平方和の分解で中間積和がすべて0になる理由

【１】データ構造式で成分分解
まずデータ構造式において、$y_{ij}-\bar{\bar{y}}$ を３つの効果に分解します。つまり、

$(y_{ij}-\bar{\bar{y}})$=$(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})$+$(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})$+$(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})$ と分解します。
全体　回帰 R　lof　残差 e

なお、回帰 R と lof の合計は主効果です。データ構造式で表現すると、
$(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})$+$(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})$=$(\bar{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})$となり、一元配置実験のデータ構造式ですね。

【２】平方和の分解
【１】のデータ構造式から平方和の分解を証明します。

つまり、$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{\bar{y}})^2=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})^2$の証明です。

よく考えると、$(y_{ij}-\bar{\bar{y}})^2=\left((\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})+(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})+(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})\right)^2$より、展開すると、

$\left((\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})+(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})+(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})\right)^2$

$=(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})^2+(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})^2+(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})^2$

$+2(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})+2(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})+2(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})$
ですから、

(i) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})=0$

(ii) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=0$

(iii) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=0$

が成り立っています。実際にブログで表計算しても合計 0 になっていますね。
これを証明しましょう！

【３】証明の前におさえておきたい等式
(1) $\bar{x}$、$\hat{y_{i\cdot}}$、$\bar{\bar{y}}$は回帰直線上の点より、

$(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})=\frac{S_{xy}}{S_{xx}}(x_i-\bar{x})$　(式 1)

が成り立ちます。

(2) y の合計をよく考えると、データの全合計を T とすると、

T=$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}y_{ij}=b\sum_{i=1}^{a}\bar{y_{i\cdot}}=ab\bar{\bar{y}}$

が成り立ちます。これを変形すると、等式

$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{\bar{y}})=b\sum_{i=1}^{a}(\bar{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})$　(式 2)

が成り立ちます。
(式 1)と(式 2)を使って、(i)(ii)(iii)を証明します。

【4】本題の(i)(ii)(iii)の証明

(1)(i)の証明

(i) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=0$ を証明します。

＜証明＞

●j についての項が無いので、

$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=b\sum_{i=1}^{a}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})$とします。

●(式 1)を使って

$b\sum_{i=1}^{a}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=b\sum_{i=1}^{a}\frac{S_{xy}}{S_{xx}}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})$と代入します。

●平方和$\frac{S_{xy}}{S_{xx}}$は数字なので、Σの外に出します。

$b\sum_{i=1}^{a}\frac{S_{xy}}{S_{xx}}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})$ とします。

●次に、$(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})$を$(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})-(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})$と変形して、Σの式に代入します。

$b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})\left((\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})-(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})\right)$とします。

●さらに、(式 1)を使って

$b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})\left((\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})-(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})\right)=b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})\left((\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})-\frac{S_{xy}}{S_{xx}}(x_i-\bar{x})\right)$として、整理すると、

$=b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})-b\frac{S_{xy}^2}{S_{xx}^2}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})^2$となります。

●$b\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})=S_{xy}$、$b\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})^2=S_{xx}$ですから、よって、

$b\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})-b\frac{S_{xy}^2}{S_{xx}^2}\sum_{i=1}^{a}(x_i-\bar{x})^2=\frac{S_{xy}^2}{S_{xx}}-\frac{S_{xy}^2}{S_{xx}}=0$ となります。

●まとめると、$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(\bar{y}_{i\cdot}-\hat{y}_{i\cdot})=0$ が証明できました。

(2)(ii)の証明

(ii) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})=0$ を証明します。

＜証明＞

●次に、(式 1)を使って、

$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\frac{S_{xy}}{S_{xx}}(x_i-\bar{x})(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})$として、

●さらに、後ろを
$(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})=(y_{ij}-\bar{\bar{y}})-(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})$に直して、展開すると、

$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\frac{S_{xy}}{S_{xx}}(x_i-\bar{x})(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})=\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(x_i-\bar{x})(y_{ij}-\bar{\bar{y}})-\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})$

ここで、(式 2)の$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{\bar{y}})=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})$より

$\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(x_i-\bar{x})(y_{ij}-\bar{\bar{y}})-\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(x_i-\bar{x})(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})$

$=\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(x_i-\bar{x})(y_{ij}-\bar{\bar{y}})-\frac{S_{xy}}{S_{xx}}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(x_i-\bar{x})(y_{ij}-\bar{\bar{y}})=0$

●まとめると、$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y}_{i\cdot}-\bar{\bar{y}})(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})=0$ が証明できました。

(3)(iii)の証明

(iii) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=0$　を証明します。

＜証明＞

(式 2)の$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{\bar{y}})$=$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})$より

$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})\left((y_{ij}-\bar{\bar{y}})-(\bar{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})\right)$と変形すると、

$=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})\times 0$

$=0$

●まとめると、$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=0$　が証明できました。

【5】まとめ

$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{\bar{y}})^2=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})^2$の証明です。

つまり、

(i) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})=0$

(ii) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\hat{y_{i\cdot}}-\bar{\bar{y}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=0$

(iii) $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{y_{i\cdot}}-\hat{y_{i\cdot}})(y_{ij}-\bar{y_{i\cdot}})=0$

が証明できましたね。

終わり