

新たな予測行列に基づく診断統計量

竹内 秀一

An Influence Measure based on a New Prediction Matrix

Hidekazu TAKEUCHI

Several influence measures have been proposed to assess the influence of observations in linear regression. In particular, influence measures based on prediction matrices composed of explanatory variables have been discussed. Among these, leverages, which are the diagonal elements of the hat matrix (one kind of prediction matrix), are used as basic influence measures. In this paper, a new prediction matrix is proposed to effectively assess the influence of observations. The entries of this new prediction matrix are leverages and functions of leverages, where the function used in the construction is one found in various previous prediction matrices. The new prediction matrix also extends the single case with one observation deleted from the data set to the multiple case with two or more observations deleted from the data set.

1 はじめに

線形回帰 (linear regression) において、これまで多くの診断統計量 (influence measure) が提案されてきた。その中に、説明変数行列から構成される予測行列 (prediction matrix) に基づく診断統計量がある。

Chatterjee and Hadi[1]などの研究においては、説明変数行列から構成される予測行列やその対角成分であるこ比 (leverage) を中心とした観測値の影響度評価が行われている。また、Takeuchi[3]や竹内[5]などでは、彼らと同様の観点からこ比に基づく行列形式の基本的な診断統計量を定義し、加えて残差に基づくベクトル形式の基本的な診断統計量を定義

新たな予測行列に基づく診断統計量

してその相関行列を新規に導入したうえで、両者の関数としていくつかの代表的な診断統計量の新たな表現を提案している。

しかしながら、てこ比に基づく行列形式の基本的な診断統計量の成分については、統計的な意味付けに不十分な部分があった。観測値の影響力評価をするための診断統計量を構成する要素として有用であるためには、線形回帰における残差やその相関行列などのように、統計的に意味付けが明確であることが重要な視点の一つとして掲げられる。さらに、診断統計量としても、個々の観測値の影響力評価を行うだけではなく、複数個の観測値(集合)の影響力評価を行うことに対応できる拡張性を備えていることが望まれる。

そこで、本論文では、観測値の影響力評価において有用であり、個々の観測値を含む観測値集合への一般化が可能で拡張性のある診断統計量として、新たな予測行列を提案する。これまでは、Chatterjee and Hadi[1]などの研究のように、個々の観測値だけを固定した影響力評価しかできなかったが、提案する新たな予測行列を利用すれば、同時に複数個の観測値(集合)を固定した影響力評価へと一般化することが系統的に可能となる。また、新たな予測行列とこれまでの代表的な診断統計量との関連性についても言及する。この結果、提案する新たな予測行列は、てこ比に基づく行列形式の基本的な診断統計量を成分とするように構成され、その意味付けがChatterjee and Hadi[1]などの研究よりも明確になる。

本論文の構成は以下のとおりである。第2節では線形回帰モデルおよび各種の基本的な統計量を与え、影響力評価の対象となる観測値集合を取り上げるための記号法を導入する。また、代表的な診断統計量の例としてCookの距離(Cook's distance)も定義する。第3節において、説明変数行列から構成される新たな予測行列を提案し、従来から示されている2つの見方についても検討することにより、個々の観測値の場合だけではなく、複数個の観測値集合の場合についての影響力評価へも拡張する。第4節は全体のまとめと今後の課題である。

2 定義

本節では、まず、線形回帰モデルにおける各種の基本的な統計量を与える。つぎに、影響力評価の対象となる観測値集合とそれ以外の観測値集合に分割する場合の記号法について定義する。さらに、線形回帰における代表的な診断統計量の例としてCookの距離を定義する。

2.1 線形回帰モデル

本論文では、以下の一般的な線形回帰モデルを考える。

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

ただし、 \mathbf{y} は $n \times 1$ の目的変数ベクトル、 \mathbf{X} は $n \times q$ のフルランクの説明変数行列、 $\boldsymbol{\beta}$ は

$q \times 1$ の回帰係数ベクトル, そして, $\boldsymbol{\varepsilon}$ は $n \times 1$ の誤差ベクトルであり, その期待値は $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}_n$ で, 分散共分散行列は $V(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ である。このとき, $\mathbf{0}_n$ は $n \times 1$ の成分がすべて 0 の列ベクトルであり, σ^2 は未知分散であり, \mathbf{I}_n は $n \times n$ の単位行列であり, $n > q \geq 2$ とする。

また, $\boldsymbol{\beta}$ の最小 2 乗推定量は $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$ となり, σ^2 の不偏推定量は $\hat{\sigma}^2 = \mathbf{e}'\mathbf{e}/(n-q)$ となる。ただし, 「 $'$ 」は行列やベクトルの転置を表し, $\mathbf{e} (= \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ は残差ベクトルである。

ここで, \mathbf{y} の予測値ベクトルを $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$ とし, この \mathbf{y} の係数部分に相当する行列を $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ と定義する。このとき, \mathbf{H} は説明変数行列から構成される予測行列でありハット行列 (hat matrix) と呼ばれ, その第 (j, k) 成分を $h_{jk} = \mathbf{x}_j(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_k'$ と表す。ただし, \mathbf{x}_j は \mathbf{X} の第 j 番目の行ベクトルである。特に, \mathbf{H} の第 i 対角成分 $h_{ii} = \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_i'$ を, 第 i 番目の観測値に対するてこ比 (性質については竹内[4]を参照) という。この結果, \mathbf{e} は $\hat{\mathbf{y}}$ や \mathbf{H} を利用して, $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{H})\mathbf{y}$ と表すこともできる。

2.2 観測値集合の分割

回帰診断の記号法を Chatterjee and Hadi[1] に従って示しておく。行列やベクトルの添字 I は n 個のデータ全体から取り除かれる m 個の観測値の部分集合, つまり, 影響力評価の対象となる複数個の観測値集合 (集合という意味では 1 個の観測値の場合も含む) を表す。また, 添字 (I) はその m 個の観測値集合 I 以外の残りの $n - m$ 個の観測値集合を表す。このとき, 一般性を失うことなく, 影響力評価の対象となる観測値集合 I はデータあるいは統計量の後半に集中しているものとする。つまり, \mathbf{y} , \mathbf{X} , \mathbf{e} , それに $\hat{\mathbf{y}}$ は,

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_{(I)} \\ \mathbf{y}_I \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(I)} \\ \mathbf{X}_I \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{(I)} \\ \mathbf{e}_I \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{y}}_{(I)} \\ \hat{\mathbf{y}}_I \end{pmatrix}$$

というようにそれぞれの部分集合ごとに 2 分割されているものとする。これは影響力評価の対象となる観測値集合 I がデータあるいは統計量の後方にまとまるように, 単純に並べ替えただけのことである。ただし, 本論文で具体的な観測値集合を扱う場合, 特に, $m = 1$ の場合 (個々の観測値の影響力を評価する診断統計量の場合) は添字について, I は i と, (I) は (i) と表示する。

このようにデータ \mathbf{y} および \mathbf{X} を 2 つの観測値集合に分けておくと, 観測値集合 I の m 個の観測値を取り除いたときの $\boldsymbol{\beta}$ の最小 2 乗推定量は $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(I)} = (\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{y}_{(I)}$ となる。また, \mathbf{H} については

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} & \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} & \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

と 4 分割される。ただし, (2.1) 式における分割行列の第 (2, 2) 成分を $\mathbf{H}_I = \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I$ とする。

以上のように、回帰診断においては、観測値集合 I を対象として影響力評価を直接的に行うか、あるいはそれ以外の観測値集合 (I) を対象として、全データ(すべての観測値)を利用した場合との差異により、間接的に観測値集合 I の影響力評価を行うか、このどちらかになる。ただし、後者については、間接的な場合の診断統計量を式変形することにより、直接的な影響力評価を行う指標に直せる場合が多い。

2.3 診断統計量

代表的な診断統計量の中でも代表格である Cook の距離は、Cook and Weisberg[2]や Weisberg[7]などから、観測値集合 I についての影響力評価の指標として、

$$\begin{aligned} CD_I &= \frac{(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(I)})' \mathbf{X}' \mathbf{X} (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(I)})}{q\hat{\sigma}^2} = \frac{(\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_{(I)})' (\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_{(I)})}{q\hat{\sigma}^2} \\ &= \frac{\mathbf{e}_I' (\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1} \mathbf{H}_I (\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1} \mathbf{e}_I}{q\hat{\sigma}^2} \end{aligned} \quad (2.2)$$

と定義される。この(2.2)式の第3表現の Cook の距離については、Takeuchi[3]が提案しているように、意味のある統計量に基づく行列・ベクトルにより、

$$CD_I = \mathbf{c}_I' \mathbf{W}_I \mathbf{c}_I \quad (2.3)$$

とも表現できる。ただし、

$$\mathbf{W}_I = \boldsymbol{\Pi}_I^{-\frac{1}{2}} \mathbf{R}_I^{-1} (\boldsymbol{\Pi}_I + \mathbf{I}_m - \mathbf{R}_I) \mathbf{R}_I^{-1} \boldsymbol{\Pi}_I^{-\frac{1}{2}} \quad (2.4)$$

および

$$\mathbf{c}_I = \frac{1}{\sqrt{q}} \boldsymbol{\Pi}_I^{\frac{1}{2}} \mathbf{t}_I \quad (2.5)$$

である。ここで、

$$\boldsymbol{\Pi}_I = \text{diag } \mathbf{H}_I [\text{diag}(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)]^{-1} \quad (2.6)$$

は、ハット行列に関連した潜在行列(potential matrix)

$$\boldsymbol{\Pi} = \text{diag } \mathbf{H} [\text{diag}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})]^{-1}$$

を4分割するときの第(2,2)成分の行列であり、(2.6)式の第 i 対角成分は

$$\pi_i = \frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}}$$

である。また、

$$\mathbf{R}_I = [\text{diag}(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)]^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)[\text{diag}(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)]^{-\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

は、残差 \mathbf{e} の相関行列 (correlation matrix)

$$\mathbf{R} = [\text{diag}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})]^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})[\text{diag}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})]^{-\frac{1}{2}}$$

を4分割するときの第(2,2)成分の行列であり、(2.7)式の第(j, k)成分は

$$r_{jk} = -\frac{h_{jk}}{\sqrt{(1-h_{jj})(1-h_{kk})}}$$

である。そして、

$$\mathbf{t}_I = \frac{1}{\hat{\sigma}}[\text{diag}(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)]^{-\frac{1}{2}}\mathbf{e}_I \quad (2.8)$$

は、標準化残差ベクトル

$$\mathbf{t} = \frac{1}{\hat{\sigma}}[\text{diag}(\mathbf{I}_n - \mathbf{H})]^{-\frac{1}{2}}\mathbf{e}$$

を2分割するときの後半のベクトルであり、(2.8)式の第 i 成分は

$$t_i = \frac{e_i}{\hat{\sigma}\sqrt{1-h_{ii}}}$$

である。(2.6)式、(2.7)式あるいは(2.8)式などにおいて、 $\text{diag}(\mathbf{D})$ は正方行列 \mathbf{D} の対角成分のみを取り出し、非対角成分がすべて0の行列を表す。なお、(2.7)式において、 $j \neq k$ に対しては \mathbf{R}_I が正則行列となるように、 $r_{jk} \neq \pm 1$ であると仮定する。

さらに、(2.5)式については、 $m=1$ の場合のCookの距離の平方根に相当する列ベクトル

$$\mathbf{c} = \frac{1}{\sqrt{q}}\mathbf{\Pi}^{\frac{1}{2}}\mathbf{t}$$

を2分割するときの後半のベクトルであり、(2.5)式の第 i 成分は

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{q}}\sqrt{\pi_i}t_i$$

である。しかしながら、(2.4)式については、各観測値間の残差の相関行列および潜在行列から構成される重み付き行列

$$\mathbf{W} = \mathbf{\Pi}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{\Pi} + \mathbf{I}_n - \mathbf{R})\mathbf{R}^{-1}\mathbf{\Pi}^{-\frac{1}{2}}$$

を4分割するときの第(2,2)成分の行列とは、通常では異なる(一般には一致しない)。これは、(2.4)式において、 \mathbf{R}^{-1} が \mathbf{R}^{-1} (あるいは一般化逆行列 \mathbf{R}^-)を分割するときの第(2,2)成分と一致するとは限らない(一般には異なる)からである。 $m=1$ の場合、つまり、 $I=i$ の場合には、残差の相関行列を考慮する必要がない($R_i=1$ となる)ので、(2.4)式が $W_i=1$ とな

新たな予測行列に基づく診断統計量

る。このため、(2.3)式が一般的な Cook の距離として表されることになり、 $CD_i = c_i^2 = \pi_i e_i^2 / q$ となる。なお、(2.2)式の第3表現からは、 $CD_i = h_{ii} e_i^2 / \{q\delta^2(1-h_{ii})^2\} = c_i^2$ となり一致するので、これを第 i 成分としてもつ(2.5)式の \mathbf{c}_I は、Cook の距離の平方根に標準化残差ベクトルの符号を加えた列ベクトルとして構成されている。

Cook の距離を用いた一般的なデータ分析事例については、Cook and Weisberg[2]や竹内・近河・篠崎[6]などを参照していただきたい。その他にも代表的な診断統計量として尤度距離(竹内[5]を参照)などを用いた分析もあるがここでは省略する。

3 新たな予測行列に基づく診断統計量の一般化

説明変数行列 \mathbf{X} から構成されるハット行列 \mathbf{H} および以下で提案する予測行列 $\mathbf{P}_{(I)}$ に対して、(2.3)式と同様な行列形式による統一的な定式化を行うことにより、観測値集合 I の影響力評価が系統的に一般化可能となる。これまでは、Chatterjee and Hadi[1]が³、個々の観測値の影響力評価である $m=1$ の場合についてのみ検討をしていた。けれども、本論文で提案する行列形式による一般化により、系統的に $m \geq 2$ へと拡張することが可能となり、複数個の観測値集合 I についての影響力評価がより容易になる。

3.1 ハット行列による新たな予測行列の表現

説明変数行列から構成される新たな予測行列として、

$$\mathbf{P}_{(I)} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}' = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} & \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} & \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_I \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

を定義する。ただし、(3.1)式の第2表現は、説明変数行列 \mathbf{X} を $\mathbf{X}_{(I)}$ および \mathbf{X}_I に2分割する場合に対応するものである。(3.1)式を、(2.1)式の \mathbf{H} と関連させて表現すると、付録 A から、

$$\mathbf{P}_{(I)} = \mathbf{H} + \mathbf{H}\mathbf{A}_I\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{I}_n + \mathbf{A}_I)\mathbf{H} \quad (3.2)$$

となる。ただし、

$$\mathbf{A}_I = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{n-m} & \mathbf{O}_{(n-m) \times m} \\ \mathbf{O}'_{(n-m) \times m} & (\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1} \end{pmatrix}$$

とする。このとき、 \mathbf{O} は成分がすべて0の零行列である。つまり、分割行列の第(1,1)成分の \mathbf{O}_{n-m} は $(n-m) \times (n-m)$ の成分がすべて0の正方行列であり、第(1,2)成分の $\mathbf{O}_{(n-m) \times m}$ は $(n-m) \times m$ の成分がすべて0の行列である。また、 $\mathbf{P}_{(I)}$ の第 (j, k) 成分を $p_{jk(I)}$ とする。

特に、 $m=1$ の場合、つまり $I=i$ の場合について、(3.2)式は

$$\mathbf{P}_{(i)} = \mathbf{H} + \mathbf{H}\mathbf{A}_i\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{I}_n + \mathbf{A}_i)\mathbf{H} \quad (3.3)$$

となる。ただし、

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-1} \\ \mathbf{0}'_{n-1} & \frac{1}{1-h_{ii}} \end{pmatrix}$$

となる。このとき、分割行列の第(1,2)成分(正確にはベクトル)の $\mathbf{0}_{n-1}$ は $(n-1) \times 1$ の成分がすべて0の列ベクトルである。また、 $\mathbf{P}_{(i)}$ の第 (j, k) 成分は $p_{jk(i)}$ となる。

この場合については、Chatterjee and Hadi[1]が説明変数行列をイメージした関式化により、行列の各成分に関して、てこ比に相当するものに基づく表現について提案をしている。しかしながら、上記のような行列・ベクトルを用いた一般化は提案されておらず、 $m=1$ の場合についてのみ取り上げている。Chatterjee and Hadi[1]が示す結果は、 j および k が i 以外するとき、

$$p_{jk(i)} = h_{jk} + \frac{h_{ij}h_{ik}}{1-h_{ii}}$$

であり、 $j=k$ で i 以外するとき、

$$p_{jj(i)} = h_{jj} + \frac{h_{ij}^2}{1-h_{ii}}$$

であり、 $j=k=i$ のとき、

$$p_{ii(i)} = \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}$$

である。Chatterjee and Hadi[1]では明確に示されていないが、 j が i 以外で $k=i$ のとき、

$$p_{ji(i)} = p_{ij(i)} = \frac{h_{ij}}{1-h_{ii}}$$

となる。これらの結果は、本論文で提案する行列・ベクトル構造を明確に示した(3.3)式においても導くことができる(付録Bを参照)。

したがって、(3.2)式において提案する新たな予測行列は、 $m=1$ の場合におけるChatterjee and Hadi[1]の結果を包含するものであり、系統的に $m \geq 2$ の場合まで拡張し一般化されているといえる。

なお、 $\mathbf{P}_{(i)}$ の表記であるが、Chatterjee and Hadi[1]の示す結果である $\mathbf{P}_{(i)}$ の各成分と対応させるために、これを観測値集合 I の場合に一般化したものという意味で記述した。(3.2)式の右辺の表現方法から考えると、左辺は「 \mathbf{P}_I 」と表記した方が適切であるが、一般の回帰診断においては別の用途として利用するので、本論文ではChatterjee and Hadi[1]の記号法に従うこととした。

3.2 新たな予測行列によるハット行列の表現

Chatterjee and Hadi[1]においては、 $m=1$ の場合について、3.1節とは逆の見方についても提案している。この「逆の見方」とは、3.1節で示したようにハット行列 \mathbf{H} の成分から予測行列 $\mathbf{P}_{(i)}$ の成分を表すことの裏返しとして、 $\mathbf{P}_{(i)}$ の成分から \mathbf{H} の成分を表すという意味である。この場合についても、Chatterjee and Hadi[1]が示す結果は、 j および k が i 以外

のとき、

$$h_{jk} = p_{jk(i)} - \frac{p_{ij(i)}p_{ik(i)}}{1 + p_{ii(i)}}$$

であり、 $j=k$ で i 以外

$$h_{jj} = p_{jj(i)} - \frac{p_{ij(i)}^2}{1 + p_{ii(i)}}$$

であり、 j が i 以外で $k=i$ のとき (Chatterjee and Hadi[1]でも示されている)、

$$h_{ji} = h_{ij} = \frac{p_{ij(i)}}{1 + p_{ii(i)}}$$

であり、 $j=k=i$ のとき、

$$h_{ii} = \frac{p_{ii(i)}}{1 + p_{ii(i)}}$$

である。この場合についても、行列・ベクトルを用いた一般化は提案されていない。

この2つ目の「逆の見方」をする場合についても、(3.1)式の $\mathbf{P}_{(i)}$ から(3.2)式を導出する方法と同様の式変形(付録 A を参照)により、(2.1)式の \mathbf{H} から以下の式を導出することができる。付録 C で示すように、 \mathbf{H} の別表現として、

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}_{(i)} - \mathbf{P}_{(i)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(i)} \quad (3.4)$$

と再定義することにより、「逆の見方」についても行列構造に基づく一般化が可能となる。ただし、

$$\mathbf{B}_I = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{n-m} & \mathbf{O}_{(n-m) \times m} \\ \mathbf{O}'_{(n-m) \times m} & (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(i)})^{-1} \end{pmatrix}$$

とし、 $\mathbf{P}_{I(i)} = \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(i)}\mathbf{X}_{(i)})^{-1}\mathbf{X}'_I$ とする。

この一般化の特別な場合、つまり(3.4)式における $m=1$ の場合は、

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}_{(i)} - \mathbf{P}_{(i)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(i)} \quad (3.5)$$

となり、上記の Chatterjee and Hadi[1]と同じ結果を導くことができる(付録 D を参照)。

したがって、この「逆の見方」をする場合についても、Chatterjee and Hadi[1]が示した $m=1$ の場合のみならず、系統的に $m \geq 2$ の場合まで拡張し一般化されていることがわか

る。

なお、本論文での記号法を統一するために、(3.4)式および(3.5)式では左辺を \mathbf{H} としているが、厳密には何らかの形式で添字を付加しなければならない。通常の回帰診断においては、 $\mathbf{H}_I = \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I$ であり、 $\mathbf{H}_{(i)} = \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'_{(i)}\mathbf{X}_{(i)})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)}$ というハット行列を意味するため、これまでとは異なる記号法を導入する必要がある。本論文中には議論の焦点を絞っているため、記号法による誤解はないと考えて、補足説明をするだけに留め、特別な添字は敢えて付加していない。

最後に、付録 E において、(3.4)式に基づくハット行列の表現についてもべき等行列であることを、参考までに示しておく。

4 まとめと今後の課題

本論文は、新たな予測行列(3.2)式および(3.4)式の右辺の成分を診断統計量としてもつ行列形式の表現を提案することにより、観測値集合 I の影響力評価が $m \geq 1$ の場合について系統的に一般化可能となることを示した。これまでは、Chatterjee and Hadi[1]が、 $m=1$ の場合についてのみ検討をしていたが、本論文で提案する行列形式による一般化により、系統的に $m \geq 2$ へと拡張することが可能となり、複数の観測値集合 I についての影響力評価がより容易になる。

また、一般的な回帰診断における診断統計量との関連では、その中核となる(2.6)式の潜在行列 $\mathbf{\Pi}_I$ あるいはその第 i 対角成分

$$\pi_i = \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}$$

について、

$$p_{ii(i)} = \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}} = \pi_i$$

という関係があるので、多くの診断統計量の表現のみならず、影響力評価の観点からも新たな展開が期待される。たとえば、Takeuchi[3]が提案している(2.3)式のCookの距離についても、これまでは、 $\mathbf{\Pi}_I$ を(2.6)式のように定義したうえで、診断統計量の新たな表現を提案してきた。(2.7)式の残差の相関行列 \mathbf{R}_I などのように統計的に、あるいは診断統計量として、意味付けが明確なものであれば、診断統計量を構成する要素として有用であるが、 $\mathbf{\Pi}_I$ の成分については、このような理論面からの裏付けが不十分であった。しかしながら、本論文で提案する予測行列 $\mathbf{P}_{(i)}$ を新たに導入することにより、診断統計量を構成する要素として明確に意味付けることが可能となる。

ただ、 $\mathbf{P}_{(i)}$ の成分である $p_{ii(i)}$ は $m=1$ の場合には有用であるが、 $m \geq 2$ の複数の場合に

新たな予測行列に基づく診断統計量

は $\mathbf{P}_{(I)}$ における \mathbf{H}_I およびそれに関連する逆行列 $(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1}$ の計算回数が、観測値集合 I の組合せに応じてかなり多くなる(階乗的に増加する)ことが予想される。通常の診断統計量の場合、 $\mathbf{\Pi}_I$ を算出するためにはその基となる $\mathbf{\Pi}$ を、標準化残差ベクトル \mathbf{t}_I についても \mathbf{t} をそれぞれ一度だけ求めておけばよい。けれども、 \mathbf{W}_I の主要な構成要素である残差の相関行列 \mathbf{R}_I については \mathbf{R} を一度計算しておくだけでは不十分で、その逆行列である \mathbf{R}_I^{-1} を観測値集合 I の組合せに応じて追加計算しなければならない。こうした点は、複数個の観測値集合 I に対する $(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1}$ あるいは $(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^{-1}$ の計算量についても同じ問題(厳密には $\mathbf{P}_{(I)}$ の計算量問題)があり、 $m \geq 2$ の場合に生じる固有の問題でもある。この点は、観測値集合 I の影響力評価を行う際に、常に生じる大きな問題であるので、今後の課題としたい。

付録 A : $\mathbf{P}_{(I)}$ の導出

Chatterjee and Hadi[1]や Cook and Weisberg[2]などにおいて、基本的な線形代数により、 $\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)} = \mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I$ を利用して、以下のような逆行列を導いている。

$$(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I[\mathbf{I}_m - \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I]^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$$

ここで、 $\mathbf{H}_I = \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I$ であるので、

$$(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$$

となる。また、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(I)} \\ \mathbf{X}_I \end{pmatrix}$$

であるので、(3.1)式の第1表現から、(2.1)式のハット行列 \mathbf{H} と同様にして、容易に第2表現は導出できる。よって、(3.1)式の第2表現に着目して、

$$\mathbf{P}_{(I)} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} & \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} & \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} \\ \mathbf{P}'_{12} & \mathbf{P}_{22} \end{pmatrix}$$

とする。これに対して、上記の逆行列 $(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}$ を適用して式変形すると、各分割行列は以下ようになる。まず、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{11} &= \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} \\ &= \mathbf{X}_{(I)}\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\}\mathbf{X}'_{(I)} \\ &= \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} + \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(I)} \end{aligned}$$

となる。つぎに、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{12} &= \mathbf{X}_{(I)}(\mathbf{X}'_{(I)}\mathbf{X}_{(I)})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{X}_{(I)}\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_I)^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\}\mathbf{X}'_I \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t + \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\
 &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t + \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{H}_t
 \end{aligned}$$

となる。最後に、

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_{22} &= \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_t \\
 &= \mathbf{X}_t\{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\}\mathbf{X}'_t \\
 &= \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t + \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\
 &= \mathbf{H}_t + \mathbf{H}_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{H}_t
 \end{aligned}$$

となる。したがって、逆行列 $(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}$ の部分を逆行列 $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ により表現し直して、2つの項に分けると

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_{(t)} &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\ \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{H}_t \end{pmatrix} \\
 &\quad + \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{H}_t \\ \mathbf{H}_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{H}_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{H}_t \end{pmatrix} \\
 &= \mathbf{H} + \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\ \mathbf{H}_t \end{pmatrix} (\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1} (\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} \quad \mathbf{H}_t) \\
 &= \mathbf{H} + \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\ \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \end{pmatrix} (\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1} (\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} \quad \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t) \\
 &= \mathbf{H} + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t(\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1}\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\
 &= \mathbf{H} + (\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} \quad \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t) \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{n-m} & \mathbf{O}_{(n-m) \times m} \\ \mathbf{O}'_{(n-m) \times m} & (\mathbf{I}_m - \mathbf{H}_t)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\ \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \end{pmatrix} \\
 &= \mathbf{H} + \mathbf{H}\mathbf{A}_t\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{I}_n + \mathbf{A}_t)\mathbf{H}
 \end{aligned}$$

となり、(3.1)式を得ることができる。このとき、第2式以降の式変形において、 \mathbf{H} を行方向および列方向にそれぞれ2分割すると

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\ \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \end{pmatrix} = (\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} \quad \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t)$$

となり、また \mathbf{H} がべき等行列であるので

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} &= \mathbf{H}^2 \\
 &= (\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} \quad \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t) \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\ \mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \end{pmatrix} \\
 &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t\mathbf{X}_t(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t \\
 &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)} + \mathbf{X}'_t\mathbf{X}_t)(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_t
 \end{aligned}$$

となることを基にしている。

付録 B : $m=1$ の場合の予測行列 $\mathbf{P}_{(i)}$ の成分

上記の付録 A における $\mathbf{P}_{(i)}$ を, $m=1$ の場合の $\mathbf{P}_{(i)}$ について 4 分割したうえで, それらの成分を個々に示す。(3.3)式の第 2 表現から

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_{(i)} &= \mathbf{H}(\mathbf{I}_n + \mathbf{A}_i)\mathbf{H} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-1} \\ \mathbf{0}'_{n-1} & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-1} \\ \mathbf{0}'_{n-1} & \frac{1}{1-h_{ii}} \end{pmatrix} \right] \\
 &\quad \times \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & h_{ii} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-1} \\ \mathbf{0}'_{n-1} & 1 + \frac{1}{1-h_{ii}} \end{pmatrix} \\
 &\quad \times \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & h_{ii} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{11} & \mathbf{p}_{12} \\ \mathbf{p}'_{12} & p_{22} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

とする。ここで, 分割行列についてそれぞれ式変形を行う。まず, \mathbf{P}_{11} については, $\mathbf{X}'_{(i)}\mathbf{X}_{(i)} = \mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i$ を利用して,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_{11} &= \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} + \left(1 + \frac{1}{1-h_{ii}}\right)\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} \\
 &= \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i)(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} + \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} \\
 &\quad + \frac{1}{1-h_{ii}}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} \\
 &= \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} + \frac{1}{1-h_{ii}}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)}
 \end{aligned}$$

となる。つぎに, \mathbf{p}_{12} についても同様にして,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}_{12} &= \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i + \left(1 + \frac{1}{1-h_{ii}}\right)h_{ii}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\
 &= \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i)(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i + \left(h_{ii} + \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}\right)\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\
 &= \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i - \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i + \left(h_{ii} + \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}\right)\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\
 &= \left(1 - h_{ii} + h_{ii} + \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}\right)\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i = \frac{1}{1-h_{ii}}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i
 \end{aligned}$$

となる。最後に、 p_{22} についても同様にして、

$$\begin{aligned} p_{22} &= \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)}\mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i + \left(1 + \frac{1}{1-h_{ii}}\right)h_{ii}^2 \\ &= \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i)(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i + h_{ii}^2 + \frac{h_{ii}^2}{1-h_{ii}} \\ &= \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i\mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i + h_{ii}^2 + \frac{h_{ii}^2}{1-h_{ii}} \\ &= h_{ii} - h_{ii}^2 + h_{ii}^2 + \frac{h_{ii}^2}{1-h_{ii}} = \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}} \end{aligned}$$

となる。なお、(3.3)式の第 1 表現を利用すれば、付録 A の $m=1$ の場合として、すぐに導出することができる。

以上のことから、

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{x}_i(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_i \end{pmatrix}$$

の成分 $h_{jk}(=h_{kj})$ を用いて、 j および k が i 以外のときは、 \mathbf{P}_{11} の非対角成分から

$$p_{jk(i)} = h_{jk} + \frac{h_{ji}h_{ik}}{1-h_{ii}} = h_{jk} + \frac{h_{ij}h_{ik}}{1-h_{ii}}$$

であり、 $j=k$ で i 以外のときは、 \mathbf{P}_{11} の対角成分から

$$p_{jj(i)} = h_{jj} + \frac{h_{ji}h_{ij}}{1-h_{ii}} = h_{jj} + \frac{h_{ij}^2}{1-h_{ii}}$$

であり、 j が i 以外で $k=i$ のときは、 \mathbf{P}_{12} の成分から

$$p_{ji(i)} = p_{ij(i)} = \frac{h_{ji}}{1-h_{ii}} = \frac{h_{ij}}{1-h_{ii}}$$

であり、 $j=k=i$ のときは、 p_{22} から

$$p_{ii(i)} = \frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}$$

である。

したがって、Chatterjee and Hadi[1]の結果と一致する。つまり、提案する新たな予測行列は、Chatterjee and Hadi[1]の結果を包含するものである。

付録 C : (3.4)式のハット行列 \mathbf{H} の導出

(2.1)式におけるハット行列 \mathbf{H} を、

新たな予測行列に基づく診断統計量

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{11} & \mathbf{H}_{12} \\ \mathbf{H}'_{12} & \mathbf{H}_{22} \end{pmatrix}$$

とする。この分割行列の各成分について、 $\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)} + \mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I$ を利用した逆行列

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} &= (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} - (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I[\mathbf{I}_m + \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I]^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} \\ &= (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} - (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} \end{aligned}$$

により、付録 A と同様の式変形を行う。ここで、 $\mathbf{P}_{I(t)} = \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I$ とする。まず、

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{11} &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} \\ &= \mathbf{X}_{(t)}\{(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} - (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\}\mathbf{X}_{(t)} \\ &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}_{(t)} - \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}_{(t)} \end{aligned}$$

となる。つぎに、

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{12} &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{X}_{(t)}\{(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} - (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I - \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I - \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)} \end{aligned}$$

となる。最後に、

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{22} &= \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{X}_I\{(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1} - (\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I - \mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I \\ &= \mathbf{P}_{I(t)} - \mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)} \end{aligned}$$

となる。よって、付録 A と同様にして、すべての分割行列について、第 1 項をまとめると $\mathbf{P}_{(t)}$ と一致し、第 2 項をまとめると、マイナスの符号を除き

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}_{(t)} & \mathbf{X}_{(t)}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)} \\ \mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)} \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{P}_{(t)} \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{n-m} & \mathbf{O}_{(n-m) \times m} \\ \mathbf{O}'_{(n-m) \times m} & (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1} \end{pmatrix} \mathbf{P}_{(t)} = \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \end{aligned}$$

となる。これら 2 つの項をまとめると、

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}$$

となり、(3.4)式を導くことができる。

付録 D : $m=1$ の場合のハット行列 \mathbf{H} の成分

上記の付録 C において利用したハット行列 \mathbf{H} について、 $m=1$ の場合で 4 分割するときのそれらの成分を個々に示す。 $m=1$ の場合において、(3.5)式から

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} &= \mathbf{P}_{(i)} - \mathbf{P}_{(i)} \mathbf{B}_i \mathbf{P}_{(i)} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & p_{ii(i)} \end{pmatrix} \\
 &\quad - \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & p_{ii(i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-1} \\ \mathbf{0}'_{n-1} & \frac{1}{1+p_{ii(i)}} \end{pmatrix} \\
 &\quad \times \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & p_{ii(i)} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & p_{ii(i)} \end{pmatrix} \\
 &\quad - \begin{pmatrix} \frac{1}{1+p_{ii(i)}} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \frac{p_{ii(i)}}{1+p_{ii(i)}} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \frac{p_{ii(i)}}{1+p_{ii(i)}} \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \frac{p_{ii(i)}^2}{1+p_{ii(i)}} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} - \frac{1}{1+p_{ii(i)}} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \frac{1}{1+p_{ii(i)}} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \frac{1}{1+p_{ii(i)}} \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \frac{p_{ii(i)}}{1+p_{ii(i)}} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{11} & \mathbf{h}_{12} \\ \mathbf{h}'_{12} & h_{22} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

とする。以上のことから、

$$\mathbf{P}_{(i)} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & \mathbf{X}_{(i)} (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{x}'_i \\ \mathbf{x}_i (\mathbf{X}'_{(i)} \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}'_{(i)} & p_{ii(i)} \end{pmatrix}$$

の成分 $p_{jk(i)} (= p_{kj(i)})$ を用いて、 j および k が i 以外の場合は、 \mathbf{H}_{11} の非対角成分から

$$h_{jk} = p_{jk(i)} - \frac{p_{ji(i)} p_{ik(i)}}{1+p_{ii(i)}} = p_{jk(i)} - \frac{p_{ij(i)} p_{ik(i)}}{1+p_{ii(i)}}$$

であり、 $j=k$ で i 以外の場合は、 \mathbf{H}_{11} の対角成分から

$$h_{jj} = p_{jj(i)} - \frac{p_{ji(i)} p_{ij(i)}}{1+p_{ii(i)}} = p_{jj(i)} - \frac{p_{ij(i)}^2}{1+p_{ii(i)}}$$

であり、 j が i 以外で $k=i$ のときは、 \mathbf{h}_{12} の成分から

$$h_{ji} = h_{ij} = \frac{p_{ji(i)}}{1+p_{ii(i)}} = \frac{p_{ij(i)}}{1+p_{ii(i)}}$$

であり、 $j=k=i$ のときは、 h_{22} から

$$h_{ii} = \frac{p_{ii(i)}}{1+p_{ii(i)}}$$

新たな予測行列に基づく診断統計量

である。

したがって、Chatterjee and Hadi[1]の結果と一致する。つまり、提案する新たな予測行列の成分を用いてハット行列の成分を表現した結果は、Chatterjee and Hadi[1]の結果を包含するものである。

付録 E：ハット行列 \mathbf{H} のべき等性

ハット行列 \mathbf{H} がべき等行列であることを、(3.4)式を一般化した表現の場合について確認しておく。通常であれば、

$$\mathbf{H}^2 = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' = \mathbf{H}$$

となり、簡単な証明であるが、(3.4)式の表現の場合については少し手間がかかる。

事前に、予測行列 $\mathbf{P}_{(t)}$ の 2 乗については、 $\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)} + \mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I$ を利用すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(t)}^2 &= \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{P}_{(t)} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)} + \mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I)(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' + \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

となる。これにより、結果的に $\mathbf{P}_{(t)}$ はべき等行列ではないことがわかる。この結果について、

$$\mathbf{P}_{(t)}^2 = \mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I$$

と表すこととする。ただし、 $\mathbf{C}_I = \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'$ とする。

(3.4)式を用いた場合の \mathbf{H} は、

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}$$

であるので、 $\mathbf{P}_{(t)}^2 = \mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I$ を適用すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^2 &= \mathbf{H}\mathbf{H} = (\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)})(\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}) \\ &= \mathbf{P}_{(t)}^2 - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}^2 + \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}^2\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \\ &= \mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I - (\mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I)\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I(\mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I) + \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I(\mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I)\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \\ &= \mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{C}_I - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{C}_I + \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \\ &\quad + \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \\ &= \mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \\ &\quad + \mathbf{C}_I - \mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{C}_I - \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} + \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} \end{aligned}$$

となる。ここで、式変形の最後の式において、第 3 項以降について別途計算をする。あらか

じめ

$$\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}'_{(t)} & \mathbf{X}'_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{O}_{n-m} & \mathbf{O}_{(n-m)\times m} \\ \mathbf{O}'_{(n-m)\times m} & (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{(t)} \\ \mathbf{X}_I \end{pmatrix} = \mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I$$

を求めておき、これを適宜利用して式変形を行う。また、第3項については、

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_I &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^2(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

と式変形をしておく。ここでは、中央に単位行列 $\mathbf{I}_m = (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^2(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}$ を挟むことにより式変形を行う。第4項以降については、左側から $\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}$ により、同様に右側から $(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'$ によりまとめることを考えて式変形を行う。すると、第4項は、

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})\mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

となる。第5項を構成する行列はすべて対称行列であり、第4項を転置した結果と一致するので、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{C}_I &= (\mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)})' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

となる。第6項は、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

となる。同様にして第7項は、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)}(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

となる。最後に第8項は、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(t)}\mathbf{B}_I\mathbf{C}_I\mathbf{B}_I\mathbf{P}_{(t)} &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{B}_I\mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &\quad \times (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}'_I(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{P}_{I(t)}^2(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(t)})^{-1}\mathbf{X}_I(\mathbf{X}'_{(t)}\mathbf{X}_{(t)})^{-1}\mathbf{X}' \end{aligned}$$

となる。以上から、第3項以降については、

新たな予測行列に基づく診断統計量

$$\begin{aligned} & \mathbf{C}_I - \mathbf{C}_I \mathbf{B}_I \mathbf{P}_{I(I)} - \mathbf{P}_{I(I)} \mathbf{B}_I \mathbf{C}_I - \mathbf{P}_{I(I)} \mathbf{B}_I \mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)} \mathbf{B}_I \mathbf{P}_{I(I)} \mathbf{B}_I \mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)} \mathbf{B}_I \mathbf{C}_I \mathbf{B}_I \mathbf{P}_{I(I)} \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'_I \mathbf{X}_{I(I)})^{-1} \mathbf{X}'_I (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^{-1} \\ & \quad \times [(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^2 - (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)}) \mathbf{P}_{I(I)} - \mathbf{P}_{I(I)} (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)}) - (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)}) + \mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)}^2] \\ & \quad \times (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^{-1} \mathbf{X}_I (\mathbf{X}'_I \mathbf{X}_{I(I)})^{-1} \mathbf{X}'_I \end{aligned}$$

となり, $\mathbf{X}(\mathbf{X}'_I \mathbf{X}_{I(I)})^{-1} \mathbf{X}'_I (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^{-1}$ および $(\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^{-1} \mathbf{X}_I (\mathbf{X}'_I \mathbf{X}_{I(I)})^{-1} \mathbf{X}'_I$ により挟まれている [] 内を計算すると,

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)})^2 - (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)}) \mathbf{P}_{I(I)} - \mathbf{P}_{I(I)} (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)}) - (\mathbf{I}_m + \mathbf{P}_{I(I)}) + \mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)}^2 \\ &= \mathbf{I}_m + 2\mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)}^2 - \mathbf{P}_{I(I)} - \mathbf{P}_{I(I)}^2 - \mathbf{P}_{I(I)} - \mathbf{P}_{I(I)}^2 - \mathbf{I}_m - \mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)} + \mathbf{P}_{I(I)}^2 \\ &= \mathbf{O}_m \end{aligned}$$

となるので, 第3項以降の和は零行列 \mathbf{O}_n となる。したがって, 第1項と第2項のみとなり,

$$\mathbf{H}^2 = \mathbf{P}_{I(I)} - \mathbf{P}_{I(I)} \mathbf{B}_I \mathbf{P}_{I(I)} = \mathbf{H}$$

となる。これにより, \mathbf{H} はべき等行列であることが示された。

参考文献

- [1] Chatterjee, S. and Hadi, A. S. (1988), *Sensitivity Analysis in Linear Regression*, New York: Wiley.
- [2] Cook, R. D. and Weisberg, S. (1982), *Residuals and Influence in Regression*, New York: Chapman and Hall.
- [3] Takeuchi, H. (1991), Detecting influential observations by using a new expression of Cook's distance, *Communications in Statistics — Theory and Methods*, **20**, 261-274.
- [4] 竹内秀一(1998), 線形回帰におけるてこ比の校正値, 人文自然科学論集, **106**号, 97-106。
- [5] 竹内秀一(2012), 数値実験による線形回帰における多重共線性の影響力評価, 人文自然科学論集, **132**号, 3-26。
- [6] 竹内秀一・近河拓也・篠崎信雄(2000), 複数個の外れ値を検出するときのCookの距離の検出力, 応用統計学, **29**, 83-99。
- [7] Weisberg, S. (2014), *Applied Linear Regression*, Fourth Edition, New York: Wiley.