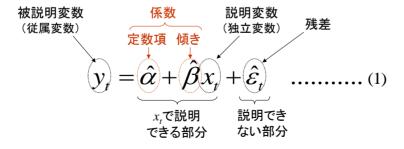
最小二乗法① 数学的性質 経済統計分析 (2013年度秋学期)

▲回帰分析と最小二乗法

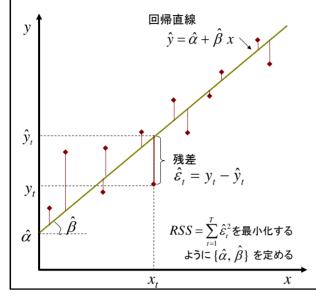
- 被説明変数y,の動きを説明変数x,の動きで説明=回帰分析
 - □ 説明変数が1つ ⇒ 単回帰
 - □ 説明変数が2つ以上 ⇒ 重回帰



説明できない部分が小さくなるように回帰式の係数 (â, β)を推定する有力な方法 =最小二乗法



△最小二乗法による回帰の考え方



- ■回帰直線を標本のなるべく「近く」に通す
- ■「近く」を観測点の<u>y軸方</u> 向の距離(=残差)で測る
- ■全体として垂直方向の距離を最小化するには?
 - (1) 残差の総和を最小化 -正負が相殺される
 - (2) 残差の絶対値の総和 を最小化
 - ー数学的に扱いにくい
 - (3) 残差の2乗の総和(残 差平方和)を最小化
 - ⇒最小二乗法

3



△最小二乗法(単回帰)

■ 説明できない部分(=残差)の2乗の総和(残差平方和 RSS) を最小化するように係数($\hat{\alpha},\hat{\beta}$)を求める

$$\min_{\hat{a},\hat{eta}}$$
 $\sum \hat{\mathcal{E}}_t^2$ 残差の2乗の総和

■ 最小化の一階条件 ⇒ 2本の方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial \sum \hat{\mathcal{E}}_{t}^{2}}{\partial \hat{\alpha}} = 0\\ \frac{\partial \sum \hat{\mathcal{E}}_{t}^{2}}{\partial \hat{\beta}} = 0 \end{cases}$$

■ 2本の方程式、2個の未知数($\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$) ⇒ 方程式を解いて($\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$)を求める



△最小二乗法(単回帰)

- 残差 $\hat{\varepsilon}_t = y_t (\hat{\alpha} + \hat{\beta} x_t)$ の平方和(RSS)を最小化 $\min_{\hat{\alpha}, \hat{\beta}} RSS = \sum_t \hat{\varepsilon}_t^2 = \sum_t (y_t \hat{\alpha} \hat{\beta} x_t)^2$
- 最小化の一階条件

(2),(3) 式 (=正規方程式)を解いて、RSSを最小化する $\hat{\alpha},\hat{\beta}$ を求める

5



正規方程式

$$\begin{cases}
T\hat{\alpha} + \hat{\beta} \sum x_t = \sum y_t & \dots \\
\hat{\alpha} \sum x_t + \hat{\beta} \sum x_t^2 = \sum x_t y_t & \dots \\
\end{cases} (2)'$$

 \Rightarrow 2つの未知数に方程式2本: これを解けば $\{\hat{lpha},\hat{eta}\}$ が得られる

(1)'
$$\hat{\alpha} = \left(\frac{\sum y_t}{T}\right) - \hat{\beta}\left(\frac{\sum x_t}{T}\right) = \bar{y} - \hat{\beta}\bar{x}$$

(2) に代入して
$$T\overline{x}\overline{y} - \hat{\beta}T\overline{x}^2 + \hat{\beta}\sum x_t^2 = \sum x_t y_t$$

$$\hat{\beta} = \frac{\sum x_t y_t - T\bar{x}\bar{y}}{\sum x_t^2 - T\bar{x}^2} = \frac{\sum (x_t - \bar{x})(y_t - \bar{y})}{\sum (x_t - \bar{x})^2} = \frac{S_{xy}}{S_x^2}$$

最小二乗 推定

$$\hat{\alpha} = \overline{y} - \hat{\beta}\overline{x} \qquad (4)$$

$$\hat{\beta} = \frac{S_{xy}}{S_x^2} = \frac{\text{cov}(x_t, y_t)}{\text{var}(x_t)} \qquad (5)$$

$$t = t = 0 \quad S_x^2 = \sum (x_t - \overline{x})^2, S_{xy} = \sum (x_t - \overline{x})(y_t - \hat{y})$$

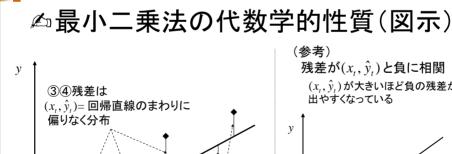


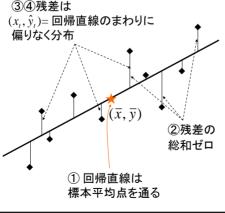
△最小二乗法の代数学的性質

最小二乗法により求めた $\{\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\epsilon}\}$ は、以下の性質を持つ

- ① 推定された回帰直線は、標本平均点 (\bar{x},\bar{y}) を通る $\overline{y} = \hat{\alpha} + \hat{\beta} \, \overline{x}$
- ② 残差の平均はゼロ $\overline{\hat{\varepsilon}} = 0 \iff \sum \hat{\varepsilon}_{t} = 0$
- ③ 残差は説明変数 x, と無相関 $cov(x_t, \hat{\varepsilon}_t) = 0 \iff \sum (x_t - \bar{x})\hat{\varepsilon}_t = 0$
- ④ 残差は、 y_t の推定値 $\hat{y}_t = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x_t$ と無相関 $cov(\hat{y}_t, \hat{\varepsilon}_t) = 0 \iff \sum (\hat{y}_t - \bar{y})\hat{\varepsilon}_t = 0$

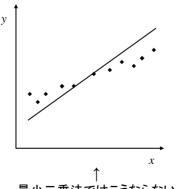
注) 定数項 α を含まない推定では①②は成立しない





(参考)

残差が (x_t, \hat{y}_t) と負に相関 (x_i, \hat{y}_i) が大きいほど負の残差が 出やすくなっている



最小二乗法ではこうならない



△最小二乗法の代数学的性質(証明)

- ①の証明...(4)より明らか
- ②の証明...(2)'より、残差 $\hat{\varepsilon}_{\ell} = y_{\ell} (\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_{\ell})$ の総和は、 $\sum_{k} \hat{\varepsilon}_{k} = \sum_{k} (y_{k} - \hat{\alpha} - \hat{\beta} x_{k}) = 0 \tag{6}$
- (3)4)の証明

(3) より、
$$\sum x_t \hat{\varepsilon}_t = \sum x_t (y_t - \hat{\alpha} - \hat{\beta}x_t) = 0$$
(7) したがって、(6)(7)を用いれば、

$$\sum (x_t - \bar{x})\hat{\varepsilon}_t = \sum x_t \hat{\varepsilon}_t - \bar{x} \sum \hat{\varepsilon}_t = 0$$

$$\sum (\hat{y}_t - \bar{y})\hat{\varepsilon}_t = \sum [(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_t) - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}\bar{x})]\hat{\varepsilon}_t$$

$$= \hat{\beta} \sum (x_t - \bar{x})\hat{\varepsilon}_t = 0$$



▲平方和分解

 y_t の平均回りの変動(平方和 $S_y^2=\sum (y_t-\bar{y})^2)$ は、説明変数 x_t の変動 $S_x^2=\sum (x_t-\bar{x})^2$ によって説明される部分と、説明できない残差の平 方和とに分解される

$$\sum (y_t - \bar{y})^2 = \hat{\beta}^2 \sum (x_t - \bar{x})^2 + \sum \hat{\varepsilon}_t^2$$

$$= \sum (\hat{y}_t - \bar{y})^2 + \sum \hat{\varepsilon}_t^2$$

$$= \sum SS = RSS$$
総平方和 説明された平方和 残差平方和

(証明)

$$= \sum_{t} \left[\hat{\beta}(x_{t} - \overline{x}) + \hat{\varepsilon}_{t} \right]^{2}$$

$$= \hat{\beta}^{2} \sum_{t} (x_{t} - \overline{x})^{2} + 2\hat{\beta} \sum_{t} (x_{t} - \overline{x})\hat{\varepsilon}_{t} + \sum_{t} \hat{\varepsilon}_{t}^{2}$$

(6)(7)より右辺第2項はゼロだから、(8)式が導かれる

 $\sum_{i} (y_i - \overline{y})^2 = \sum_{i} [(\hat{\alpha} + \hat{\beta}x_i + \hat{\varepsilon}_i) - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}\overline{x})]^2$



△決定係数

- ▶ 決定係数 R² = y_t の総変動(TSS)のうち説明された部分(ESS)の比率
- R² が1に近いほど、推定式の説明力が高い

$$R^{2} = \frac{ESS}{TSS} \left(= 1 - \frac{RSS}{TSS} \right) = \frac{\hat{\beta}^{2} S_{x}^{2}}{S_{y}^{2}} = \frac{S_{xy}^{2}}{S_{x}^{2} S_{y}^{2}}$$
(9)

■ *x* と *y* の相関係数 *r_{xy}*

$$r_{xy} = \frac{\sum (x_t - \bar{x})(y_t - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_t - \bar{x})^2 \sum (y_t - \bar{y})^2}} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}$$

→ 決定係数と相関係数の関係は

$$R^2 = r_{xy}^2$$

(決定係数=相関係数の二乗)

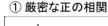
⇒ R²は、相関係数と同じく、変数間の直線的関係の強さを表す

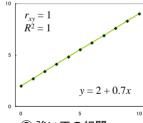
11

M

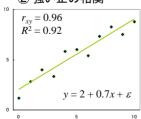
▲ 決定係数と相関係数(図示)

決定係数(=相関係数の二乗)は、<u>直線的関係</u>の強さを表す。非線形の関係を検出する力はない。

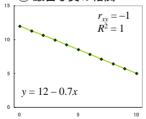




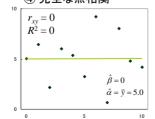
② 強い正の相関



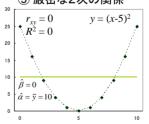
③ 厳密な負の相関



④ 完全な無相関



⑤ 厳密な2次の関係

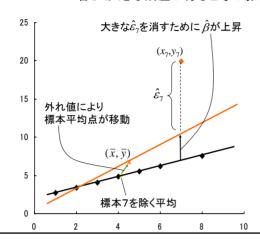


- ②ではyの変動の92%がxの 変動で説明されている (R²=0.92)
- R² = 0 は、必ずしも (x, y) の間に何の関係もないことを示すわけではない。⑤では厳密な2次関係があるが R² = 0 である。
- $R^2 = 0$ の時は、 $\hat{\beta} = 0$, $\hat{\alpha} = \overline{y}$ となる。

М

△外れ値の影響

- 最小二乗法・・・外れ値(異常値)の影響が大きい推定法
 - □ 最小二乗法=残差平方和 $\sum \hat{\varepsilon}_i^2$ を最小にするように $\{\hat{\alpha}, \hat{\beta}\}$ を求める \Rightarrow 著しく大きな残差があるとその影響を受けやすい



- 最小二乗法による回帰線は
 - ① 標本平均点 (\bar{x},\bar{y}) を通る
 - ② 残差の総和ゼロ という性質がある
- 著しく大きな残差があると、① ②の制約を満たすために、回 帰線はそうした外れ値に引き ずられてしまう

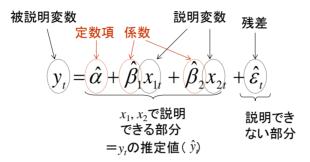
13

▲外れ値の影響(例) ① 問題ない推定 ② 非線型の関係 ■右の数値例は、すべ て同じ最小二乗推定 量を生む ⇒ 推定された値だけ $y_t = 3.0 + 0.5x_t + \hat{\varepsilon}_t$ $y_t = 3.0 + 0.5x_t + \hat{\varepsilon}_t$ を見ていては、誤った $R^2 = 0.667$ 結論を出す可能性 ■外れ値の影響や関数 ③ 外れ値の影響(1) ④ 外れ値の影響(2) 形の誤りを避けるた めに、①データをプ 12 ロットする、②残差の ふるまいを調べる、 ③特殊な出来事が生 じた期間等はサンプ $y_t = 3.0 + 0.5x_t + \hat{\varepsilon}_t$ $y_t = 3.0 + 0.5x_t + \hat{\varepsilon}_t$ ルから外す等が大切 $R^2 = 0.667$ $R^2 = 0.667$

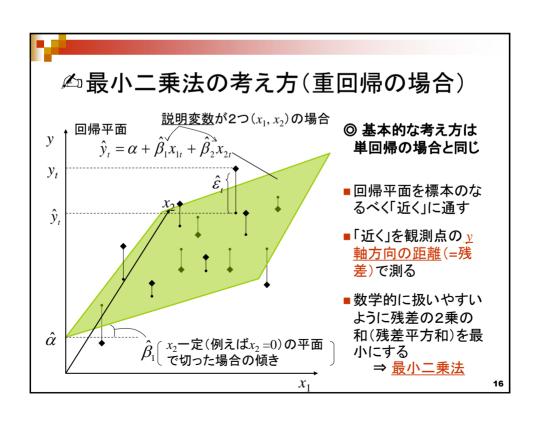
7

▲最小二乗法(重回帰)

■ 重回帰=説明変数が2つ以上ある回帰分析 (説明変数が2つの場合)



■ 最小二乗法: 説明できない部分(残差)の2乗の和(残差 平方和=RSS)が最小になるように係数($\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{\beta}$)を決定





▲最小二乗法(重回帰)

説明できない部分(=残差)の2乗の総和(残差平方和 RSS)
 を最小化するように係数(â,β̂,β̂)を求める

$$\min_{\hat{a},\hat{eta}_1,\hat{eta}_2}$$
 発差の2乗の総和

■ 最小化の一階条件 ⇒ 3本の方程式

$$\frac{\partial \sum \hat{\varepsilon}_{t}^{2}}{\partial \hat{\alpha}} = 0, \quad \frac{\partial \sum \hat{\varepsilon}_{t}^{2}}{\partial \hat{\beta}_{1}} = 0, \quad \frac{\partial \sum \hat{\varepsilon}_{t}^{2}}{\partial \hat{\beta}_{2}} = 0$$

■ 3本の方程式、3個の未知数($\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}_1$, $\hat{\beta}_2$) ⇒ 方程式を解いて($\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}_1$, $\hat{\beta}_2$)を求める

47



△最小二乗推定量の導出(重回帰)①

《説明変数が2つの場合》

■ 推定する回帰式
$$y_t = \hat{\alpha} + \hat{\beta}_1 x_{1t} + \hat{\beta}_2 x_{2t} + \hat{\varepsilon}_t$$

• 残差
$$\hat{\varepsilon}_t = y_t - (\hat{\alpha} + \hat{\beta}_1 x_{1t} + \hat{\beta}_2 x_{2t})$$

■ 残差平方和
$$RSS = \sum \hat{\varepsilon}_{t}^{2} = \sum (y_{t} - \hat{\alpha} - \hat{\beta}_{1}x_{1t} - \hat{\beta}_{2}x_{2t})^{2}$$

最小化
$$\underset{\alpha,\hat{\beta}_1,\hat{\beta}_2}{\text{Min}} RSS = \sum \hat{\varepsilon}_t^2 = \sum (y_t - \hat{\alpha} - \hat{\beta}_1 x_{1t} - \hat{\beta}_2 x_{2t})^2$$

最小化の一階条件: RSSを \hat{a} , $\hat{\beta}_1$, $\hat{\beta}_2$ で微分して=0と置く

⇒ 正規方程式
$$\begin{cases} \sum y_{t} = T\hat{\alpha} + \hat{\beta}_{1} \sum x_{1t} + \hat{\beta}_{2} \sum x_{2t} \\ \sum x_{1t} y_{t} = \hat{\alpha} \sum x_{1t} + \hat{\beta}_{1} \sum x_{1t}^{2} + \hat{\beta}_{2} \sum x_{1t} x_{2t} \\ \sum x_{2t} y_{t} = \hat{\alpha} \sum x_{2t} + \hat{\beta}_{1} \sum x_{1t} x_{2t} + \hat{\beta}_{2} \sum x_{2t}^{2} \end{cases}$$



△最小二乗推定量の導出(重回帰)②

■ 係数の最小二乗推定量

正規方程式を解いて

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}_1 - \hat{\beta}_2 \bar{x}_2$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_2^2 S_{1y} - S_{12} S_{2y}}{S_1^2 S_2^2 - S_{12}^2}$$

$$\hat{\beta}_2 = \frac{S_1^2 S_{2y} - S_{12} S_{1y}}{S_1^2 S_2^2 - S_{12}^2}$$

$$\begin{split} \mathcal{S}_{1}^{2} &= \sum \left(x_{1t} - \overline{x}_{1}\right)^{2} \quad S_{12} &= \sum \left(x_{1t} - \overline{x}_{1}\right)(x_{2t} - \overline{x}_{2}) \\ S_{2}^{2} &= \sum \left(x_{2t} - \overline{x}_{2}\right)^{2} \quad S_{1y} &= \sum \left(x_{1t} - \overline{x}_{1}\right)(y_{t} - \overline{y}) \\ S_{y}^{2} &= \sum \left(y_{t} - \overline{y}\right)^{2} \quad S_{2y} &= \sum \left(x_{2t} - \overline{x}_{2}\right)(y_{t} - \overline{y}) \end{split}$$

19



△重回帰係数の意味

- 重回帰分析の係数・・・他の説明変数の影響を除いた上で、当該説明変数が被説明変数に及ぼす影響を示す
- 他の説明変数を一定としたまま、その説明変数だけが 変化した場合の影響を示す=偏微分係数

$$y_{t} = \hat{\alpha} + (\hat{\beta}_{1})x_{1t} + (\hat{\beta}_{2})x_{2t} + \hat{\varepsilon}_{t}$$

 x_2 がyに与える影響を除いた 上で x_1 がyに与える影響 $=x_2$ が一定のまま x_1 だけ変化 した場合のyへの影響

 x_1 が一定のまま x_2 だけ変化した 場合のyへの影響



△最小二乗法の代数学的性質(重回帰)

最小二乗法による重回帰

$$y_t = \hat{\alpha} + \hat{\beta}_1 x_{1t} + \hat{\beta}_2 x_{2t} + \dots + \hat{\beta}_{k-1} x_{k-1t} + \hat{\varepsilon}_t$$

についても、単回帰と同様に以下の性質を持つ (証明は略)

- ① 推定された回帰式は、標本平均点 $(\bar{x}_1, \bar{x}_2,, \bar{x}_{k-1}, \bar{y})$ を通る $\bar{y} = \hat{\alpha} + \hat{\beta}_1 \bar{x}_1 + \hat{\beta}_2 \bar{x}_2 + \cdots + \hat{\beta}_{k-1} \bar{x}_{k-1}$
- ② 残差の平均はゼロ

$$\bar{\hat{\varepsilon}} = 0 \iff \sum \hat{\varepsilon}_t = 0$$

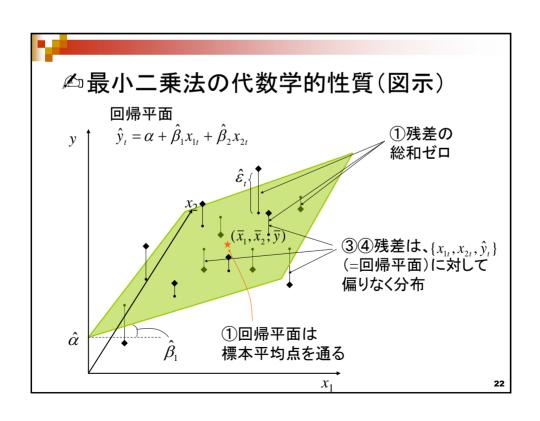
③ 残差は説明変数 x_{ii} (i=1,2,...,k-1) と無相関

$$cov(x_{it}, \hat{\varepsilon}_t) = 0 \iff \sum (x_{it} - \bar{x})\hat{\varepsilon}_t = 0 \qquad (i = 1, ..., k - 1)$$

④ 残差は、 y_t の推定値 $\hat{y}_t = \hat{\alpha} + \hat{\beta}_1 x_{1t} + \dots + \hat{\beta}_{k-1} x_{k-1t}$ と無相関

$$cov(\hat{y}_t, \hat{\varepsilon}_t) = 0 \iff \sum (\hat{y}_t - \overline{y})\hat{\varepsilon}_t = 0$$

注)定数項 a を含まない推定では①②は成立しない





△平方和分解と決定係数(重回帰)

■重回帰についても、単回帰と同様、 y_t の平均回りの変動(総平方和 $\sum (y_t - \bar{y})^2$)は、説明変数 x_t (i = 1, ..., k - 1)の変動によって説明される部分と、説明できない残差の平方和とに分解される

$$\sum (y_t - \bar{y})^2 = \sum (\hat{y}_t - \bar{y})^2 + \sum \hat{\varepsilon}_t^2$$
 ESS
総平方和
説明された平方和
残差平方

(Total Sum of Squares) (Explained Sum of Squares) (Residual Sum of Squares)

■したがって、*y_t* の総変動のうち説明された部分の割合を示す決 定係数も同様に定義できる

$$R^{2} = \frac{ESS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS} = 1 - \frac{\sum_{t} \hat{\varepsilon}_{t}^{2}}{\sum_{t} (y_{t} - \overline{y})^{2}}$$

23



△自由度修正済決定係数

- 決定係数 *R*² は、説明変数を追加するごとに必ず増大する(本来関係ないような変数を追加しても必ず増大する)
- このため、説明変数の数が異なるモデルの説明力を比較するには、「自由 度修正済み決定係数 R³が用いられる

$$\overline{R}^2 = 1 - \frac{RSS/(T-k)}{TSS/(T-1)}$$
 RSS の自由度 TSS の自由度

 \Rightarrow 説明変数の数 k (定数項を含む)を増やしたとき、自由度の低下を補うだけの残差平方和 RSS の減少がなければ、 \overline{R}^2 は低下する

※.このほか、説明変数の数が異なるモデルの選択基準として良く用いられるものとして、 赤池情報量基準(AIC)とシュワルツ基準(SC)がある

$$AIC = \ln \frac{RSS}{T} + \frac{2k}{T}$$
 $SC = \ln \frac{RSS}{T} + \frac{k}{T} \ln T$

これらは値が小さいほど良く、いずれも説明変数の増加にペナルティーを課している 24



▲「自由度」の意味

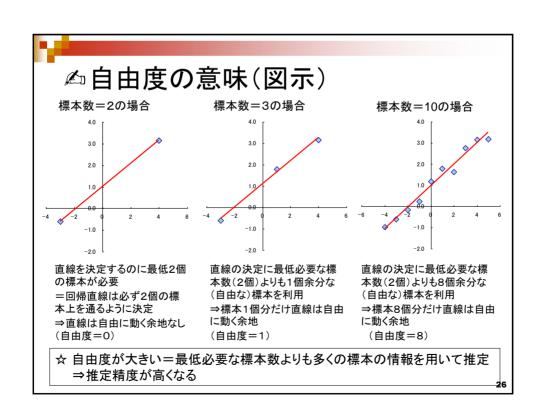
- ☆ 自由度=全体の標本数(T)から、標本に課されている 制約の数を除いたもの(自由な標本の数)
- 単回帰の自由度
 - □ 回帰直線を決定するためには、最低2個の標本が必要 \Rightarrow 自由に動ける標本はT-2個
- 重回帰の自由度

(説明変数が3つ(定数項含む)の場合)

□ 回帰平面を決定するためには、最低3個の標本が必要 \Rightarrow 自由に動ける標本はT-3個

(説明変数がk個(定数項含む)の場合)

- □ 回帰式を決定するためには、k本の正規方程式が必要
 - =最低k個の標本が必要
 - ⇒自由に動ける標本はT-k個





▲「自由度」の意味

- ☆ 自由度=統計量を求めるのに用いられる標本数から、標本に 課されている制約の数を除いたもの(自由な標本の数)
- ullet 残差平方和 $RSS = \sum \hat{\mathcal{E}}_t^2$ の自由度
 - ・ k 個の推定パラメターを持つ回帰の場合、残差 $\hat{\mathcal{E}}_{i}$ は、k 本の正規方程式を満たすという制約がある
 - ・ したがって、T 個の残差のうち、T-k 個が決まれば、残りの k 個はこれら k 本の制約を解くことにより決定される
 - ・ すなわち、自由に動ける残差の数はT-k 個である
- ◆ 総平方和 $TSS = \sum (y_t \bar{y})^2$ の自由度
 - ・ 総平方和 $TSS = \sum (y_t \bar{y})^2$ を求めるには、標本平均 \bar{y} が与えられる必要がある
 - ・ これは、総平方和を計算する際には、すでに y_t に $\sum y_t = T\bar{y}$ という制約 がかかっていることを意味する
 - ・ したがって、TSS の自由度は標本数からこの制約を除いた T-1である 27