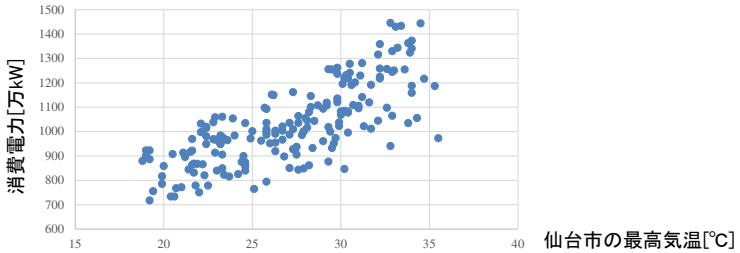
数理統計 補助資料
～線形回帰モデル～

2023年度2学期:　月曜1限, 水曜3限
担当教員:　石垣　司

回帰分析の前に

基本は「散布図」

- **変数 x（最高気温）と y（消費電力）の相関関係の可視化**
  - **この関係性を利用した予測や実証の手段が回帰分析**



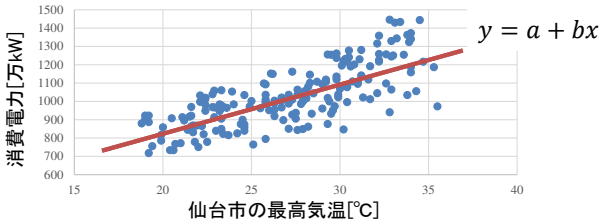
「回帰」とは, 目的変数 y の動きを, 別の説明変数 x と関数 f で予測したり説明したりすること

東北電力ネットワーク：東北6県・新潟エリアの2020&21年7月1日～9月30日の各日の12時から13時の電力使用量[万kW]
https://setsuden.nw.tohoku-epco.co.jp/download.html
気象庁：2020&21年7月1日～9月30日の各日の仙台市の最高気温
https://www.data.jma.go.jp/obd/stats/etrn/

線形単回帰モデル

関数 f に直線を仮定した説明変数が1つだけの回帰分析のためのモデル

$$y = f(x) = a + bx$$



- **因果関係がある場合は, x が原因, y が結果の表現**
- **データ$\{(x_1, y_1), \cdots, (x_N, y_N)\}$を用いて, 散布図の傾向に適合する直線の切片 a と傾き b を推定**
- **切片 a と傾き b が決まれば, 目的変数 y を予測できる**

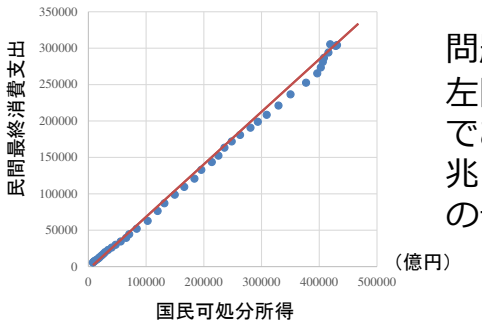
回帰分析と予測

回帰式 $y = \hat{a} + \hat{b}x$ を利用した予測

$\hat{a}$ と $\hat{b}$ はデータ $\{(x_1, y_1), \cdots, (x_N, y_N)\}$ から推定された係数

- **$\hat{y}$: 説明変数 x に対する目的変数 y の予測値**

$$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x$$



1955年度～1998年度(1968SNA)
（内閣府　国民経済計算年次推計）

問題
左図の回帰係数は$\hat{a} \cong 0$, $\hat{b} \cong 0.7$ である。国民可処分所得が500兆円のとき, 民間最終消費支出の予測値は？

回帰係数の推定

データから回帰係数 b と切片 a を決定する

– 合理的な基準と手続きに基づいた推定が必要

基準：残差平方和(RSS: Residual sum of squares)**の最小化**

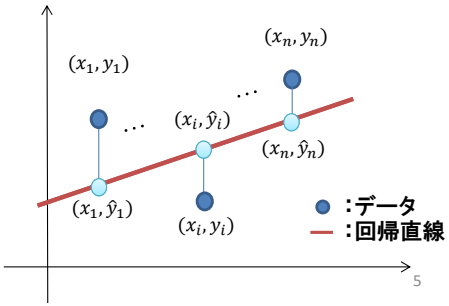
– **残差** e_i　　$e_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (a + bx_i)$

– **残差平方和**　　$RSS = \sum_{i=n}^{n} e_i^2$

手続き：最小2乗法

最小2乗推定量　check!

$$\hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2},\ \hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$$

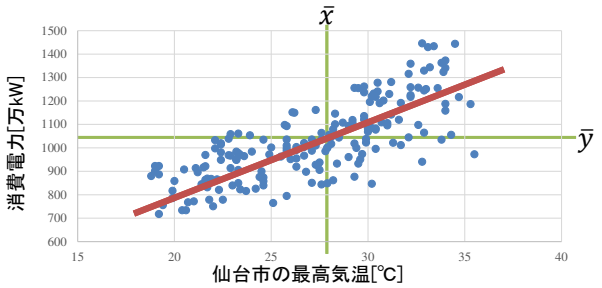


推定された回帰直線の性質

最小2乗法で推定された回帰直線が満たす性質

1. **推定された回帰直線は**$(\bar{x}, \bar{y})$**を通る**
2. $\sum_{i=1}^{n} e_i = 0$（**残差の和は0**）
3. $\sum_{i=1}^{n} e_i x_i = 0$（**残差と説明変数** x **の積和は0**）

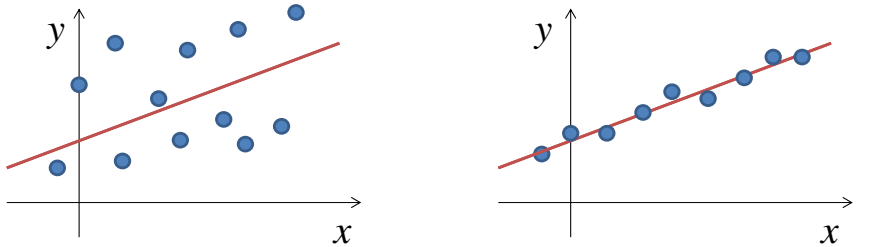
残差と説明変数のベクトルは直交する



決定係数 R^2

単回帰分析の回帰式の適合度(goodness of fit)**の指標**

– **同じ回帰式でもデータの説明力が異なる**



説明力が低い回帰直線 ($R^2 \approx 0$)　　**説明力が高い回帰直線** ($R^2 \approx 1$)

異なるデータから推定された同じ回帰直線

決定係数 R^2　　$(R^2 \leq 1)$

– **適合度が高いと1に近く, 低いとゼロに近い**

決定係数 R^2 の定義と意味

決定係数 R^2 **の定義**

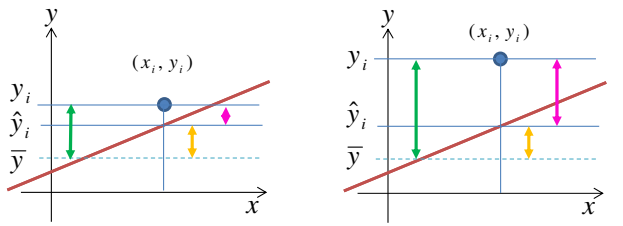
$$R^2 = \frac{ESS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS}$$

全変動(TSS: total sum of squares)
回帰変動(ESS: explained SS)
残差変動(RSS: residual SS)

– **標本分散の分解**　check!

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

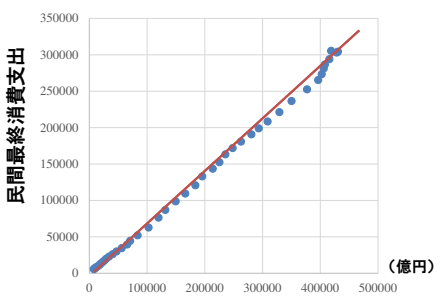
TSS　　ESS　　RSS



適合度が高いデータの例　　**適合度が低いデータの例**

決定係数の例～所得と消費

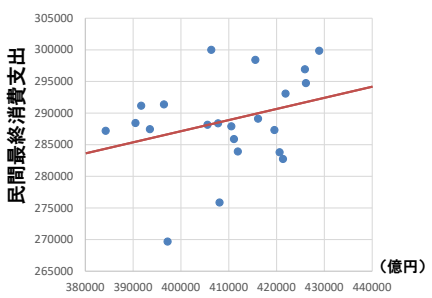
国民可処分所得と民間最終消費支出（内閣府　国民経済計算年次推計）



国民可処分所得

1955年度～1998年度(1968SNA)

$\hat{a} = -2950, \hat{b} = 0.698, R^2 = 0.998$



国民可処分所得

1994年度～2015年度(2008SNA)

$\hat{a} = 215600, \hat{b} = 0.178, R^2 = 0.099$

消費額の全変動の99.8%は
国民可処分所得で説明可能

$\hat{a}$　基礎消費、
$\hat{b}$　限界消費性向

消費額の全変動の約10%は
国民可処分所得で説明可能

線形重回帰分析

複数の説明変数による回帰分析

- 目的変数：　変数 y
- 説明変数：　変数 $x_1, x_2, \cdots, x_P$
- データ：　$\{y_i, x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{iP}\}(i = 1, \cdots, N)$
- 偏回帰係数：　係数 $b_1, b_2, \cdots, b_P$（パラメータ）
- 切片：　係数 b_0（パラメータ）

重回帰式

$$y = b_0 + b_1 x_1 +, \cdots, +b_P x_P$$

重回帰モデル（データによる記述）

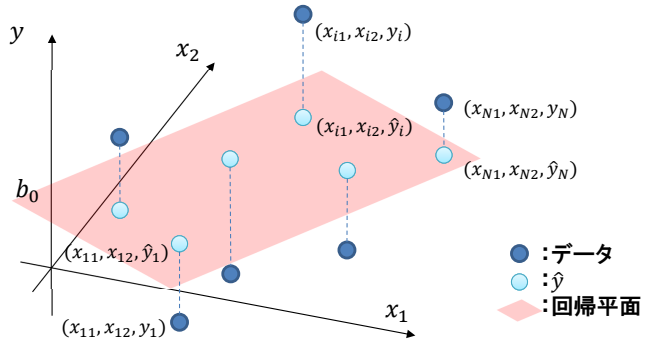
$$y_i = b_0 + b_1 x_{i1} +, \cdots, +b_P x_{iP} + e_i \ \ (i = 1, \cdots N)$$

重回帰モデルのイメージ

2つの説明変数による重回帰モデルのイメージ

- 推定された重回帰モデルによる予測値

$$\hat{y}_i = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 x_{i1} +, \cdots, +\hat{b}_P x_{iP} + e_i \ \ (i = 1, \cdots N)$$



#メモ　ここではまだ誤差項e_iの分布に正規分布を仮定する必要がないことに注意

線形回帰モデルと行列

線形重回帰モデル

$$\begin{cases} y_1 = b_0 + b_1 x_{11} +, \cdots, +b_P x_{1P} + e_1 \\ \vdots \\ y_i = b_0 + b_1 x_{i1} +, \cdots, +b_P x_{iP} + e_i \\ \vdots \\ y_N = b_0 + b_1 x_{N1} +, \cdots, +b_P x_{NP} + e_N \end{cases}$$

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1P} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{i1} & \ddots & x_{iP} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \cdots & x_{NP} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_p \\ \vdots \\ b_P \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_i \\ \vdots \\ e_N \end{bmatrix}$$

線形回帰モデルの行列表現

$$\boldsymbol{y} = X\boldsymbol{b} + \boldsymbol{e}$$

偏回帰係数の推定

最小2乗法による残差平方和の最小化

- 残差ベクトル $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{y} - X\boldsymbol{b}$
- 残差平方和 $\mathrm{RSS} = \sum_{i=n}^{n} e_i^2 = \boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{b})^T(\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{b})$

線形回帰モデルの最小2乗推定量

$$\hat{\boldsymbol{b}} = (X^T X)^{-1} X^T \boldsymbol{y}$$

正規方程式とよばれる

- 最小2乗推定量 $\{\hat{b}_p\}_{p=1,\ldots,P}$ は偏回帰係数と呼ばれる

  偏相関係数と同様に，p 番目の説明変数以外の影響を取り除いた場合の，目的変数 y と説明変数 x_p の単回帰係数に等しい

#メモ　推定量 $\hat{b}_p$ は X と $\boldsymbol{y}$ の各要素から影響を受けるため，行列とベクトルを使用しないと一般的な表記が困難。早い段階（学部1,2年生）から行列とベクトルの取り扱いに慣れましょう

自由度調整済み決定係数

異なる重回帰モデルの適合度を比較するための指標

- 重回帰分析では，独立な説明変数の数が増えるにつれて決定係数の値は1に近づく性質（単調増加性）をもつ

  説明力や予測力が全く同じ2つの回帰モデルの決定係数の性質

  $y = b_0 + b_1 x_1 \rightarrow$ 決定係数 R_1^2

  $y = b_0 + b_1 x_1 + , \cdots , + b_{100} x_{100} \rightarrow$ 決定係数 R_2^2

  $R_1^2 \leq R_2^2$

- 自由度調整済み決定係数は独立な説明変数の増加による単調増加性を修正した指標

自由度調整済み決定係数の定義

$$\text{adjusted } R^2 = 1 - \frac{\frac{RSS}{N-P-1}}{\frac{TSS}{N-1}}$$

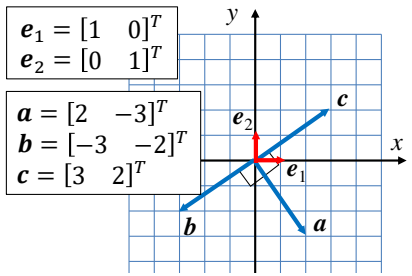
回帰分析の結果の幾何学的理解～内積と正射影

内積の定義： 2つの N 次元ベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ のなす角が θ のとき

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N$$

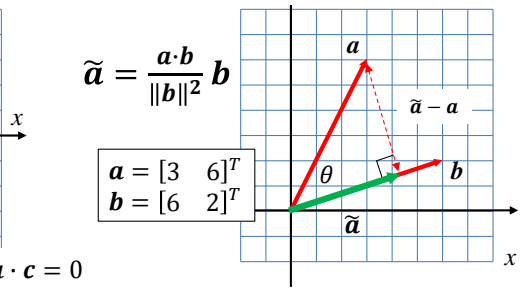
内積の性質

- $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ は直交する
- $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \tilde{\boldsymbol{a}} \cdot \boldsymbol{b}$（$\tilde{\boldsymbol{a}}$ は $\boldsymbol{a}$ から $\boldsymbol{b}$ 上への正射影ベクトル）



直交の例：$\boldsymbol{e}_1 \cdot \boldsymbol{e}_2 = 0,\ \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c} = 0$

ベクトル $\boldsymbol{a}$ の指す座標点とベクトル $\boldsymbol{b}$ 上の点で最も距離が小さいのは正射影ベクトル $\tilde{\boldsymbol{a}}$ の指す座標点

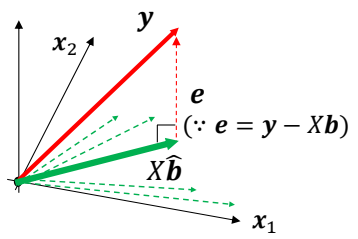


回帰分析の結果の幾何学的理解

最小2乗推定の結果は，N 次元空間内のベクトル $\boldsymbol{y}$ との距離が最も小さくなる P 次元空間（$N > P$）内のベクトル $X\boldsymbol{b}$ を見つけることと同じである（X はデータとして与えられているので，↑を満たす $\boldsymbol{b}$ を探すことと同じ）

例： $\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}, X = [\boldsymbol{x}_1 \quad \boldsymbol{x}_2] = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_i \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{bmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_i \\ \vdots \\ e_N \end{bmatrix}$

#メモ　より正確に理解するためには線形ベクトル空間、基底、部分空間を張るベクトル、直交などの概念を復習しよう。少し難しいが、より一般的にはヒルベルト空間での直交射影定理により、距離が最小の点はただ一つに定まることが分かる



$X\boldsymbol{b}$（⇢）は $\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ 平面上を動く

【図の意味の説明】

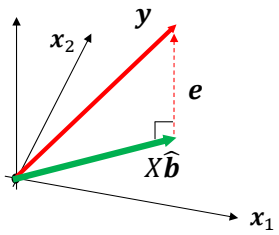
1. $\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ は N 次元空間を動くベクトル
2. $X\boldsymbol{b} = b_0\boldsymbol{x}_1 + b_1\boldsymbol{x}_2$ なので，ベクトル $X\boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{x}_1$ と $\boldsymbol{x}_2$ で張られる平面内のみを動く
3. 最小2乗法は $\boldsymbol{e}^2$ を最小化。これは $\boldsymbol{e}$ の大きさ，つまり，$\boldsymbol{y}$ と $X\boldsymbol{b}$ の距離の最小化と等しい
4. $\boldsymbol{y}$ と $X\boldsymbol{b}$ の距離が最小のとき，ベクトル $\boldsymbol{e}$ と $\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ 平面は直交する。言い換えると，ベクトル $\boldsymbol{y}$ の正射影ベクトルは $X\hat{\boldsymbol{b}}$ となる

一部再掲：推定された回帰直線の性質

最小2乗法で推定された回帰直線が満たす性質

1. **推定された回帰直線は$(\bar{x}, \bar{y})$を通る**
2. $\sum_{i=1}^{n} e_i = 0$（**残差の和は0**）
3. $\sum_{i=1}^{n} e_i x_i = 0$（**残差と説明変数 x の積和は0**）

残差と説明変数のベクトルは直交する



- **ベクトル e と ベクトル $x_1 = [1,1,\ldots,1]^T$ が直交するため，「$2.\ \sum_{i=1}^{n} e_i = 0$」が成立**
- **ベクトル e と ベクトル $x_2 = [x_1,\ldots,x_N]^T$ が直交するため，「$3.\ \sum_{i=1}^{n} e_i x_i = 0$」が成立**

演習問題

線形回帰モデルの最小2乗推定量が

$$\hat{\boldsymbol{b}} = (X^T X)^{-1} X^T \boldsymbol{y}$$

となることを示しなさい。

ヒント：

- **残差平方和** $\mathrm{RSS} = (\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{b})^T(\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{b})$ **は2次式。ベクトル $\boldsymbol{b}$ に対する** RSS **の最小化のためには・・・**
- **転置行列の公式：** $(A+B)^T = A^T + B^T,\ (AB)^T = B^T A^T$
- **ベクトルの微分の公式1：** $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{x}$ **のとき** $\frac{df(\boldsymbol{x})}{d\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a}$
- **ベクトルの微分の公式2：** A **が対称行列のとき**

  $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x}$ **のとき** $\frac{df(\boldsymbol{x})}{d\boldsymbol{x}} = 2A\boldsymbol{x}$