=1}^p s_{jl} s^{ll'} \\
&= \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \sum_{i=1}^n \sum_{l'=1}^p (x_{l'i} - \bar{x}_{l'}) y_i \delta(j, l') \\
&\quad (\text{式(35)} \quad \sum_{m=1}^p s_{ml} s^{jm} = \delta(j, l) \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j) y_i \\
&\quad (\text{式(36)} \quad \sum_{l=1}^p b_l \delta(j, l) = b_j \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j) \{y_i - (\bar{y} - \bar{y})\} \\
&= \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \left\{ \bar{y} \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j) + \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j) (y_i - \bar{y}) \right\} \\
&= \sum_{j=1}^p \hat{a}_j n s_{yj} \tag{47}
\end{aligned}$$

よって, 式(44)に, 式(45), 式(46), 式(47)を代入して,

$$\begin{aligned}
F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p) &= n s_{yy} - 2 \sum_{j=1}^p \hat{a}_j n s_{yj} + \sum_{j=1}^p \hat{a}_j n s_{yj} \\
&= n \left(s_{yy} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j s_{yj} \right)
\end{aligned}$$

以上で, 式(17)が示された.

2.3. V_e が誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることの証明

式(14) $V_e = \frac{F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)}{n-p-1}$ が誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることを示すため, $F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)$ の期待値を求める.

$$\begin{aligned}
 E[F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)] &= E\left[\sum_{i=1}^n \{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \dots + \hat{a}_p x_{pi})\}^2\right] \\
 &= E\left[\sum_{i=1}^n \{(a_0 - \hat{a}_0) + (a_1 - \hat{a}_1)x_{1i} + \dots + (a_p - \hat{a}_p)x_{pi} + e_i\}^2\right] \\
 &\quad (\text{式(1) } y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + \dots + a_p x_{pi} + e_i \text{ より}) \\
 &= E\left[\sum_{i=1}^n \{(a_0 - \hat{a}_0) + (a_1 - \hat{a}_1)x_{1i} + \dots + (a_p - \hat{a}_p)x_{pi}\}^2\right] \\
 &\quad + 2E\left[\sum_{i=1}^n e_i \{(a_0 - \hat{a}_0) + (a_1 - \hat{a}_1)x_{1i} + \dots + (a_p - \hat{a}_p)x_{pi}\}\right] + E\left(\sum_{i=1}^n e_i^2\right) \\
 &= E\left[\sum_{i=1}^n \left\{ (a_0 - \hat{a}_0)^2 + 2(a_0 - \hat{a}_0) \sum_{j=1}^p (a_j - \hat{a}_j)x_{ji} + \sum_{j=1}^p (a_j - \hat{a}_j)x_{ji} \sum_{l=1}^p (a_l - \hat{a}_l)x_{li} \right\}\right] \\
 &\quad + 2 \sum_{i=1}^n E\left[e_i (a_0 - \hat{a}_0) + e_i \sum_{j=1}^p (a_j - \hat{a}_j)x_{ji}\right] + E\left(\sum_{i=1}^n e_i^2\right) \\
 &= \sum_{i=1}^n E[\{\hat{a}_0 - E(\hat{a}_0)\}^2] + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p E[\{\hat{a}_0 - E(\hat{a}_0)\} E[\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}x_{ji}]] \\
 &\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p E[\{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\} \{\hat{a}_l - E(\hat{a}_l)\}x_{ji}x_{li}] \\
 &\quad - 2 \sum_{i=1}^n E[\{e_i - E(e_i)\} \{\hat{a}_0 - E(\hat{a}_0)\}] \\
 &\quad - 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p E[\{e_i - E(e_i)\} \{\hat{a}_j - E(\hat{a}_j)\}x_{ji}] + E\left(\sum_{i=1}^n e_i^2\right) \\
 &\quad (\text{式(8) } E(\hat{a}_j) = a_j \text{ より}) \quad (\text{式(10) } E(\hat{a}_0) = a_0 \text{ より}) \\
 &= \sum_{i=1}^n V(\hat{a}_0) + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) x_{ji} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) x_{ji}x_{li} \\
 &\quad - 2 \sum_{i=1}^n \text{Cov}(e_i, \hat{a}_0) - 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \text{Cov}(e_i, \hat{a}_j) x_{ji} + E\left(\sum_{i=1}^n e_i^2\right)
 \end{aligned} \tag{48}$$

このとき,

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(e_i, \hat{a}_0) &= E[\{e_i - E(e_i)\}\{\hat{a}_0 - E(\hat{a}_0)\}] \\
&= E[\{e_i - E(e_i)\} \\
&\quad \left\{ \sum_{k=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} y_k - E\left(\sum_{k=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} y_k \right) \right\}] \\
&\quad (\text{式(7)} \quad \hat{a}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\bar{x}_j\} y_i \text{ より}) \\
&= E\left[\{e_i - E(e_i)\} \sum_{k=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} \{y_k - E(y_k)\} \right] \\
&= \sum_{k=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} E[\{e_i - E(e_i)\}\{y_k - E(y_k)\}] \\
&= \sum_{k=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} E[\{e_i - E(e_i)\}\{e_k - E(e_k)\}] \\
&\quad (\text{式(37)} \quad E(y_i) = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} \text{ より}) \\
&= \sum_{k=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} \text{Cov}(e_i, e_k) \\
&= \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} \sigma^2 \\
&\quad (\text{式(39)} \quad \sum_{k=1}^n c_k \text{Cov}(e_i, e_k) = c_i \sigma^2 \text{ より})
\end{aligned} \tag{49}$$

式(49)より, 式(48)の第4項は,

$$\begin{aligned}
-2 \sum_{i=1}^n \text{Cov}(e_i, \hat{a}_0) &= -2 \sum_{i=1}^n \frac{1 - \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} \sigma^2 \\
&= -2 \sum_{i=1}^n \frac{\sigma^2}{n} + 2 \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \frac{s^{jl} \bar{x}_j \sigma^2}{n} \sum_{i=1}^n (x_{li} - \bar{x}_l) \\
&= -2n \frac{\sigma^2}{n} \\
&= -2\sigma^2
\end{aligned} \tag{50}$$

式(49)と同様に,

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(e_i, \hat{a}_j) &= \text{Cov}\left\{ e_i, \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l) y_k \right\} \\
&= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^p s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l) \sigma^2
\end{aligned} \tag{51}$$

ここでの導出過程は, 式(49)の繰り返しになる部分が多いため, 省略する.

式(51)より，式(48)の第 5 項は，

$$\begin{aligned}
-2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \text{Cov}(e_i, \hat{a}_j) x_{ji} &= -\frac{2\sigma^2}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} (x_{li} - \bar{x}_l) x_{ji} \\
&= -\frac{2\sigma^2}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} (x_{li} - \bar{x}_l) \{x_{ji} - (\bar{x}_j - \bar{x}_j)\} \\
&= -\frac{2\sigma^2}{n} \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} \sum_{i=1}^n (x_{li} - \bar{x}_l) (x_{ji} - \bar{x}_j) - \frac{2\sigma^2}{n} \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} \bar{x}_j \sum_{i=1}^n (x_{li} - \bar{x}_l) \\
&= -\frac{2\sigma^2}{n} \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} n s_{lj} \\
&= -2\sigma^2 \sum_{j=1}^p \delta(j, j) \quad (\text{式(35)} \sum_{m=1}^p s_{ml} s^{jm} = \delta(j, l) \text{ より}) \\
&= -2\sigma^2 p
\end{aligned} \tag{52}$$

式(48)の第 1 項は，

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^n V(\hat{a}_0) &= \sum_{i=1}^n \frac{(1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}) \sigma^2}{n} \\
&\quad (\text{式(14)} \ V(\hat{a}_0) = \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \frac{\bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}}{n} \right) \sigma^2 \text{ より}) \\
&= \sigma^2 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2
\end{aligned} \tag{53}$$

式(48)の第 2 項は，

$$\begin{aligned}
2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) x_{ji} &= 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \left(-\frac{\sum_{l=1}^p \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n} x_{ji} \right) \\
&\quad (\text{式(14)} \ \text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) = -\sum_{l=1}^p \frac{\bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n} \text{ より}) \\
&= 2 \sum_{j=1}^p \left(-\sum_{l=1}^p \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2 \right) \sum_{i=1}^n \frac{x_{ji}}{n} \\
&= -2 \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2
\end{aligned} \tag{54}$$

式(48)の第 3 項は，

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) x_{ji} x_{li} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \frac{s^{jl} \sigma^2}{n} x_{ji} x_{li} \tag{55}$$

式(48)の第 6 項は，

$$\begin{aligned}
E \left(\sum_{i=1}^n e_i^2 \right) &= \sum_{i=1}^n E[\{e_i - E(e_i)\}^2] \\
&= \sum_{i=1}^n V(e_i) \\
&= n\sigma^2
\end{aligned} \tag{56}$$

最後に、式(48)に式(50), 式(52), 式(53), 式(54), 式(55), 式(56)を代入して,

$$\begin{aligned}
E[F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)] &= \sum_{i=1}^n V(\hat{a}_0) + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \text{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) x_{ji} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \text{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) x_{ji} x_{li} \\
&\quad - 2 \sum_{i=1}^n \text{Cov}(e_i, \hat{a}_0) - 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \text{Cov}(e_i, \hat{a}_j) x_{ji} + E\left(\sum_{i=1}^n e_i^2\right) \\
&= \left(\sigma^2 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2\right) + \left(-2 \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl} \sigma^2\right) \\
&\quad + \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p \frac{s^{jl} \sigma^2}{n} x_{ji} x_{li}\right) + (-2\sigma^2) + (-2\sigma^2 p) + (n\sigma^2) \\
&= \left\{n - 2p - 1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ji} x_{li} - \bar{x}_j \bar{x}_l\right)\right\} \sigma^2 \\
&= \left(n - 2p - 1 + \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^p s^{jl} s_{lj}\right) \sigma^2 \quad (\text{式(40)} \quad s_{jl} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ji} x_{li} - \bar{x}_j \bar{x}_l \text{ より}) \\
&= \left(n - 2p - 1 + \sum_{j=1}^p \delta(j, j)\right) \sigma^2 \quad (\text{式(35)} \quad \sum_{m=1}^p s_{ml} s^{jm} = \delta(j, l) \text{ より}) \\
&= (n - 2p - 1 + p) \sigma^2 \\
&= (n - p - 1) \sigma^2 \tag{57}
\end{aligned}$$

したがって,

$$E(V_e) = \frac{E[F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)]}{n - p - 1} = \frac{(n - p - 1) \sigma^2}{n - p - 1} = \sigma^2 \tag{58}$$

これより,

$$V_e = \frac{F(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p)}{n - p - 1}$$

が誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることがわかる.