#### 線形回帰(LINEAR REGRESSION)

#### Advertising data

- ・宣伝費と売上に関係はあるか?
- 関係がある場合その強さは?
- どのメディアが売上に最も貢献するか?
- 各メディアの宣伝費を増やしたときの売上の増加をどれだけ正確に予測できるか?
- 将来の売上をどれだけ正確に予測できるか?
- ・宣伝費と売上の関係は線形か?
- メディア間にシナジー効果はあるか?

#### 線形単回帰(simple linear regression)

- ひとつの予測変数 X によって量的応答変数 Y を予測
- 仮定: XとYの関係は線形

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X$$
 例)sales  $\approx \beta_0 + \beta_1 \times \mathsf{TV}$  パラメータ: 切片(intercept)と傾き(slope)

• 学習データによってパラメータを推定し、出力を予測

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$$

## パラメータ推定

• 学習データ

$$\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n)\}$$

• (回帰)残差(residual)

$$e_i = y_i - \hat{y}_i$$
 ~ 予測のずれ

• 残差平方和(residual sum of squares, RSS)

$$RSS = e_1^2 + e_2^2 + \dots + e_n^2$$

$$= \left(y_1 - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_1\right)^2 + \left(y_2 - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_2\right)^2 + \dots + \left(y_n - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_n\right)^2$$

## パラメータ推定

• 残差平方和が最小になるようにパラメータを決める

$$\frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_0} = 0 \qquad \frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_1} = 0$$



$$\hat{\beta}_{1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}}$$

$$\hat{\beta}_0 = \overline{y} - \hat{\beta}_1 \overline{x}$$

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i$$

xの標本平均

νの標本平均

# $\hat{\beta}_0$ , $\hat{\beta}_1$ の導出

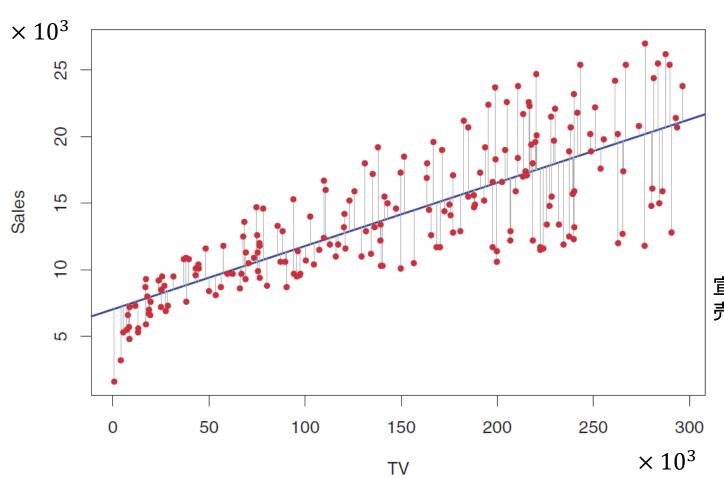
RSS = 
$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)^2$$

$$\begin{cases} \frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = 0 \\ \frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_1} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) x_i = 0 \end{cases}$$

正規方程式 
$$\begin{cases} n\hat{\beta}_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)\hat{\beta}_1 = \sum_{i=1}^n y_i \\ \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)\hat{\beta}_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right)\hat{\beta}_1 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases}$$

#### 例

#### Advertising data



$$\hat{\beta}_0 = 7.03$$

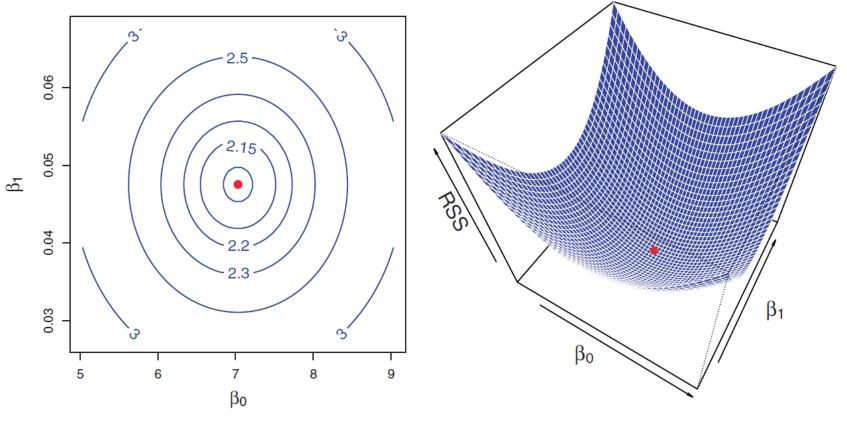
$$\hat{\beta}_1 = 0.0475$$



宣伝費を\$1000増やすと 売上が47.5増える

#### 目的関数の形

• パラメータの値とRSS



下に凸な関数

#### 残差

• 残差に関する性質

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)^2$$

$$\frac{\partial \mathbf{RSS}}{\partial \hat{\beta}_1} = -2\sum_{i=1}^n \left( y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i \right) x_i = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_{i=1}^n e_i x_i = 0$$

残差とx は直交

#### 母回帰直線

- 母集団
  - -fを線形な関数と仮定した場合  $X \ge Y$ の関係は

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$$

平均がゼロ、分散が $\sigma^2$ の正規分布による誤差

- 母回帰直線(population regression line)
  - 母集団での回帰直線

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X$$

#### 正規分布

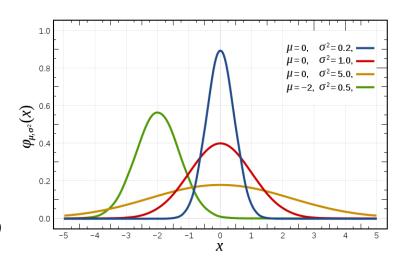
- 正規分布(normal distribution, Gaussian distribution)
  - 代表的な連続型の確率分布
  - 自然界の数多くの現象に対してあてはまる
  - 平均 $\mu$ 分散 $\sigma^2$ の正規分布を $N(\mu,\sigma^2)$ と書く
  - 確率密度関数

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

- 標準化変数

$$Z = (X - \mu)/\sigma$$

は標準正規分布N(0,1)に従う



https://en.wikipedia.org/wiki/Normal\_distribution

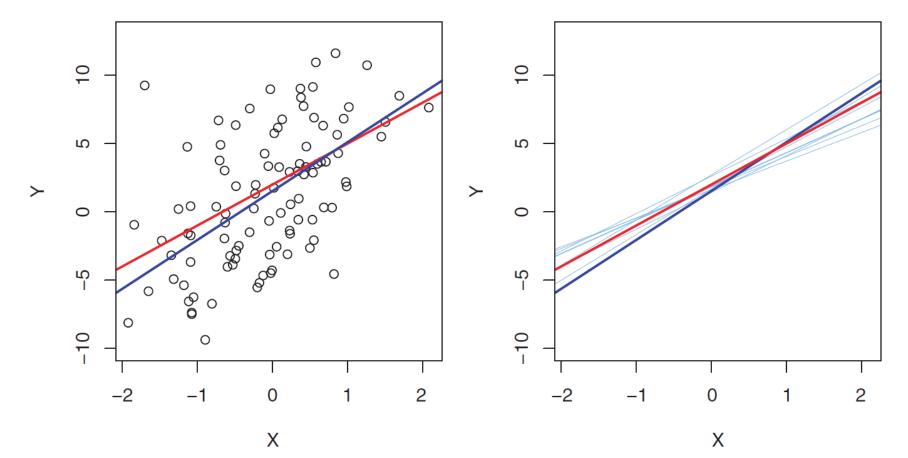
#### 母回帰直線

• 人工データ:  $Y = 2 + 3X + \varepsilon$ 

赤線:母回帰直線

青線:最小二乗による回帰線

薄い青線:異なる観測データに よる最小二乗回帰線



# 傾きの推定量 β̂₁ の諸性質

#### 平均

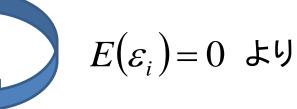
$$\hat{\beta}_{1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \overline{x})(y_{i} - \overline{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \overline{x})^{2}}$$

$$\hat{\beta}_1 = \beta_1 + \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x}) \varepsilon_i}{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2}$$

$$E[\hat{\beta}_1] = \beta_1$$



$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$
 を代入して整理すると





 $\hat{eta}_{_{\!\!1}}$  は $eta_{_{\!\!1}}$  の不偏推定量

# 傾きの推定量 β̂₁ の諸性質

#### 分散

$$\operatorname{Var}(\hat{\beta}_{1}) = E\left[\left(\hat{\beta}_{1} - \beta_{1}\right)^{2}\right]$$

$$= E\left[\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i} - \bar{x})\varepsilon_{i}}{\sum_{i=1}^{n}(x_{i} - \bar{x})^{2}}\right)^{2}\right]$$
誤差項はすべて独立で分散は一分  

$$E\left[\varepsilon_{i}\varepsilon_{j}\right] = 0 \qquad E\left[\varepsilon_{i}^{2}\right] = \sigma^{2}$$

誤差項はすべて独立で分散は一定

$$E\left[\varepsilon_{i}\varepsilon_{j}\right]=0$$
  $E\left[\varepsilon_{i}^{2}\right]=\sigma^{2}$ 

$$= \frac{\overline{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2}}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2} \longleftarrow \overline{r} - \overline{y} \cdot \overline{x} \cdot \overline{p} \cap \overline{x} \cdot \overline{y} \cap \overline{y} \cdot \overline{y} \cap \overline{y$$



$$\hat{eta}_{_{\! 1}}$$
 は平均が  $eta_{_{\! 1}}$  、分散が  $\overline{\phantom{a}}$ 

$$\hat{eta}_1$$
 は平均が $eta_1$ 、分散が $\dfrac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2}$ の正規分布

※独立な正規確率変数の和は正規確率変数

# 傾きの推定量 β₁ の諸性質

・ 誤差の分散  $\sigma^2$  がわかっているのであれば  $\hat{\beta}_1$  の標準 誤差(standard error)は以下のように得られる

$$SE(\hat{\beta}_1) = \sqrt{Var(\hat{\beta}_1)} = \frac{\sigma}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}}$$

• しかし $\sigma^2$  は実際には未知なので、回帰残差から推定

$$\sigma^2 \approx s^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n e_i^2$$

前述の2つの制約条件により自由 度が2つ失われているため



- 信頼区間(confidence interval)
  - 95%の確率でパラメータの真の値が含まれる区間
  - 近似的には

$$\hat{\beta}_1 \pm 2 \cdot \text{SE}(\hat{\beta}_1)$$

- 例) Advertising data
  - $-\hat{\beta}_1 = 0.0475$
  - 95%信頼区間は [0.042, 0.053]

#### 検定

- 帰無仮説:  $\beta_1 = 0$  (XでYを説明することができない)
- 対立仮説: β<sub>1</sub> ≠ 0
- 帰無仮説のもとで *t* 統計量 (*t*-static)を計算

$$t_1 = \frac{\hat{eta}_1 - 0}{\mathrm{SE}(\hat{eta}_1)}$$
  $\leftarrow \hat{eta}_1$  が 0 から標準誤差何個分離れているか?

-t 分布表から有意水準  $\alpha$  に応じたパーセント点  $t_{\alpha\beta}$  を求め

$$\left|t_{1}\right| \geq t_{a/2}$$
 0.05  $\geq$  \$\tau\$ 0.01  $\geq$  \$\tau\$

であれば帰無仮説を棄却(両側検定)

- *t* 統計量
  - $-\hat{eta}_1$ を標準誤差で標準化した

$$t_1 = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\text{SE}(\hat{\beta}_1)}$$

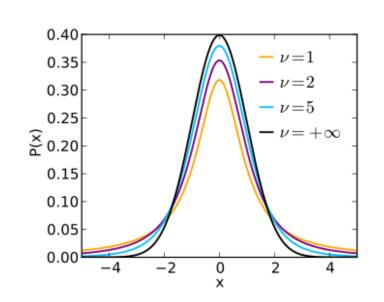
は、自由度 n-2 の t 分布に従う

## t分布(Student's t-distribution)

- 二つの確率変数 Y と Z が次の条件を満たす
  - Z は標準正規確率分布 N(0,1) に従う
  - -Y は自由度  $\nu$  の  $\chi^2$  分布  $\chi^2(k)$  に従う
  - Y と Z は独立である
- ・このとき確率変数

$$t = \frac{Z}{\sqrt{Y/\nu}}$$

が従う確率分布を自由 度  $\nu$ の t分布という



By Skbkekas CC BY 3.0

自由度が30以上であれば正規分布とほぼ同じ

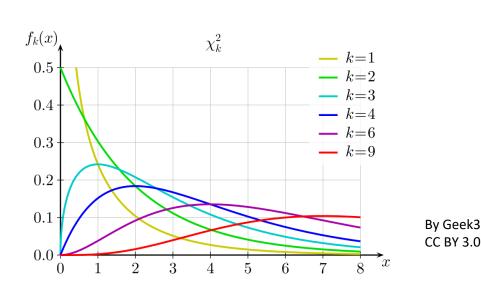
# $\chi^2$ (カイ二乗)分布

•  $Z_1, Z_2, ..., Z_k$ を独立な、標準正規分布N(0,1)に従う確率変数とすると、確率変数

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

が従う確率分布を自由度 k の  $\chi^2$  分布という

- 自由度 k の  $\chi^2$ 分布を  $\chi^2(k)$  と書く
- 性質
  - $E[\chi^2(k)] = k$
  - $-\operatorname{Var}(\chi^2(k)) = 2k$



#### t分布になる理由

$$t_{1} = \frac{\hat{\beta}_{1} - \beta_{1}}{\text{SE}(\hat{\beta}_{1})}$$

$$= \frac{\hat{\beta}_{1} - \beta_{1}}{s / \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}}}$$

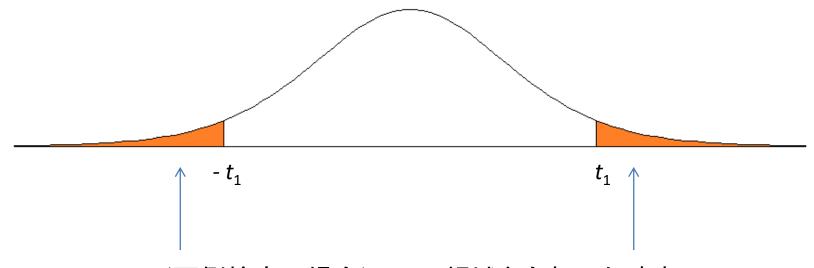
$$= \frac{\hat{\beta}_{1} - \beta_{1}}{\sigma / \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}}} / \sqrt{\frac{(n-2)s^{2}}{\sigma^{2}} / (n-2)}$$

$$= \frac{\hat{\beta}_{1} - \beta_{1}}{\sigma / \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}}} / \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} e_{i}^{2}}{\sigma^{2}} / (n-2)}$$

標準正規分布 N(0,1)に従う

自由度 n-2 の $\chi^2$ 分布に従う (証明は「自然科学の統計学」第2章など)

- p値(*p*-value)
  - 帰無仮説が正しいとした場合に、t<sub>1</sub>よりも極端な t値が観 測される確率
  - p値が小さいほど統計的有意性が高い



(両側検定の場合)2つの領域を合わせた確率

#### パラメータに関する推論

- 切片β₀ に関する推論
  - β<sub>1</sub>と似たような議論により、信頼区間、p値など が計算できる

• Advertising data での  $\beta_0$ ,  $\beta_1$ に関する推論

|                         | Coefficient | Std. error | t-static | p-value  |  |
|-------------------------|-------------|------------|----------|----------|--|
| Intercept ( $\beta_0$ ) | 7.0325      | 0.4578     | 15.36    | < 0.0001 |  |
| TV (β <sub>1</sub> )    | 0.0475      | 0.0027     | 17.67    | < 0.0001 |  |

 $\beta_1 = 0$  だとしたら  $|\hat{\beta}_1| \ge 0.0475$  のような結果が得られる確率は 0.0001 より小さい  $\rightarrow \beta_1 = 0$  という仮説を棄却

## モデルの評価

- モデルがどの程度データにフィットしているのかを定 量評価したい
  - RSE
  - 決定係数R<sup>2</sup>

- RSE (residual standard error)
  - 誤差 ε の標準偏差の推定量

RSE = 
$$\sqrt{\frac{1}{n-2}}$$
RSS =  $\sqrt{\frac{1}{n-2}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$ 

例) 前出の Advertising data の例では RSE は 3.26

#### モデルの評価

- 決定係数*R*<sup>2</sup>
  - 応答変数 *Y* の変動を *X* による回帰式で減らせた割合

回帰をしても残っている変動の和 
$$R^2 = \frac{TSS - RSS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS}$$
 もともとの変動の総和

Total sum of squares: 
$$TSS = \sum_{y=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2$$

例)前出の Advertising data の例では R<sup>2</sup> は 0.61

- モジュールのインストール
  - Windows

```
> py -m pip install statsmodels
```

#### Linux

> python3 -m pip install statsmodels

#### • モジュールの読み込み

```
>>> import numpy as np
>>> import matplotlib.pyplot as plt
>>> import pandas as pd
>>> import math
>>> import statsmodels.api as sm
>>> import statsmodels.formula.api as smf
>>> from statsmodels.graphics.regressionplots import *
>>> from sklearn import datasets, linear model
```

• Bostonデータセットの読み込み

```
>>> from sklearn.datasets import load_boston
>>> b = load_boston()
>>> print(b.DESCR)
>>> Boston = pd.DataFrame(b.data, columns=b.feature_names)
>>> list(Boston)
['CRIM', 'ZN', 'INDUS', 'CHAS', 'NOX', 'RM', 'AGE', 'DIS',
'RAD', 'TAX', 'PTRATIO', 'B', 'LSTAT']
>>> Boston.head()
...
>>> Boston.shape
(506, 13)
```

- Boston データセット
  - ボストン郊外の住宅価格データ

|   | crim    | zn   | indus | chas | nox   | rm    | age  | dis    | rad | tax |
|---|---------|------|-------|------|-------|-------|------|--------|-----|-----|
| 1 | 0.00632 | 18   | 2.31  | 0    | 0.538 | 6.575 | 65.2 | 4.09   | 1   | 296 |
| 2 | 0.02731 | 0    | 7.07  | 0    | 0.469 | 6.421 | 78.9 | 4.9671 | 2   | 242 |
| 3 | 0.02729 | 0    | 7.07  | 0    | 0.469 | 7.185 | 61.1 | 4.9671 | 2   | 242 |
| 4 | 0.03237 | 0    | 2.18  | 0    | 0.458 | 6.998 | 45.8 | 6.0622 | 3   | 222 |
| 5 | 0.06905 | 0    | 2.18  | 0    | 0.458 | 7.147 | 54.2 | 6.0622 | 3   | 222 |
| 6 | 0.02985 | 0    | 2.18  | 0    | 0.458 | 6.43  | 58.7 | 6.0622 | 3   | 222 |
| 7 | 0.08829 | 12.5 | 7.87  | 0    | 0.524 | 6.012 | 66.6 | 5.5605 | 5   | 311 |
| 8 | 0.14455 | 12.5 | 7.87  | 0    | 0.524 | 6.172 | 96.1 | 5.9505 | 5   | 311 |
| 9 | 0.21124 | 12.5 | 7.87  | 0    | 0.524 | 5.631 | 100  | 6.0821 | 5   | 311 |

- CRIM: per capita crime rate by town
- **-** :
- LSTAT: lower status of population (percent)
- MEDV: median value of owner-occupied homes in \$1000s

- 線形単回帰
  - ols()
    - ols(y ~ x, data)で x を予測変数、 y を応答変数として 線形モデル(linear model)をフィッテイング(パラメータ推定)

```
>>> Boston['MEDV'] = b.target
>>> lm = smf.ols('MEDV ~ LSTAT', data=Boston).fit()
```

- フィットさせたモデルの情報
  - summary()

```
>>> lm.summary()
OLS Regression Results
Dep. Variable:
                           MEDV R-squared:
                                                            0.544
Model:
                            OLS Adj. R-squared:
                                                            0.543
                 Least Squares F-statistic:
                                                            601.6
Method:
                Tue, 07 May 2019 Prob (F-statistic):
                                                      5.08e-88
Date:
                        23:28:16 Log-Likelihood:
Time:
                                                          -1641.5
No. Observations:
                            506 AIC:
                                                            3287.
Df Residuals:
                            504 BIC:
                                                            3295.
Df Model:
Covariance Type:
                 nonrobust
              coef std err t P>|t| [0.025 0.975]
Intercept 34.5538 0.563 61.415 0.000 33.448 35.659
      -0.9500 0.039 -24.528 0.000 -1.026 -0.874
LSTAT
                      137.043 Durbin-Watson:
                                                            0.892
Omnibus:
                          0.000 Jarque-Bera (JB):
                                                    291.373
Prob(Omnibus):
                          1.453 Prob(JB):
                                                          5.36e-64
Skew:
                           5.319
                                                              29.7
Kurtosis:
                                 Cond. No.
```

フィットさせたモデルの情報パラメータの値

```
>>> lm.params
Intercept 34.553841
LSTAT -0.950049
dtype: float64
```

#### - 信頼区間

- フィットさせたモデルを用いて予測
  - predict()

#### ・プロット

```
>>> Boston.plot(kind='scatter', x='LSTAT', y='MEDV')
>>> plt.show()
>>> range = pd.DataFrame({'LSTAT': [Boston.LSTAT.min(),
Boston.LSTAT.max()]})
>>> preds = lm.predict(range)
>>> plt.plot(range, preds, c='red', linewidth=2)
>>> Boston.plot(kind='scatter', x='LSTAT', y='MEDV')
>>> plt.show()
```

#### ・ 残差プロット

```
>>> fig, ((ax1, ax2), (ax3, ax4)) = plt.subplots(2, 2)
>>> ax1.plot(Boston.LSTAT, lm.predict(),'ro')
>>> ax2.plot(lm.predict(), lm.resid, 'go')
>>> ax3.plot(lm.predict(), lm.resid_pearson, 'bo')
>>> plt.show()
```

• scikit-learn による方法

```
>>> x = pd.DataFrame (Boston.LSTAT)
>>> y = Boston.MEDV
>>> print(x.shape)
(506, 1)
>>> model = linear model.LinearRegression()
>>> model.fit(x, y)
>>> print(model.intercept )
>>> print(model.coef )
```

#### 多重線形回帰

Advertising data

- 予測変数: TV, radio, newspaper

- 応答変数: sales

・ 複数の変数を用いて予測したい

- 個別に線形単回帰を行うと

|           | Coefficient | Coefficient Std. error t-static |       | p-value  |  |
|-----------|-------------|---------------------------------|-------|----------|--|
| Intercept | 9.312       | 0.563                           | 16.54 | < 0.0001 |  |
| radio     | 0.203       | 0.020                           | 9.92  | < 0.0001 |  |

|           | Coefficient | Std. error | t-static | p-value  |  |
|-----------|-------------|------------|----------|----------|--|
| Intercept | 12.351      | 0.621      | 19.88    | < 0.0001 |  |
| newspaper | 0.055       | 0.017      | 3.30     | < 0.0001 |  |

#### 多重線形回帰

- ・ 個別に線形単回帰を行うことの問題点
  - 予測の際に複数の単回帰モデルをどのように組み合わせるべきかが明らかでない
  - 予測変数どうしの関係を考慮できない

# 多重線形回帰

- 多重線形回帰(multiple linear regression、重回帰)
  - 複数の予測変数を使う単一のモデルで回帰

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_p X_p + \varepsilon$$

 $eta_{\mathbf{j}}$ : 他の予測変数を固定して、 $X_{\mathbf{j}}$ を1単位増やしたときに増えるYの量

例)

sales  $\approx \beta_0 + \beta_1 \times TV + \beta_2 \times radio + \beta_3 \times newspaper + \varepsilon$ 

# パラメータ推定

• 予測

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \dots + \hat{\beta}_p x_p$$

• 残差平方和

RSS = 
$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$
  
=  $\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_{i1} - \hat{\beta}_2 x_{i2} - \dots - \hat{\beta}_p x_{ip})^2$ 

# パラメータ推定

• 勾配がゼロになるパラメータを直接求める

$$\frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_0} = 0$$

$$\frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_1} = 0$$

:

$$\frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_p} = 0$$



行列演算で解析的に解ける

# βの求め方

• RSS を行列で表すと

$$RSS = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)$$

$$\frac{\partial RSS}{\partial \beta} = -2\mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) = 0$$

より

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

- $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)^T$
- ・学習データ(入力)

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$$

•学習データ(出力)  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ 

# パラメータ推定

• 勾配法による逐次計算でも求められる

$$\frac{\partial RSS}{\partial \hat{\beta}_0} = -2\sum_{i=1}^n e_i$$

$$\frac{\partial \mathbf{RSS}}{\partial \hat{\beta}_1} = -2\sum_{i=1}^n e_i x_{i1}$$

:

$$\frac{\partial \mathbf{RSS}}{\partial \hat{\boldsymbol{\beta}}_{p}} = -2\sum_{i=1}^{n} e_{i} x_{ip}$$

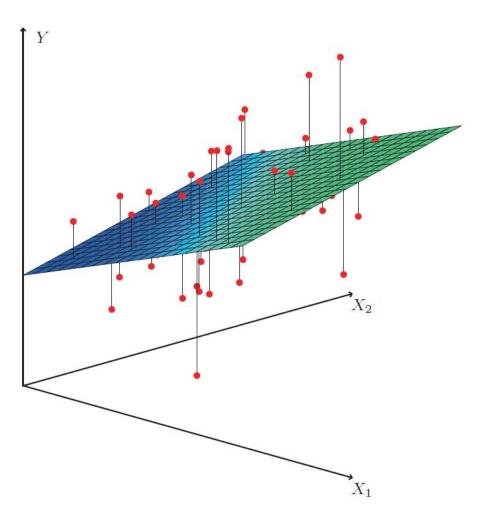
勾配情報を使って再急降下法、 準ニュートン法などを行う

# 例

・ 予測変数が2個

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2$$

回帰「直線」ではなく平面



## 単回帰と重回帰

### Advertising data

#### 重回帰の結果

|           | Coefficient | Std. error | t-static | p-value  |
|-----------|-------------|------------|----------|----------|
| Intercept | 2.939       | 0.3119     | 9.42     | < 0.0001 |
| TV        | 0.046       | 0.0014     | 32.81    | < 0.0001 |
| radio     | 0.189       | 0.0086     | 21.89    | < 0.0001 |
| newspaper | -0.001      | 0.0059     | -0.18    | 0.8599   |



矛盾???

(newspaper の効果の有無が全く違う)

#### 単回帰の結果

|           | Coefficient | Std. error | t-static | p-value  |
|-----------|-------------|------------|----------|----------|
| Intercept | 12.351      | 0.621      | 19.88    | < 0.0001 |
| newspaper | 0.055       | 0.017      | 3.30     | < 0.0001 |

## 単回帰と重回帰

### Advertising data

#### 相関行列

|           | TV     | radio  | newspaper | sales  |
|-----------|--------|--------|-----------|--------|
| TV        | 1.0000 | 0.0548 | 0.0567    | 0.7822 |
| radio     |        | 1.0000 | 0.3541    | 0.5762 |
| newspaper |        |        | 1.0000    | 0.2283 |
| sales     |        |        |           | 1.0000 |

newspaperとradioに相関あり

newspaper による宣伝費増加で売り上げが上がるように見えたのは、 実は radio の宣伝費が増加していたから

他の例) アイスクリームの売り上げとサメによる被害の数

- 重回帰分析を行うときに知りたいこと
  - 応答変数 Y の値を予測するにあたり、予測変数  $X_1, X_2, ..., X_p$  のうち少なくとも一つが有用である かどうか
  - すべての予測変数が Y を説明するのに有用なのか、あるいは一部だけが有用なのか
  - モデルはどれぐらいデータにフィットしているのか
  - 予測変数の値が与えられたとき、応答変数の値 をどれだけ正確に予測できるのか

- 応答変数と予測変数の間に関係があるかどうかの検定
  - 帰無仮説  $H_0$ :  $\beta_1 = \beta_2 = ... = \beta_p = 0$
  - 対立仮説  $H_a$ : 少なくとも一つの  $\beta_j$  が 0 ではない
  - 帰無仮説が正しい場合、以下のF統計量(f-static)はF分布(p, n-p-1)に従う

$$F = \frac{(TSS - RSS)/p}{RSS/(n-p-1)}$$

$$TSS = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$$

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$$

$$E[RSS/(n-p-1)] = \sigma^2$$
  
 $H_o$ が正しい場合は $E[(TSS-RSS)/p] = \sigma^2$ 

## E[TSS], E[RSS] について

## ・ 帰無仮説が正しい場合

$$E\left[\frac{\mathsf{TSS}}{n}\right] = \frac{n-1}{n}\sigma^2$$

 $E\left|\frac{\mathrm{TSS}}{n}\right| = \frac{n-1}{n}\sigma^2$  ← 自由度が1あるぶん標本分散は真の分散より小さくなる

$$E[TSS] = (n-1)\sigma^2$$

$$E\left|\frac{\mathrm{RSS}}{n}\right| = \frac{n-p-1}{n}\sigma^2$$
  $\leftarrow$  パラメータが  $p+1$  個あるので

$$E[RSS] = (n - p - 1)\sigma^2$$

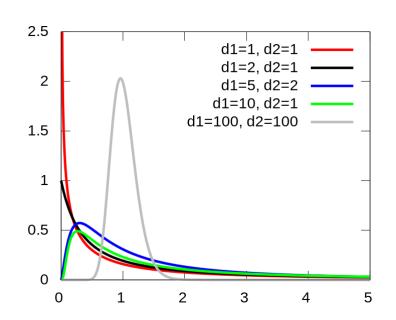
# F分布

### • 確率変数

$$X = \frac{U_1/d_1}{U_2/d_2}$$

### が従う確率分布

 $U_1$ : 自由度  $d_1$  の $\chi^2$ 分布に従う確率変数  $U_2$ : 自由度  $d_2$  の $\chi^2$ 分布に従う確率変数  $U_1$  と  $U_2$  は独立



By <u>IkamusumeFan</u> CC BY-SA 4.0

Advertising data での例

| Quantity                      | Value |  |
|-------------------------------|-------|--|
| Residual Standard Error (RSE) | 1.69  |  |
| $R^2$                         | 0.897 |  |
| F-static                      | 570   |  |

- F統計量が570
- F分布(p, n-p-1) と F統計量からp値が計算できる
  - この場合p値はほとんどゼロ
    - → 帰無仮説は棄却される

- ・ 応答変数と予測変数(の特定の部分集合)の間に関係があるかどうかの検定
  - 帰無仮説  $H_0$ :  $\beta_{p-q+1} = \beta_{p-q+2} = \dots = \beta_p = 0$
  - 対立仮説  $H_a$ : 少なくとも一つの  $\beta_i$  (j>p-q)がゼロではない
  - 帰無仮説が正しい場合、以下のF統計量(f-static)はF分布 (q, n-p-1)に従う

$$F = \frac{(RSS_0 - RSS)/q}{RSS/(n-p-1)}$$

 $\mathbf{RSS}_0$ : 最後のq個の予測変数を使わないモデルで得られたRSS