回帰分析

モデルの推定

村田 昇

2020.10.13

講義の予定

- **第 1 日: 回帰モデルの考え方と推定**
- 第 2 日: モデルの評価
- 第 3 日: モデルによる予測と発展的なモデル

回帰分析の考え方

回帰分析 (regression analysis)

- ある変量を別の変量で説明する関係式を構成
- 関係式: **回帰式** (regression equation)
  - 説明される側: **目的変数**, 被説明変数, 従属変数, 応答変数
  - 説明する側: **説明変数**, 独立変数, 共変量
- 説明変数の数による分類:
  - 一つの場合: **単回帰** (simple regression)
  - 複数の場合: **重回帰** (multiple regression)

一般の回帰の枠組

- 説明変数: $x_1, \dots, x_p$ (p 次元)
- 目的変数: y (1 次元)
- 観測データ: n 個の $(y, x_1, \dots, x_p)$ の組

$$\{(y_i, x_{i1}, \dots, x_{ip})\}_{i=1}^n$$

- y を $x_1, \dots, x_p$ で説明するための関係式を構成:

$$y = f(x_1, \dots, x_p)$$

線形回帰 (linear regression)

- 任意の f では一般的すぎて分析に不向き
- f として 1 次関数を考える
  ある定数 $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ を用いた以下の式:

$$f(x_1, \dots, x_p) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p$$

  - 1 次関数の場合: **線形回帰** (linear regression)
  - 一般の場合: 非線形回帰 (nonlinear regression)
- 非線形関係は新たな説明変数の導入で対応可能
  - 適切な多項式 $x_j^2, x_j x_k, x_j x_k x_l, \dots$
  - その他の非線形変換 $\log x_j, x_j^\alpha, \dots$

回帰係数

- 線形回帰式:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p$$

- $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$: **回帰係数** (regression coefficients)
- β_0: **定数項 / 切片** (constant term / intersection)
- 線形回帰分析: 未知の回帰係数をデータから決定

回帰の確率モデル

- 回帰式の不確定性
  - データは一般に観測誤差などランダムな変動を含む
  - 回帰式がそのまま成立することは期待できない
- 確率モデル: データのばらつきを表す項 ϵ_i を追加

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i \quad (i = 1, \dots, n)$$

  - $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$: **誤差項 / 撹乱項** (error / disturbance term)
    * 誤差項は独立な確率変数と仮定
    * 多くの場合，平均 0，分散 σ^2 の正規分布を仮定
  - **推定** (estimation): 観測データから $(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)$ を決定

回帰係数の推定

残差

- **残差** (residual): 回帰式で説明できない変動
- 回帰係数 $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)^\mathsf{T}$ を持つ回帰式の残差:

$$e_i(\boldsymbol{\beta}) = y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip}) \quad (i = 1, \dots, n)$$

- 残差 $e_i(\boldsymbol{\beta})$ の絶対値が小さいほど当てはまりがよい

最小二乗法 (least squares)

- **残差平方和** (residual sum of squares):

$$S(\boldsymbol{\beta}) := \sum_{i=1}^{n} e_i(\boldsymbol{\beta})^2$$

- **最小二乗推定量** (least squares estimator):
    残差平方和 $S(\boldsymbol{\beta})$ を最小にする $\boldsymbol{\beta}$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)^{\mathsf{T}} := \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} S(\boldsymbol{\beta})$$

行列の定義

- デザイン行列 (design matrix):

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

ベクトルの定義

- 目的変数，誤差，回帰係数のベクトル:

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

行列・ベクトルによる表現

- 確率モデル:

$$\boldsymbol{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

- 残差平方和:

$$S(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{\beta})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{\beta})$$

解の条件

- 解 $\boldsymbol{\beta}$ では残差平方和の勾配は零ベクトル

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}} S(\boldsymbol{\beta}) = \Big(\frac{\partial S}{\partial \beta_0}(\boldsymbol{\beta}), \frac{\partial S}{\partial \beta_1}(\boldsymbol{\beta}), \dots, \frac{\partial S}{\partial \beta_p}(\boldsymbol{\beta}) \Big)^{\mathsf{T}} = \mathbf{0}$$

演習

問題

- 残差平方和 $S(\boldsymbol{\beta})$ をベクトル $\boldsymbol{\beta}$ で微分し，解の条件を求めよ．

正規方程式

正規方程式 (normal equation)

- **正規方程式** (normal equation):

$$X^\top X\boldsymbol{\beta} = X^\top \boldsymbol{y}$$

- **Gram 行列** (Gram matrix): $X^\top X$
  - $(p+1)\times(p+1)$ 行列 (正方行列)
  - 正定対称行列 (固有値が非負)

正規方程式の解

- 正規方程式の基本的な性質
  - 正規方程式は必ず解をもつ (一意に決まらない場合もある)
  - 正規方程式の解は最小二乗推定量であるための必要条件
- 解の一意性の条件
  - Gram 行列 $X^\top X$ が **正則**
  - X の列ベクトルが独立 (後述)
- 正規方程式の解:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X^\top X)^{-1}X^\top \boldsymbol{y}$$

最小二乗推定量の性質

解析の上での良い条件

- 最小二乗推定量がただ一つだけ存在する条件
  (以下同値条件)
  - $X^\top X$ が正則
  - $X^\top X$ の階数が p+1
  - X の階数が p+1
  - X の列ベクトルが **1 次独立**

解析の上での良くない条件

- 説明変数が 1 次従属: **多重共線性** (multicollinearity)
- 多重共線性が強くならないように説明変数を選択
  - X の列 (説明変数) の独立性を担保する
  - 説明変数が互いに異なる情報をもつように選ぶ
  - 似た性質をもつ説明変数の重複は避ける

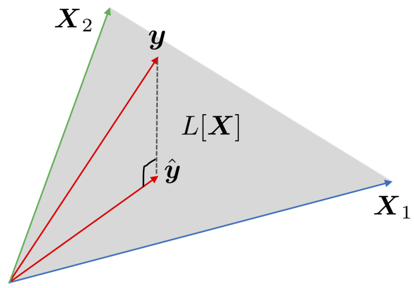

図 1: $n = 3$, $p + 1 = 2$ の場合の最小二乗法による推定

推定の幾何学的解釈

- **あてはめ値 / 予測値** (fitted values / predicted values):

$$\hat{\boldsymbol{y}} = X\hat{\boldsymbol{\beta}} = \hat{\beta}_0 X_{\text{第 0 列}} + \cdots + \hat{\beta}_p X_{\text{第 p 列}}$$

- 最小二乗推定量 $\hat{\boldsymbol{y}}$ の幾何学的性質:
  - $L[X]$: X の列ベクトルが張る $\mathbb{R}^n$ の部分線形空間
  - X の階数が $p{+}1$ ならば $L[X]$ の次元は $p{+}1$ (解の一意性)
  - $\hat{\boldsymbol{y}}$ は $\boldsymbol{y}$ の $L[X]$ への直交射影
  - **残差** (residuals) $\hat{\boldsymbol{\epsilon}} := \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}$ はあてはめ値 $\hat{\boldsymbol{y}}$ に直交

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \hat{\boldsymbol{y}} = 0$$

線形回帰式と標本平均

- $\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^{\mathsf{T}}$: 説明変数の i 番目の観測データ
- 説明変数および目的変数の標本平均:

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i, \qquad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i,$$

- $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ が最小二乗推定量のとき以下が成立:

$$\bar{y} = (1, \bar{\boldsymbol{x}}^{\mathsf{T}})\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

演習

問題

- 最小二乗推定量について以下の問に答えなさい.
  - 残差の標本平均が 0 となることを示しなさい.

$$\mathbf{1}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}) = \mathbf{1}^{\mathsf{T}}\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = 0$$

但し $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^{\mathsf{T}}$

- 回帰式が標本平均を通ることを示しなさい.

$$\bar{y} = (1, \bar{\boldsymbol{x}}^{\mathsf{T}})\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

残差の分解

最小二乗推定量の残差

- 観測値と推定値 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ による予測値の差:

$$\hat{\epsilon}_i = y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \cdots + \hat{\beta}_p x_{ip}) \quad (i = 1, \dots, n)$$

  - 誤差項 $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$ の推定値
  - 全てができるだけ小さいほど良い
  - 予測値とは独立に偏りがないほど良い

- 残差ベクトル:

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = (\hat{\epsilon}_1, \hat{\epsilon}_2, \dots, \hat{\epsilon}_n)^{\mathsf{T}}$$

平方和の分解

- 標本平均のベクトル: $\bar{\boldsymbol{y}} = \bar{y}\mathbf{1} = (\bar{y}, \bar{y}, \dots, \bar{y})^{\mathsf{T}}$
- いろいろなばらつき
  - $S_y = (\boldsymbol{y}-\bar{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y}-\bar{\boldsymbol{y}})$: 目的変数のばらつき
  - $S \ \ = (\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})$: 残差のばらつき ($\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{\mathsf{T}}\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$)
  - $S_r = (\hat{\boldsymbol{y}}-\bar{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\hat{\boldsymbol{y}}-\bar{\boldsymbol{y}})$: あてはめ値 (回帰) のばらつき
- 3 つのばらつき (平方和) の関係

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{y}-\bar{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y}-\bar{\boldsymbol{y}}) = (\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}) + (\hat{\boldsymbol{y}}-\bar{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\hat{\boldsymbol{y}}-\bar{\boldsymbol{y}}) \\
&S_y = S + S_r
\end{aligned}$$

演習

問題

- 以下の問に答えなさい.
  - あてはめ値と残差のベクトルが直交することを示しなさい.

$$\hat{\boldsymbol{y}}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}) = \hat{\boldsymbol{y}}^{\mathsf{T}}\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = 0$$

  - 残差平方和の分解が成り立つことを示しなさい.

$$S_y = S + S_r$$

決定係数

回帰式の寄与

- ばらつきの分解:

$$S_y\ (\text{目的変数}) = S\ (\text{残差}) + S_r\ (\text{あてはめ値})$$

- 回帰式で説明できるばらつきの比率:

$$(\text{回帰式の寄与率}) = \frac{S_r}{S_y} = 1 - \frac{S}{S_y}$$

- 回帰式のあてはまり具合を評価する代表的な指標

決定係数 (R^2 値)

- **決定係数** (R-squared):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \hat{\epsilon}_i^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}$$

- **自由度調整済み決定係数** (adjusted R-squared):

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{\frac{1}{n-p-1} \sum_{i=1}^{n} \hat{\epsilon}_i^2}{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}$$

  不偏分散で補正している