

2

2010年度 学部 エコノメトリックス 第9回講義メモ (訂正版)

2010年11月2日

§ 3 線形重回帰モデル

3.1 行列・ベクトルの演算

まず、行列・ベクトルの演算についての復習をしておこう。

$k \times \ell$ の数が並んだ行列 (matrix) $\mathbf{A}$ を考える。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1\ell} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2\ell} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & \cdots & a_{k\ell} \end{pmatrix} \quad (3.1.1)$$

(3.1.1) 式の a_{ij} を行列 $\mathbf{A}$ の (i, j) 要素 (element) という。

行列のうち、行ないし列の数が1であるものをベクトル (vector) とい

3

い、 $k \times 1$ の行列を列ベクトル (column vector)、 $1 \times \ell$ の行列を行ベクトル (row vector) であるという。

行列の演算には、次のような特徴がある。

- (1) 行と列の数が同じ二つの行列 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ について、和と差が次のように定義できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \pm \mathbf{B} &= \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1\ell} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{k\ell} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1\ell} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & \cdots & b_{k\ell} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} \pm b_{11} & \cdots & a_{1\ell} \pm b_{1\ell} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} \pm b_{k1} & \cdots & a_{k\ell} \pm b_{k\ell} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- (2) $k \times \ell$ の行列 $\mathbf{A}$ と $\ell \times m$ の行列 $\mathbf{C}$ について積が定義でき、 $k \times m$

4

の行列 $\mathbf{D}$ になる。すなわち、

$$\begin{aligned} \mathbf{AC} &= \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1\ell} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{k\ell} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{\ell 1} & \cdots & c_{\ell m} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{\ell} a_{1j}c_{j1} & \cdots & \sum_{j=1}^{\ell} a_{1j}c_{jm} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j=1}^{\ell} a_{kj}c_{j1} & \cdots & \sum_{j=1}^{\ell} a_{kj}c_{jm} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} d_{11} & \cdots & d_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{k1} & \cdots & d_{km} \end{pmatrix} = \mathbf{D} \end{aligned}$$

になる。

5

- (3) $k \times \ell$ 行列 $\mathbf{A}$ の定数倍 $\kappa \mathbf{A}$ は次のように定義される。

$$\kappa \mathbf{A} = \kappa \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1\ell} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{k\ell} \end{pmatrix}$$

- (4) $k \times \ell$ 行列 $\mathbf{A}$ の (i, j) 要素を (j, i) 要素に入れ替えることを転置する (transpose) といい、行列の右肩に「 $'$ 」または「 $\top$ 」をつけることで表現する。すなわち、

$$\mathbf{A}' (= \mathbf{A}^\top) = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{k1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1\ell} & \cdots & a_{k\ell} \end{pmatrix}$$

である。

6

- (5) 下記のように $k \times k$ の行列 (k 次の正方行列) で、対角要素 ((i, i) 要素、 $i = 1, \dots, k$) が1であり、残りの要素がすべて0である行列を単位行列という。

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- (6) $k \times k$ の行列 $\mathbf{Z}$ に対し、 $\mathbf{ZW} = \mathbf{WZ} = \mathbf{I}$ となる $k \times k$ 行列 $\mathbf{W}$ が存在するとき、 $\mathbf{W}$ を $\mathbf{Z}$ の逆行列 (inverse matrix) といい、 $\mathbf{Z}^{-1}$ と表す。

7

3.2 線形単回帰モデルの行列表現

線形重回帰モデルを扱う前に、線形単回帰モデルを行列・ベクトルを使って表現してみよう。

線形単回帰モデルは、 $Y_i = \alpha + \beta X_i + \epsilon_i$, ($i = 1, \dots, n$) で表現できた。いま、 $n \times 1$ のベクトル $\mathbf{y}$, $\mathbf{1}$, $\mathbf{x}$, $\boldsymbol{\epsilon}$ を以下のように定義する。

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

このとき、線形単回帰モデルは、

$$\mathbf{y} = \alpha \mathbf{1} + \beta \mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (3.2.1)$$

8

として表すことができる。さらに、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & X_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

とすると、(3.2.1) 式は

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (3.2.2)$$

になる。

では、 $\boldsymbol{\beta} = (\alpha, \beta)'$ の最小 2 乗推定量 $\mathbf{b} = (a, b)'$ の行列表現を求めよう。

第 3 回目講義から、損失関数 $S(\boldsymbol{\beta}) = S(\alpha, \beta)$ は

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n \epsilon_i^2 = \boldsymbol{\epsilon}'\boldsymbol{\epsilon} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

9

と表現できる。いま、スカラー $S(\boldsymbol{\beta})$ のベクトル $\boldsymbol{\beta}$ による微分を次のように定義する。

$$\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta} \end{pmatrix} \quad (3.2.3)$$

第 3 回目講義の (2.2.2) 式、(2.2.3) 式より、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta} \end{pmatrix} = (-2) \begin{pmatrix} \mathbf{1}'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \\ \mathbf{x}'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と表すことができるので、整理すると最小化のための 1 階の条件は

$$\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0} \quad (3.2.4)$$

になる。2 × 2 行列である $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ に逆行列 $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ が存在すれば、最小

10

2 乗推定量 $\mathbf{b}$ は

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (3.2.5)$$

と表現できる。

(3.2.5) 式で、以前に得たものと同じ結果が得られることを確認しよう。

$$\begin{aligned} \mathbf{X}'\mathbf{X} &= \begin{pmatrix} \mathbf{1}' \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{x} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{1}'\mathbf{1} & \mathbf{1}'\mathbf{x} \\ \mathbf{x}'\mathbf{1} & \mathbf{x}'\mathbf{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので、その逆行列は $n\bar{X} = \sum_{i=1}^n X_i$ であることを用いると、

$$(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{n \sum_{i=1}^n X_i^2 - (n\bar{X})^2} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n X_i^2 & -n\bar{X} \\ -n\bar{X} & n \end{pmatrix} \quad (3.2.6)$$

11

になる。また、 $n\bar{Y} = \sum_{i=1}^n Y_i$ であることを用いると

$$\mathbf{X}'\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}'\mathbf{y} \\ \mathbf{x}'\mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n X_i Y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n\bar{Y} \\ \sum_{i=1}^n X_i Y_i \end{pmatrix} \quad (3.2.7)$$

となるので、

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{n \sum_{i=1}^n X_i^2 - (n\bar{X})^2} \begin{pmatrix} (\sum_{i=1}^n X_i^2)(n\bar{Y}) - n\bar{X}(\sum_{i=1}^n X_i Y_i) \\ -n^2\bar{X}\bar{Y} + n(\sum_{i=1}^n X_i Y_i) \end{pmatrix}$$

が得られる。これより、

$$b = \frac{-n^2\bar{X}\bar{Y} + n(\sum_{i=1}^n X_i Y_i)}{n \sum_{i=1}^n X_i^2 - (n\bar{X})^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$$

が得られる。また、

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

12

$$\begin{aligned} &= \frac{(\sum_{i=1}^n X_i^2)(\bar{Y}) - n\bar{Y}\bar{X}^2 + n\bar{Y}\bar{X}^2 - \bar{X}(\sum_{i=1}^n X_i Y_i)}{\sum_{i=1}^n X_i^2 - n\bar{X}^2} \\ &= \bar{Y} - \bar{X} \frac{\sum_{i=1}^n X_i Y_i - n\bar{X}\bar{Y}}{\sum_{i=1}^n X_i^2 - n\bar{X}^2} = \bar{Y} - \bar{X}b \end{aligned}$$

となるので、(2.2.4) 式、(2.2.5) 式が確認できた。

さらに、 $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} = \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\boldsymbol{\epsilon}$ となるので、 $\mathbf{b}$ の分散共分散行列は、

$$\begin{aligned} \text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X}) &= E((\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta})(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta})' | \mathbf{X}) \\ &= (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'E[\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}']\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \end{aligned}$$

になる。加えて、残差ベクトルを $\mathbf{e} = (e_1, \dots, e_n)'$ で表すと、

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b} = (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}')\mathbf{y}$$

となり、 $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2}\mathbf{e}'\mathbf{e}$ と表すことができる。