

回帰分析

回帰モデルの考え方と推定

村田 昇

講義概要

- 第1回：回帰モデルの考え方と推定
- 第2回：モデルの評価
- 第3回：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

- ある変量を別の変量で説明する関係式を構成する
- 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)
- 回帰式： y を x_1, \dots, x_p で説明するための関係式

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

- 観測データ：n 個の (y, x_1, \dots, x_p) の組

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

線形回帰

- 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： $\log x_j, x_j^\alpha, \dots$
 - 全ての非線形関係ではないことに注意

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 (linear regression analysis)
 - 未知の回帰係数をデータから決定する分析方法
 - 決定された回帰係数の統計的な性質を診断

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 / 攪乱項** (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)：観測データから回帰係数を決定

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 $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)^T$ を持つ回帰式の残差

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

- 残差 $e_i(\beta)$ の絶対値が小さいほど当てはまりがよい

最小二乗法

- 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 $\boldsymbol{\beta}$

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

行列の定義

- デザイン行列 (design matrix)

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

– $n \times (p+1)$ 行列

ベクトルの定義

- 目的変数, 誤差, 回帰係数のベクトル

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

– $\mathbf{y}, \boldsymbol{\epsilon}$ は n 次元ベクトル

– $\boldsymbol{\beta}$ は $p+1$ 次元ベクトル

行列・ベクトルによる表現

- 確率モデル

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

- 残差平方和

$$S(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta})^\top (\mathbf{y} - X\boldsymbol{\beta})$$

解の条件

- 解 β では残差平方和の勾配は零ベクトル

$$\nabla S(\beta) = \left(\frac{\partial S}{\partial \beta_0}(\beta), \frac{\partial S}{\partial \beta_1}(\beta), \dots, \frac{\partial S}{\partial \beta_p}(\beta) \right)^T = \mathbf{0}$$

- 成分 $(j = 0, 1, \dots, p)$ ごとの条件式

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_j}(\beta) = -2 \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{k=0}^p \beta_k x_{ik} \right) x_{ij} = 0$$

ただし $x_{i0} = 1$ ($i = 1, \dots, n$)

正規方程式

正規方程式

- 正規方程式 (normal equation)

$$X^T X \beta = X^T y$$

- $X^T X$: **Gram 行列** (Gram matrix)
 - $(p+1) \times (p+1)$ 行列 (正方行列)
 - 半正定値行列 (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 $X^T X$ が **正則**
 - X の列ベクトルが独立 (後述)
- 正規方程式の解

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

実習

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
 - $X^T X$ が正則
 - $X^T X$ 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**

これらは同値条件

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

推定の幾何学的解釈

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

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

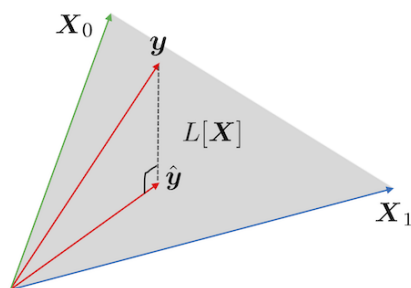


Figure 1: $n = 3, p + 1 = 2$ の場合の最小二乗法による推定

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

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

線形回帰式と標本平均

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

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

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

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

実習

残差の分解

最小二乗推定量の残差

- 観測値と推定値 $\hat{\beta}$ 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無いほど良い

- 残差ベクトル

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

平方和の分解

- $\bar{\mathbf{y}} = \bar{y}\mathbf{1} = (\bar{y}, \bar{y}, \dots, \bar{y})^T$: 標本平均のベクトル
- いろいろなばらつき
 - $S_y = (\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}})^T (\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}})$: 目的変数のばらつき
 - $S = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$: 残差のばらつき ($\hat{\epsilon}^T \hat{\epsilon}$)
 - $S_r = (\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}})^T (\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}})$: 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

$$(\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}})^T (\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}) = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) + (\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}})^T (\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}})$$

$$S_y = S + S_r$$

実習

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

実習

次回の予定

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