§1.11 回帰係数の推定と検定

富島諒

2021 年 6 月 17 日

1　回帰係数の推定と検定

単回帰分析では説明変数の個数は 1 個であったが, 今回の節では説明変数が p 個になり式 (1) のような回帰モデルとなると仮定する．ここで, e_i は独立な確率変数で正規分布 $N(0,\sigma^2)$ に従う.

$$y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i, \quad i = 1, 2, \cdots \tag{1}$$

また, 標本のデータ $(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{pi}, y_i), i = 1, 2, \cdots, n$ であるとき, それに基づく回帰係数 $\hat{a}_j$ は §1.5 線形重回帰より, 式 (2) のように表される.

$$\hat{a}_j = \frac{\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{y1} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{y2} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{yp} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1j} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2j} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pj} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix}} \tag{2}$$

(∗ j 列を y と $x_1, \cdots, x_p$ との共分散に置き換えている)

余因子と余因子展開

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

$$\begin{vmatrix} s_{11} & \cdots & s_{1(l-1)} & s_{1(l+1)} & \cdots & s_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots \\ s_{(j-1)1} & \cdots & s_{(j-1)(l-1)} & s_{(j-1)(l+1)} & \cdots & s_{(j-1)p} \\ s_{(j+1)1} & \cdots & s_{(j+1)(l-1)} & s_{(j+1)(l+1)} & \cdots & s_{(j+1)p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots \\ s_{p1} & \cdots & s_{p(l-1)} & s_{p(l+1)} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix} (-1)^{j+l}$$

を $\boldsymbol{V}$ の (j,l) **余因子**といい, V_{jl} と表す.

また行列 $\boldsymbol{V}$ に対して,

$$|\boldsymbol{V}| = s_{j1}V_{j1} + s_{j2}V_{j2} + \cdots + s_{jp}V_{jp} \quad \text{(第 j 行に関する展開)} \tag{3}$$
$$|\boldsymbol{V}| = s_{1l}V_{1l} + s_{2l}V_{2l} + \cdots + s_{pl}V_{pl} \quad \text{(第 l 列に関する展開)} \tag{4}$$

のような変換を行える．これを**余因子展開**という.

ここで式 (2) の分子で余因子展開の定理 (4) を用い, 分母は §1.5 で定義された分散共分散行列 $\boldsymbol{V}$ であるから, 式 (2) は式 (5) のように変形できる.

$$\hat{a}_j = \frac{\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{y1} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{y2} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{yp} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1j} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2j} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pj} & \cdots & s_{pp} \end{vmatrix}} = \frac{s_{y1}V_{1j} + s_{y2}V_{2j} + \cdots + s_{yp}V_{pj}}{|\boldsymbol{V}|} \tag{5}$$

余因子行列と逆転公式

p 次正方行列 $\boldsymbol{V} = [s_{jl}]$ とする. $\boldsymbol{V}$ の**余因子行列** $\tilde{\boldsymbol{V}}$ とは, (j, l) 成分に余因子 V_{jl} を持つ p 次正方行列の転地行列である. したがって, $\tilde{\boldsymbol{V}}$ は式 (6) のようになる.

$$\tilde{\boldsymbol{V}} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & V_{1p} \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & V_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{p1} & V_{p2} & \cdots & V_{pp} \end{bmatrix}^\top = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{21} & \cdots & V_{p1} \\ V_{12} & V_{22} & \cdots & V_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{1p} & V_{2p} & \cdots & V_{pp} \end{bmatrix} \tag{6}$$

そして, 正方行列 $\boldsymbol{V}$ に対して式 (7) のような関係式が成り立つ. これを**逆転公式**という.

$$\boldsymbol{V}^{-1} = \frac{\tilde{\boldsymbol{V}}}{|\boldsymbol{V}|} \tag{7}$$

そして, $\boldsymbol{V}$ の逆行列の (j, l) 要素を s^{jl} とすると, 逆転公式の式 (7) より,

$$\boldsymbol{V}^{-1} = \frac{\tilde{\boldsymbol{V}}}{|\boldsymbol{V}|}$$
$$\begin{bmatrix} s^{11} & s^{12} & \cdots & s^{1p} \\ s^{21} & s^{22} & \cdots & s^{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s^{p1} & s^{p2} & \cdots & s^{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{21} & \cdots & V_{p1} \\ V_{12} & V_{22} & \cdots & V_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{1p} & V_{2p} & \cdots & V_{pp} \end{bmatrix} / |\boldsymbol{V}|$$

となるので, $s^{jl} = \frac{V_{lj}}{|\boldsymbol{V}|}$ である. したがって, 式 (5) は,

$$
\begin{aligned}
\hat{a}_j &= \frac{s_{y1}V_{1j} + s_{y2}V_{2j} + \cdots + s_{yp}V_{pj}}{|\boldsymbol{V}|} \qquad (5)\\
&= s_{y1}s^{j1} + s_{y2}s^{j2} + \cdots + s_{yp}s^{jp}\\
&= \sum_{l=1}^{p} s_{yl}s^{jl}\\
&= \sum_{l=1}^{p} s^{jl}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})(x_{li} - \bar{x}_l)\\
&= \sum_{l=1}^{p} s^{jl}\frac{1}{n}\left\{\sum_{i=1}^{n}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i - \bar{y}\sum_{i=1}^{n}(x_{li} - \bar{x}_l)\right\}\\
&= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p}\sum_{i=1}^{n} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \qquad (8)
\end{aligned}
$$

となる．また, §1.5 で

$$
\hat{a}_0 = \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) \qquad (9)
$$

のような式が得られたので, これに式 (8) を代入すると,

$$
\begin{aligned}
\hat{a}_0 &= \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p)\\
&= \bar{y} - \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\bar{x}_j\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i - \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\right\}y_i \qquad (10)
\end{aligned}
$$

のようになる．

したがって, $\hat{a}_j, \hat{a}_0$ 正規分布に従う変数 $y_i, i = 1, 2, \cdots, n$ の 1 次式で表されることがわかる．これより回帰係数 $\hat{a}_j$ 及び定数項 $\hat{a}_0$ の期待値と分散を求めると, 式 (11) のようになる．

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{E}(\hat{a}_j) = a_j, && j = 1, 2, \cdots, p && \text{(11a)}\\
&\mathrm{V}(\hat{a}_j) = \frac{s^{jj}\sigma^2}{n}, && j = 1, 2, \cdots, p && \text{(11b)}\\
&\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n}, && j \neq l,\ j, l = 1, 2, \cdots, p && \text{(11c)}\\
&\mathrm{E}(\hat{a}_0) = a_0 && && \text{(11d)}\\
&\mathrm{V}(\hat{a}_0) = \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\frac{\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}}{n}\right)\sigma^2 && && \text{(11e)}\\
&\mathrm{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) = -\sum_{l=1}^{p}\frac{\bar{x}_l s^{jl}\sigma^2}{n}, && j = 1, 2, \cdots, p && \text{(11f)}
\end{aligned}
$$

なお, 式 (11) の証明は長くなるので後述する (2.2). 式 (11a) と式 (11d) より標本のデータを用いて計算した $\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p$ は母集団における値 $a_0, a_1, \cdots, a_p$ に対して不偏推定値となっていることが言える.

不偏推定値

標本から測定した推定値の期待値が母集団のそれに等しいとき、その推定値を**不偏推定値 (量)** という.

単回帰の場合と同様,

$$u = \frac{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)}{\sqrt{\mathrm{V}(\hat{a}_j)}} \tag{12}$$

のように標準化すると u は標準正規分布 $N(0,1)$ に従う. またこの時, 分母に含まれる未知の誤差分散 σ^2 を不偏推定値

$$\mathrm{V}_e = \frac{\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)}{n-p-1} \tag{13}$$

で置き換えて得られる統計量,

$$t = \frac{\hat{a}_j - a_j}{\sqrt{s^{jj}\frac{\mathrm{V}_e}{n}}} \tag{14}$$

$$t = \frac{\hat{a}_0 - a_0}{\sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}\right)\frac{\mathrm{V}_e}{n}}} \tag{15}$$

はいずれも自由度 $n-p-1$ の t 分布に従う. また, 式 (13) 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後述する (2.4).

ここで式 (13) における右辺の分子である予測誤差の平方和は

$$\begin{aligned}\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p) &= \sum_{i=1}^{p}\{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi})\}^2 \quad (\S 1.5 \text{ より}) \\ &= n(s_{yy} - \sum_{l=1}^{p} s_{yl}\hat{a}_l) \end{aligned} \tag{16}$$

のように変形できる. 証明は後述する (2.3).

これより, 仮説 $\mathrm{H}_0 : a_j = a_j^{(0)}$ あるいは $\mathrm{H}_0 : a_0 = a_0^{(0)}$ の検定 ($a_j^{(0)}, a_0^{(0)}$ は与えられた値) 及び $\hat{a}_j, \hat{a}_0$ の信頼区間は次のようになる.

- **仮説** $\mathrm{H}_0 : a_j = a_j^{(0)}$ **の検定** $(j = 1, 2, \cdots, p)$:

$$|t| = \frac{|\hat{a}_j - a_j^{(0)}|}{\sqrt{s^{jj}\frac{\mathrm{V}_e}{n}}} \geq t_\alpha(n-p-1) \tag{17}$$

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.

- **仮説** $\mathrm{H}_0 : a_0 = a_0^{(0)}$ **の検定**:

$$|t| = \frac{|\hat{a}_0 - a_0^{(0)}|}{\sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^{p} \sum_{l=1}^{p} \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right) \frac{\mathrm{V}_e}{n}}} \geq t_\alpha(n-p-1) \tag{18}$$

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.

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

$$\hat{a}_j - t_\alpha(n-p-1)\sqrt{\frac{s^{jj}\,\mathrm{V}_e}{n}} \leq a_j \leq \hat{a}_j + t_\alpha(n-p-1)\sqrt{\frac{s^{jj}\,\mathrm{V}_e}{n}} \tag{19}$$

- a_0 **の信頼率** $1-\alpha$ **の信頼区間**:

$$\begin{aligned} \hat{a}_0 - t_\alpha(n-p-1)\sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right)\frac{\mathrm{V}_e}{n}} \leq a_0 \\ \leq \hat{a}_0 + t_\alpha(n-p-1)\sqrt{\left(1 + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} \bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}\right)\frac{\mathrm{V}_e}{n}} \end{aligned} \tag{20}$$

信頼区間と仮説

母集団から標本をとってきて, その平均から $100(1-\alpha)\%$ という作業を求めるという作業を行ったとき $100(1-\alpha)$ 回, 母平均が含まれるような区間を**信頼区間**という.

また, t 分布による両側検定を行い, 検定統計量が自由度と標本の個数に基づく値より大きければ (外側にある) その仮説を棄却する. 逆に, 小さければ仮説を採択する.
例えば, 自由度が 9 の t 分布において危険率 5% では $t_{0.025}(9) = 2.26$ となる. 検定統計量によって求めた値が $t = 3.00$ であるとすると, 図 1 より, 有意水準 5% において帰無仮説を棄却することとなる.

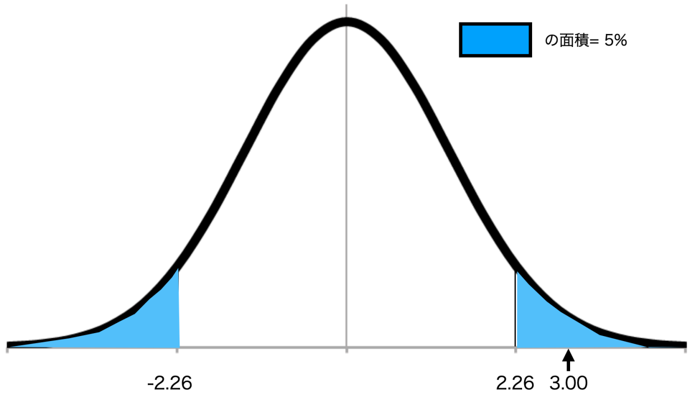

図 1: t 分布による仮説検定

次に, 回帰の有意性, 言い換えると, 取り上げた説明変数 $x_1, \cdots, x_p$ が全体として y の予測に役立つと言えるのかどうかの検定問題を考える．まず, 予測値 Y_i は指定変数の組 $(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{pi})$ に対して

$$Y_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi} \tag{21}$$

のように計算される．そして, 観測値 y_i の変動 (平方和) を式 (22) のように分解する．

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 &= \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{Y})^2 \\
&\qquad \left(\because \quad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} e_i = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i = \bar{Y} \text{ より}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i + Y_i - \bar{Y})^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2 + \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2 + 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)(Y_i - \bar{Y})
\end{aligned} \tag{22}$$

また, §1.5 で次のような関係となることがわかっている．

$$\begin{cases}
\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \hat{a}_2(x_{2i} - \bar{x}_2) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\} = 0 \\
\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \hat{a}_2(x_{2i} - \bar{x}_2) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\}\, x_{1i} = 0 \\
\qquad \vdots \\
\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \hat{a}_2(x_{2i} - \bar{x}_2) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\}\, x_{ji} = 0 \\
\qquad \vdots \\
\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \hat{a}_2(x_{2i} - \bar{x}_2) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\}\, x_{pi} = 0
\end{cases} \tag{23}$$

式 (23) を用いると, 式 (22) の第 3 項は

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)(Y_i - \bar{Y}) &= \sum_{i=1}^{n}\{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi})\}\left\{\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots \hat{a}_p x_{pi} - \bar{Y}\right\} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\}\left\{\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots \hat{a}_p x_{pi} - \bar{Y}\right\} \\
&\quad (\because \text{式 (9)} \quad \hat{a}_0 = \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) \text{ より}) \\
&= 0 \qquad (24)
\end{aligned}
$$

したがって, 式 (25) のように変動の分解ができる.

$$
\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}_{\text{全変動 } (S_T)} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2}_{\text{回帰変動 } (S_R)} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2}_{\text{残差変動 } (S_e)} \qquad (25)
$$

右辺の第 1 項 S_R は回帰式に基づく予測値 Y_i の変動, 第 2 項 S_e は残差の変動であって, 前者は全変動のうち回帰によって説明される部分, 後者は説明されない部分の変動である. もし取り上げた説明変数 $x_1, \cdots, x_p$ が y の予測に有効であるとすれば, 全変動 S_T は一定であるため残差変動 S_e は小さくなり, 逆に無効であるとすれば, S_e は大きくなる. ここで

$$
\mathrm{R}^2 = \frac{\mathrm{S}_R}{\mathrm{S}_T} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2} \qquad (26)
$$

のようにおけば, 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, その意味で**決定係数**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 $\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)$ に等しい.

そして, §1.7 で重相関係数 $r_{y\,\cdot\,12\cdots p}$ は

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

のように表せた. これを 2 乗した式 (27) を考える.

$$
r^2_{y\,\cdot\,12\cdots p} = \frac{s^2_{yY}}{s_{yy}s_{YY}} \qquad (27)
$$

ここで,

$$
\begin{aligned}
s_{yY} &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})(Y_i - \bar{Y}) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i + Y_i - \bar{Y})(Y_i - \bar{Y}) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(e_i + Y_i - \bar{Y})(Y_i - \bar{Y}) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}e_i(Y_i - \bar{Y}) + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2 \qquad (28)
\end{aligned}
$$

残差の性質

残差 $e_i = y_i - (a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi})$ には次の 2 つの性質がある.

- 残差の総和は 0

$$\sum_{i=1}^{n} e_i = 0 \tag{29}$$

- 説明変数 x_i と残差 e_i との積和は 0

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ji} e_i = 0 \tag{30}$$

式 (28) の右辺第 1 項に関して,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n} e_i(Y_i - \bar{Y}) &= \sum_{i=1}^{n} e_i Y_i - \bar{Y} \sum_{i=1}^{n} e_i \\
&= \sum_{i=1}^{n} e_i(\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi}) \quad (\because \text{式 (29)} \ \sum_{i=1}^{n} e_i = 0 \text{ より}) \\
&= \hat{a}_0 \sum_{i=1}^{n} e_i + \hat{a}_1 \sum_{i=1}^{n} e_i x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p \sum_{i=1}^{n} e_i x_{pi} \\
&= 0 \quad (\because \text{式 (30)} \ \sum_{i=1}^{n} x_{ji} e_i = 0 \text{ より}) \qquad (31)
\end{aligned}$$

したがって, 式 (28) は式 (31) の結果から,

$$\begin{aligned}
s_{yY} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} e_i(Y_i - \bar{Y}) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 \qquad (28) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 = s_{YY} \qquad (32)
\end{aligned}$$

式 (32) の結果より, $s_{yY} = s_{YY}$ であるから, 式 (27) は

$$\begin{aligned}
r_{y \cdot 12 \cdots p}^2 &= \frac{s_{yY}^2}{s_{yy} s_{YY}} \qquad (27) \\
&= \frac{s_{YY}^2}{s_{yy} s_{YY}} \\
&= \frac{s_{YY}}{s_{yy}} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2} \\
&= \mathrm{R}^2 \qquad (33)
\end{aligned}$$

となり, 重相関係数 $r_{y \cdot 12 \cdots p}$ の 2 乗は決定係数 R^2 と等しくなる.

χ^2 分布

$Z_1, Z_2, \cdots, Z_k$ が互いに独立で標準正規分布 $N(0,1)$ に従う確率変数であるとき, 次の式は χ^2 **分布**に従うという.

$$\chi^2 = Z_1^2 + Z_2^2 + \cdots + Z_k^2$$

モデルが適合しているとき $\sum(y_i - Y_i)^2/\sigma^2$ は,

$$\sum(y_i - Y_i)^2/\sigma^2 = \sum(e_i - 0)^2/\sigma^2$$

となるので自由度 $n-p-1$ のカイ 2 乗分布に従う. また特に説明変数 $x_1, \cdots, x_p$ が y の予測に何ら寄与しない, 言い換えれば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, 回帰の変動は

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2 &= \sum_{i=1}^{n}\left\{(\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi}) - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 \bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p \bar{x}_p)\right\}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}\left\{\hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) + \cdots + \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\right\}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j^2(x_{ji} - \bar{x}_j)^2 + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j\hat{a}_l(x_{ji} - \bar{x}_j)(x_{li} - \bar{x}_l) \qquad (j \neq l) \\
&= n\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j^2 s_{jj} + n\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j\hat{a}_l s_{jl}
\end{aligned}$$

$\mathrm{V}(\hat{a}_j) = \frac{\sigma^2}{n s_{jj}}$, かつ, 説明変数 x_j, x_l は互いに独立であることを用いると,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2 &= \sum_{j=1}^{p}\frac{\hat{a}_j^2\sigma^2}{\mathrm{V}(\hat{a}_j)} \\
\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2 &= \sum_{j=1}^{p}\frac{\hat{a}_j^2}{\mathrm{V}(\hat{a}_j)} \\
&= \sum_{j=1}^{p}\left(\frac{\hat{a}_j}{\sqrt{\mathrm{V}(\hat{a}_j)}}\right)^2
\end{aligned}$$

$u = \frac{\hat{a}_j - a_j}{\sqrt{\mathrm{V}(\hat{a}_j)}} \sim \mathrm{N}(0,1)$ において, $a_j = 0, j = 1, \cdots, p$ と仮定すると,

$$u = \frac{\hat{a}_j}{\sqrt{\mathrm{V}(\hat{a}_j)}} \sim \mathrm{N}(0,1)$$

なので,

$$\sum_{j=1}^{p}\left(\frac{\hat{a}_j}{\sqrt{\mathrm{V}(\hat{a}_j)}}\right)^2$$

は自由度 p の χ^2 分布に従う. すなわち,

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{(Y_i - \bar{Y})^2}{\sigma^2}$$

表 1: 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	$\mathrm{S}_R = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2$	p	$\mathrm{V}_R = \dfrac{\mathrm{S}_R}{p}$	$\mathrm{F}_0 = \dfrac{\mathrm{V}_R}{\mathrm{V}_e}$
回帰からの	$\mathrm{S}_e = \sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2$	$n-p-1$	$\mathrm{V}_e = \dfrac{\mathrm{S}_e}{n-p-1}$	
全体	$\mathrm{S}_T = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2$	$n-1$		

は $\sum(y_i - Y_i)^2/\sigma^2$ とは独立に自由度 p の χ^2 分布に従う. これより次のような分散分析表 (表 1) が構成される.

この分散分析表において分散比 F_0 が $\mathrm{F}_0 \geq \mathrm{F}^p_{n-p-1}(\alpha)$ ならば仮説 $H_0 : a_1 = \cdots = a_p = 0$ は危険率 α で棄却され, 回帰が変動の大きな要因となっている (回帰が有意である) ため, 取り上げた説明変数は全体として y の予測に役立つ, と結論づけられる. ここで, $\mathrm{F}^p_{n-p-1}(\alpha)$ は自由度 $(p, n-p-1)$ の F 分布の上側 $100\alpha\%$ 点である.

F 分布

2 つの確率分布 U, V が次の条件を満たすとする.

(i) U は自由度 k_1 のカイ 2 乗分布 $\chi^2(k_1)$ に従う
(ii) V は自由度 k_2 のカイ 2 乗分布 $\chi^2(k_2)$ に従う
(iii) 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あとにとった比, すなわちフィッシャー分散比を

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

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, $\mathrm{F}^{k_1}_n$ または $\mathrm{F}(k_1, k_2)$ と表す.

例えば, 回帰の自由度が 3 で残差の自由度が 11 であり, 分散比 $\mathrm{F}_0 = 8.21$ の場合, $\mathrm{F}_0 \geq \mathrm{F}^3_{11}(0.01) = 6.217$ となり, 仮説 $\mathrm{H}_0 : a_1 = a_2 = a_3 = 0$ は危険率 1% で棄却され, 取り上げた 3 つの説明変数は y の予測に役立つと言える. (図 2)

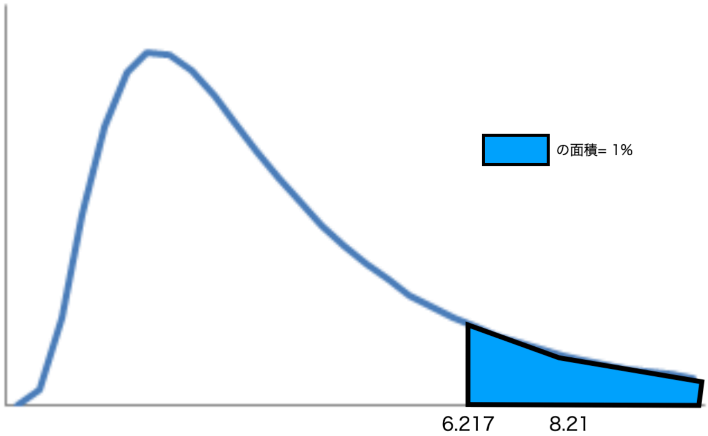

図 2: F 検定

2 式変形の証明

2.1 δ 関数と基本統計量

式変形で用いる, δ 関数を定義し, その他統計量を導く. まず, 式 (34) を δ 関数と定義する.

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

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

$$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{I}$$

すなわち

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

行番号と列番号が一致するときにのみ 1 をとることから,

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

となる. また, 定数 $b_j, j = 1, 2, \cdots, p$ について,

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

が成り立つ.

y_i の期待値 $\mathrm{E}(y_i)$ は

$$\begin{aligned}\mathrm{E}(y_i) &= \mathrm{E}(a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i) \quad (\because \text{式 (1)} \;\; y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i \text{ より}) \\ &= a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + \mathrm{E}(e_i) \\ &= a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} \quad (\because \; \mathrm{E}(e_i) = 0)\end{aligned} \tag{37}$$

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

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(y_i, y_k) &= \mathrm{E}\left[\{y_i - \mathrm{E}(y_i)\}\{y_k - \mathrm{E}(y_k)\}\right] \\ &= \mathrm{E}\left[\{y_i - (a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi})\}\{y_k - (a_0 + a_1 x_{1k} + \cdots + a_p x_{pk})\}\right] \\ &\quad (\because \text{式 (37)} \;\; \mathrm{E}(y_i) = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} \text{ より}) \\ &= \mathrm{E}(e_i e_k) \\ &= \mathrm{E}\left[\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\}\{e_k - \mathrm{E}(e_k)\}\right] \quad (\because \mathrm{E}(e_i) = 0 \text{ より}) \\ &= \mathrm{Cov}(e_i, e_k)\end{aligned} \tag{38}$$

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

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

となる. また, 定数 $c_i, i = 1, 2, \cdots, n$ に関して,

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

が成り立つ.

そして, 共分散 $s_{jl}, j, l = 1, 2, \cdots, p$ について,

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

が成り立つ.

2.2 式 (11) の導出

式 (11) を導出するにあたって再掲する.

$$\mathrm{E}(\hat{a}_j) = a_j, \qquad j = 1, 2, \cdots, p \tag{11a}$$

$$\mathrm{V}(\hat{a}_j) = \frac{s^{jj} \sigma^2}{n}, \qquad j = 1, 2, \cdots, p \tag{11b}$$

$$\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl} \sigma^2}{n}, \qquad j \neq l, \; j, l = 1, 2, \cdots, p \tag{11c}$$

$$\mathrm{E}(\hat{a}_0) = a_0 \tag{11d}$$

$$\mathrm{V}(\hat{a}_0) = \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^{p} \sum_{l=1}^{p} \frac{\bar{x}_j \bar{x}_l s^{jl}}{n} \right) \sigma^2 \tag{11e}$$

$$\mathrm{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) = -\sum_{l=1}^{p} \frac{\bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n}, \qquad j = 1, 2, \cdots, p \tag{11f}$$

2.2.1　式 (11a) $\mathrm{E}(\hat{a}_j) = a_j$ の導出

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}(\hat{a}_j) &= \mathrm{E}\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)y_i\right\} \quad (\because \text{式 (8)}\ \ \hat{a}_j = \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p}\sum_{i=1}^{n} s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)y_i \text{ より})\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)\,\mathrm{E}(y_i)\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)(a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi})\\
&\quad (\because \text{式 (37)}\ \ \mathrm{E}(y_i) = a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} \text{ より})\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)\left(a_0 + \sum_{j'=1}^{p} a_{j'}x_{j'i}\right)\\
&= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}\left\{a_0\sum_{i=1}^{n}(x_{li}-\bar{x}_l) + \sum_{j'=1}^{p} a_{j'}\sum_{i=1}^{n}(x_{li}-\bar{x}_l)x_{j'i}\right\}\\
&= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}\sum_{j'=1}^{p} a_{j'}\sum_{i=1}^{n}(x_{li}x_{j'i} - \bar{x}_lx_{j'i})\\
&= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}\sum_{j'=1}^{p} a_{j'}\left(\sum_{i=1}^{n}x_{li}x_{j'i} - \bar{x}_l\sum_{i=1}^{n}x_{j'i}\right)\\
&= \sum_{l=1}^{p} s^{jl}\sum_{j'=1}^{p} a_{j'}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_{li}x_{j'i} - \bar{x}_l\bar{x}_{j'}\right)\\
&= \sum_{l=1}^{p} s^{jl}\sum_{j'=1}^{p} a_{j'}s_{lj'} \quad (\because \text{式 (40)}\ \ s_{jl} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_{ji}x_{li} - \bar{x}_j\bar{x}_l \text{ より})\\
&= \sum_{j'=1}^{p} a_{j'}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}s_{lj'}\\
&= \sum_{j'=1}^{p} a_{j'}\delta(j,j') \quad (\because \text{式 (35)}\ \ \sum_{m=1}^{p} s^{jm}s_{ml} = \delta(j,l) \text{ より})\\
&= a_j \quad (\because \text{式 (36)}\ \ \sum_{l=1}^{p} b_l\delta(j,l) = b_j \text{ より})
\end{aligned}$$

2.2.2　式 (11c)　$\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n}$ の導出

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) &= \mathrm{E}\left[\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\{\hat{a}_l - \mathrm{E}(\hat{a}_l)\}\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j'=1}^{p} s^{jj'}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})y_i - \mathrm{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. \\
&\qquad \left.\left\{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l'=1}^{p} s^{ll'}(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})y_k - \mathrm{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] \\
&\qquad (\because \text{式 (8)}\ \ \hat{a}_j = \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p}\sum_{i=1}^{n} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \ \text{より})\\
&= \mathrm{E}\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j'=1}^{p} s^{jj'}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})\left(y_i - \mathrm{E}(y_i)\right)\right\}\left\{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l'=1}^{p} s^{ll'}(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})\left(y_k - \mathrm{E}(y_k)\right)\right\}\right] \\
&= \mathrm{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}^{n}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})\{y_i - \mathrm{E}(y_i)\}\{y_k - \mathrm{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_{k=1}^{n}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})\,\mathrm{E}\left[\{y_i - \mathrm{E}(y_i)\}\{y_k - \mathrm{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_{k=1}^{n}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})\,\mathrm{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}^{n}(x_{j'i} - \bar{x}_{j'})(x_{l'k} - \bar{x}_{l'})\,\mathrm{Cov}(e_i, e_k) \\
&\qquad (\because \text{式 (38)}\ \ \mathrm{Cov}(y_i, y_k) = \mathrm{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 \\
&\qquad (\because \text{式 (39)}\quad \sum_{k=1}^{n} c_k\,\mathrm{Cov}(e_i, e_k) = c_i\,\mathrm{V}(e_i) = 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{\sigma^2}{n}\sum_{l'=1}^{p} s^{ll'}\sum_{j'=1}^{p} s^{jj'}s_{j'l'} \\
&= \frac{\sigma^2}{n}\sum_{l'=1}^{p} s^{ll'}\delta(j, l') \qquad (\because \text{式 (35)}\sum_{m=1}^{p} s^{jm}s_{ml} = \sum_{m=1}^{p} s_{ml}s^{jm} = \delta(j, l) \ \text{より})\\
&= \frac{s^{lj}\sigma^2}{n} = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n} \qquad (\because \text{式 (36)}\ \ \sum_{l=1}^{p} b_l\delta(j, l) = b_j \ \text{より})
\end{aligned}
$$

□

2.2.3 式 (11b) $\mathrm{V}(\hat{a}_j) = \frac{s^{jj}\sigma^2}{n}$ の導出

式 (11c) において, j, l が $j = l$ のときであるから,

$$\mathrm{V}(\hat{a}_j) = \mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_j) = \frac{s^{jj}\sigma^2}{n}$$

□

2.2.4 式 (11d) $\mathrm{E}(\hat{a}_0) = a_0$ の導出

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}(\hat{a}_0) &= \mathrm{E}(\bar{y} - \hat{a}_1\bar{x}_1 - \cdots - \hat{a}_p\bar{x}_p) \\
&= \mathrm{E}(\bar{y}) - \mathrm{E}\left(\sum_{j=1}^{p} \hat{a}_j\bar{x}_j\right) \\
&= \mathrm{E}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i\right) - \sum_{j=1}^{p} \mathrm{E}(\hat{a}_j)\bar{x}_j \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{E}(y_i) - \sum_{j=1}^{p} a_j\bar{x}_j \quad (\because \text{式 (11a) より } \ \mathrm{E}(\hat{a}_j) = a_j) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi}) - \sum_{j=1}^{p} a_j\bar{x}_j \\
&\quad (\because \text{式 (37)} \ \ \mathrm{E}(y_i) = a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} \text{ より}) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \left(a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_jx_{ji}\right) - \sum_{j=1}^{p} a_j\bar{x}_j \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_j\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ji} - \sum_{j=1}^{p} a_j\bar{x}_j \\
&= a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_j\bar{x}_j - \sum_{j=1}^{p} a_j\bar{x}_j \\
&= a_0
\end{aligned}$$

□

2.2.5 式 (11e) $\mathrm{V}(\hat{a}_0) = \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\frac{\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}}{n}\right)\sigma^2$ の導出

$$
\begin{aligned}
\mathrm{V}(\hat{a}_0) &= \mathrm{E}\left[(\hat{a}_0 - \mathrm{E}(\hat{a}_0))^2\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\{\bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) - \mathrm{E}\left(\bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p)\right)\}^2\right] \\
&\quad (\because \text{式 (9)} \quad \hat{a}_0 = \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) \text{ より}) \\
&= \mathrm{E}\left[\{\bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) - (\mathrm{E}(\bar{y}) - \mathrm{E}(\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p))\}^2\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\left\{(\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})) - \left(\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\bar{x}_j - \sum_{j=1}^{p}\mathrm{E}(\hat{a}_j\bar{x}_j)\right)\right\}^2\right] \\
&= \mathrm{E}[\{\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})\}^2] + \mathrm{E}\left[\left\{\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\bar{x}_j - \sum_{j=1}^{p}\mathrm{E}(\hat{a}_j\bar{x}_j)\right\}^2\right] \\
&\quad - 2\,\mathrm{E}\left[\{\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})\}\left\{\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\bar{x}_j - \sum_{j=1}^{p}\mathrm{E}(\hat{a}_j\bar{x}_j)\right\}\right] \\
&= \mathrm{V}(\bar{y}) + \mathrm{E}\left[\left\{\sum_{j=1}^{p}\bar{x}_j(\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j))\right\}^2\right] - 2\,\mathrm{E}\left[\{\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})\}\sum_{j=1}^{p}\bar{x}_j\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&= \mathrm{V}(\bar{y}) + \mathrm{E}\left[\left\{\sum_{j=1}^{p}\bar{x}_j(\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j))\right\}\left\{\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_l(\hat{a}_l - \mathrm{E}(\hat{a}_l))\right\}\right] - 2\sum_{j=1}^{p}\bar{x}_j\,\mathrm{E}\left[\{\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&= \mathrm{V}(\bar{y}) + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l\,\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) - 2\sum_{j=1}^{p}\bar{x}_j\,\mathrm{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) \qquad (41)
\end{aligned}
$$

ここで式 (41) の第 1 項について,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{V}(\bar{y}) &= \mathrm{V}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i\right) \\
&= \mathrm{V}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(a_0 + a_1x_{1i} + \cdots + a_px_{pi} + e_i)\right) \\
&= \mathrm{V}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}e_i\right) \\
&= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\mathrm{V}(e_i) \\
&= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sigma^2 \\
&= \frac{1}{n^2}n\sigma^2 = \frac{\sigma^2}{n} \qquad (42)
\end{aligned}
$$

次に式 (41) の第 3 項について，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) &= \mathrm{E}\left[\{\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i - \mathrm{E}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i\right)\right\}\right. \\
&\qquad \left.\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i - \mathrm{E}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i\right)\right\}\right] \\
&\qquad (\because \text{式 (8)} \quad \hat{a}_j = \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p}\sum_{i=1}^{n} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i \text{ より}) \\
&= \mathrm{E}\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathrm{E}(y_i)\right\}\right. \\
&\qquad \left.\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)y_i - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\,\mathrm{E}(y_i)\right\}\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathrm{E}(y_i))\right\}\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\,(y_i - \mathrm{E}(y_i))\right\}\right] \\
&= \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_{li} - \bar{x}_l)\,\mathrm{E}\left[\{y_i - \mathrm{E}(y_i)\}^2\right] \\
&= 0
\end{aligned}
\tag{43}
$$

式 (42) と式 (43) を式 (41) に代入すると，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{V}(\hat{a}_0) &= \mathrm{V}(\bar{y}) + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l\,\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) - 2\sum_{j=1}^{p}\bar{x}\,\mathrm{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) \\
&= \frac{\sigma^2}{n} + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l\left(\frac{s^{jl}\sigma^2}{n}\right) \qquad (\because \text{式 (11c)} \;\; \mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n} \text{ より}) \\
&= \left(\frac{1}{n} + \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\frac{\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}}{n}\right)\sigma^2
\end{aligned}
$$

□

2.2.6　式 (11f)　$\mathrm{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) = -\sum_{l=1}^{p} \frac{\bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n}$ の導出

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j) &= \mathrm{E}\left[\{\hat{a}_0 - \mathrm{E}(\hat{a}_0)\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\{(\bar{y} - \hat{a}_1\bar{x}_1 - \cdots - \hat{a}_p\bar{x}_p) - \mathrm{E}(\bar{y}) + \mathrm{E}(\hat{a}_1\bar{x}_1) + \cdots + \mathrm{E}(\hat{a}_p\bar{x}_p)\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&\quad (\because \text{式 (9)} \;\; \hat{a}_0 = \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) \text{ より}) \\
&= \mathrm{E}\left[\{\bar{y} - \mathrm{E}(\bar{y})\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] - \mathrm{E}\left[\bar{x}_1\{\hat{a}_1 - \mathrm{E}(\hat{a}_1)\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&\quad - \cdots - \mathrm{E}\left[\bar{x}_p\{\hat{a}_p - \mathrm{E}(\hat{a}_p)\}\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\}\right] \\
&= \mathrm{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) - \bar{x}_1 \,\mathrm{Cov}(\hat{a}_1, \hat{a}_j) - \cdots - \bar{x}_p \,\mathrm{Cov}(\hat{a}_p, \hat{a}_j) \\
&= \mathrm{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) - \sum_{l=1}^{p} \bar{x}_l \,\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) \\
&= -\sum_{l=1}^{p} \frac{\bar{x}_l s^{jl} \sigma^2}{n} \\
&\quad (\because \text{式 (43)} \;\; \mathrm{Cov}(\bar{y}, \hat{a}_j) = 0 \text{ と式 (11c) } \mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l) = \frac{s^{jl}\sigma^2}{n} \text{ より})
\end{aligned}
$$

□

2.3　式 (16)　$\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p) = n(s_{yy} - \sum_{l=1}^{p} s_{yl}\hat{a}_l)$ の導出

$$
\begin{aligned}
\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p) &= \sum_{i=1}^{p} \{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi})\}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} \{(y_i - \bar{y}) - \hat{a}_1(x_{1i} - \bar{x}_1) - \cdots - \hat{a}_p(x_{pi} - \bar{x}_p)\}^2 \\
&\quad (\because \text{式 (9)} \quad \hat{a}_0 = \bar{y} - (\hat{a}_1\bar{x}_1 + \cdots + \hat{a}_p\bar{x}_p) \text{ より}) \\
&= \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 - 2\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y}) \sum_{j=1}^{p} \hat{a}_j (x_{ji} - \bar{x}_j) \\
&\quad + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{p} \sum_{l=1}^{p} \hat{a}_j (x_{ji} - \bar{x}_j) \hat{a}_l (x_{li} - \bar{x}_l)
\end{aligned}
\tag{44}
$$

ここで, 式 (44) の第 1 項は,

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

また, 式 (44) の第 2 項は,

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

そして, 式 (44) の第 3 項は,

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j(x_{ji}-\bar{x}_j)\hat{a}_l(x_{li}-\bar{x}_l) &= \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j\hat{a}_l\sum_{i=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_j)(x_{li}-\bar{x}_l) \\
&= \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j\hat{a}_l n s_{jl} \\
&= \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l'=1}^{p}s^{ll'}(x_{l'i}-\bar{x}_{l'})y_i\right\}ns_{jl} \\
&\quad (\because \text{式 (8)} \quad \hat{a}_j=\frac{1}{n}\sum_{l=1}^{p}\sum_{i=1}^{n}s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)y_i \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\sum_{i=1}^{n}y_i\sum_{l'=1}^{p}(x_{l'i}-\bar{x}_{l'})\sum_{l=1}^{p}s_{jl}s^{ll'} \\
&= \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\sum_{i=1}^{n}y_i\sum_{l'=1}^{p}(x_{l'i}-\bar{x}_{l'})\delta(j,l') \\
&\quad (\because \text{式 (35)} \quad \sum_{m=1}^{p}s_{ml}s^{jm}=\delta(j,l) \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\sum_{i=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_j)y_i \\
&\quad (\because \text{式 (36)} \quad \sum_{l=1}^{p}b_l\delta(j,l)=b_j \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\sum_{i=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_j)\{(y_i-\bar{y})+\bar{y}\} \\
&= \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j\left\{\sum_{i=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_j)(y_i-\bar{y})+\bar{y}\sum_{i=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_j)\right\} \\
&= \sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j n s_{yj} \qquad (47)
\end{aligned}
$$

式 (44) に式 (45), 式 (46), 式 (47) を代入すると,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{F}(\hat{a}_0,\hat{a}_1,\cdots,\hat{a}_p) &= \sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2-2\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j(x_{ji}-\bar{x}_j) \\
&\quad +\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\hat{a}_j(x_{ji}-\bar{x}_j)\hat{a}_l(x_{li}-\bar{x}_l) \\
&= ns_{yy}-2\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j n s_{yj}+\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j n s_{yj} \\
&= n\left(s_{yy}-\sum_{j=1}^{p}\hat{a}_j s_{yj}\right)
\end{aligned}
$$

□

2.4 V_e が誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることの証明

式 (13) $\mathrm{V}_e = \frac{\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)}{n-p-1}$ が誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることを示すため, $\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)$ の期待値を求める.

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}\left[\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)\right] &= \mathrm{E}\left[\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1i} + \cdots + \hat{a}_p x_{pi})\right\}^2\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\sum_{i=1}^{n}\left\{(a_0 - \hat{a}_0) + (a_1 - \hat{a}_1)x_{1i} + \cdots + (a_p - \hat{a}_p)x_{pi} + e_i\right\}^2\right] \\
&\quad (\because \text{式 (1)} \quad y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i \text{ より}) \\
&= \mathrm{E}\left[\sum_{i=1}^{n}\left\{(a_0 - \hat{a}_0) + (a_1 - \hat{a}_1)x_{1i} + \cdots + (a_p - \hat{a}_p)x_{pi}\right\}^2\right] \\
&\quad + 2\,\mathrm{E}\left[\sum_{i=1}^{n} e_i\left\{(a_0 - \hat{a}_0) + (a_1 - \hat{a}_1)x_{1i} + \cdots + (a_p - \hat{a}_p)x_{pi}\right\}\right] + \mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^{n} e_i^2\right) \\
&= \mathrm{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}\mathrm{E}\left[e_i(a_0 - \hat{a}_0) + e_i\sum_{j=1}^{p}(a_j - \hat{a}_j)x_{ji}\right] + \mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^{n} e_i^2\right) \\
&= \sum_{i=1}^{n}\mathrm{E}\left[\left\{\hat{a}_0 - \mathrm{E}(\hat{a}_0)\right\}^2\right] + 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\mathrm{E}\left[\hat{a}_0 - \mathrm{E}(\hat{a}_0)\right]\mathrm{E}\left[\left\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\right\}x_{ji}\right] \\
&\quad + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\mathrm{E}\left[\left\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\right\}\left\{\hat{a}_l - \mathrm{E}(\hat{a}_l)\right\}x_{ji}x_{li}\right] \\
&\quad - 2\sum_{i=1}^{n}\mathrm{E}\left[\left\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\right\}\left\{\hat{a}_0 - \mathrm{E}(\hat{a}_0)\right\}\right] \\
&\quad - 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\mathrm{E}\left[\left\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\right\}\left\{\hat{a}_j - \mathrm{E}(\hat{a}_j)\right\}x_{ji}\right] + \mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^{n} e_i^2\right) \\
&\quad (\because \text{式 (11a)} \quad \mathrm{E}(\hat{a}_j) = a_j \text{ と式 (11d)} \quad \mathrm{E}(\hat{a}_0) = a_0 \text{ より}) \\
&= \sum_{i=1}^{n}\mathrm{V}(\hat{a}_0) + 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\mathrm{Cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_j)x_{ji} + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\mathrm{Cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_l)x_{ji}x_{li} \\
&\quad - 2\sum_{i=1}^{n}\mathrm{Cov}(e_i, \hat{a}_0) - 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\mathrm{Cov}(e_i, \hat{a}_j)x_{ji} + \mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^{n} e_i^2\right)
\end{aligned}
\tag{48}
$$

ここで, 式 (48) の第 4 項に関して,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(e_i, \hat{a}_0) &= \mathrm{E}\left[\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\}\{\hat{a}_0 - \mathrm{E}(\hat{a}_0)\}\right] \\
&= \mathrm{E}\left[\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\}\right. \\
&\quad \left.\left\{\sum_{k=1}^{n} \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} y_k - \mathrm{E}\left(\sum_{k=1}^{n} \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n} y_k\right)\right\}\right] \\
&\quad (\because \text{式 (10)}\quad \hat{a}_0 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\right\} y_i) \\
&= \mathrm{E}\left[\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\}\sum_{k=1}^{n} \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n}\{y_k - \mathrm{E}(y_k)\}\right] \\
&= \sum_{k=1}^{n} \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n}\,\mathrm{E}\left[\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\}\{y_k - \mathrm{E}(y_k)\}\right] \\
&= \sum_{k=1}^{n} \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n}\,\mathrm{E}\left[\{e_i - \mathrm{E}(e_i)\}\{e_k - \mathrm{E}(e_k)\}\right] \\
&\quad (\because \text{式 (37)}\quad \mathrm{E}(y_i) = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi}, \\
&\qquad \text{式 (1)}\quad y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + \cdots + a_p x_{pi} + e_i \text{ より}) \\
&= \sum_{k=1}^{n} \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{lk} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n}\,\mathrm{Cov}(e_i, e_k) \\
&= \frac{1 - \sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} s^{jl}(x_{li} - \bar{x}_l)\bar{x}_j}{n}\sigma^2 \qquad (49) \\
&\quad (\because \text{式 (39)}\quad \sum_{k=1}^{n} c_k\,\mathrm{Cov}(e_i, e_k) = c_i\sigma^2 \text{ より})
\end{aligned}
$$

式 (49) より, 式 (48) の第 4 項は,

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

式 (49) と同様の手法で,

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

そして, 式 (51) より, 式 (48) の第 5 項は,

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\mathrm{Cov}(e_i,\hat{a}_j)x_{ji} &= \frac{\sigma^2}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)x_{ji} \\
&= \frac{\sigma^2}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}s^{jl}(x_{li}-\bar{x}_l)\left\{x_{ji}-(\bar{x}_j-\bar{x}_j)\right\} \\
&= \frac{\sigma^2}{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}s^{jl}\sum_{i=1}^{n}(x_{li}-\bar{x}_l)(x_{ji}-\bar{x}_j) - \frac{\sigma^2}{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}s^{jl}\bar{x}_j\sum_{i=1}^{n}(x_{li}-\bar{x}_l) \\
&= \frac{\sigma^2}{n}\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}s^{jl}ns_{lj} \\
&= \sigma^2\sum_{j=1}^{p}\delta(j,j) \quad (\because \text{式 (35)} \ \sum_{m=1}^{p}s^{jm}s_{ml}=\delta(j,l) \text{ より}) \\
&= \sigma^2 p \quad (\because \text{式 (36)} \ \sum_{l=1}^{p}b_l\delta(j,l)=b_j \text{ より})
\end{aligned}
\tag{52}
$$

式 (48) の第 1 項は,

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}\mathrm{V}(\hat{a}_0) &= \sum_{i=1}^{n}\frac{\left(1+\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}\right)\sigma^2}{n} \\
&\qquad (\because \text{式 (11e)} \ \ \mathrm{V}(\hat{a}_0)=\left(\frac{1}{n}+\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\frac{\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}}{n}\right)\sigma^2 \text{ より}) \\
&= \sigma^2+\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}\sigma^2
\end{aligned}
\tag{53}
$$

式 (48) の第 2 項は,

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\mathrm{Cov}(\hat{a}_0,\hat{a}_j)x_{ji} &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\left(-\frac{\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_l s^{jl}\sigma^2}{n}x_{ji}\right) \\
&\qquad (\because \text{式 (11f)} \ \ \mathrm{Cov}(\hat{a}_0,\hat{a}_j)=-\sum_{l=1}^{p}\frac{\bar{x}_l s^{jl}\sigma^2}{n} \text{ より}) \\
&= \sum_{j=1}^{p}\left(-\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_l s^{jl}\sigma^2\right)\sum_{i=1}^{n}\frac{x_{ji}}{n} \\
&= -\sum_{j=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}\bar{x}_j\bar{x}_l s^{jl}\sigma^2
\end{aligned}
\tag{54}
$$

式 (48) の第 3 項は,

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

$$
(\because \text{式 (11c)} \quad \mathrm{Cov}(\hat{a}_j,\hat{a}_l)=\frac{s^{jl}\sigma^2}{n} \text{ より})
$$

式 (48) の第 6 項は,

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

最後に, 式 (53), 式 (54), 式 (55), 式 (50), 式 (52), 式 (56) を式 (48) に代入して,

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

したがって,

$$
\mathrm{E}(\mathrm{V}_e) = \frac{\mathrm{E}\left[\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)\right]}{n - p - 1} = \frac{(n - p - 1)\sigma^2}{n - p - 1} = \sigma^2
$$

この結果より,

$$
\mathrm{V}_e = \frac{\mathrm{F}(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \cdots, \hat{a}_p)}{n - p - 1}
$$

が誤差分散 σ^2 の不偏推定値であることがわかる. □