統計学入門 第7回

早稲田大学政治経済学部
西郷 浩

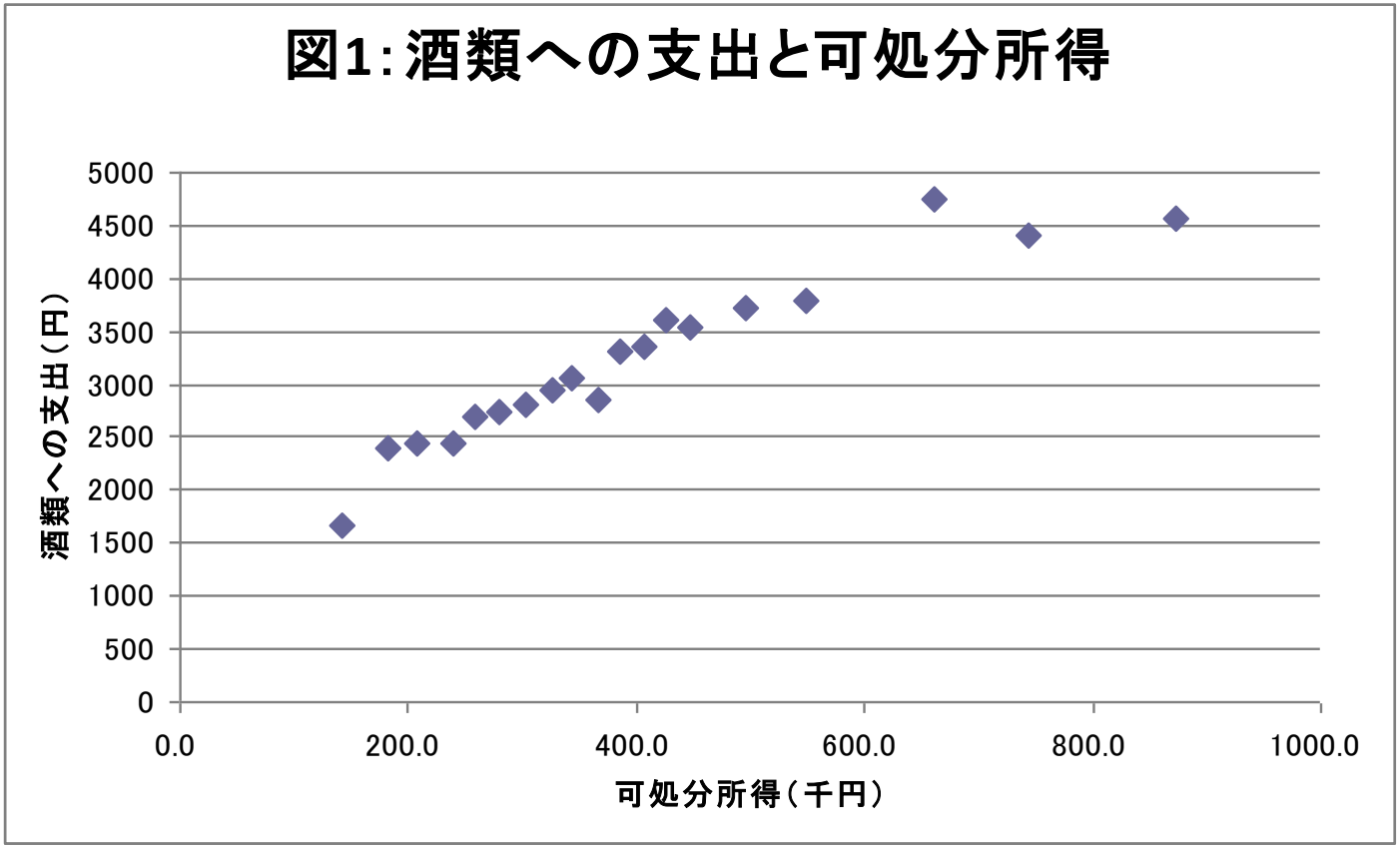
本日の目標

- 直線(および平面)の当てはめ
  - 回帰直線
  - 最小二乗法
  - 当てはまりの評価
    - 決定係数
    - 散布図・残差プロットの活用
  - PC実習

回帰直線(1)

- 2次元データ (x_i, y_i) $(i=1,2,\ldots,n)$
  - y を x の式であらわす。
    - 「x の値がわかれば、y の（おおよその）値がわかる」（変数間の関係の要約）
  - 例
    - x_i = (i 番目の個体の可処分所得)
    - y_i = (i 番目の個体の酒類への支出）

回帰直線(2)



資料：総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

回帰直線(3)

- どのような式が望ましいか。
  - 当てはまりの良いもの。
    - すべての観察点 (x_i, y_i) $(i = 1,2,\ldots,n)$からのズレ具合が小さいもの。
  - 要約（一種の単純化）であるから、数理的な側面が扱いやすい簡単なもの。

⇒ 直線 $y = a + bx$ が候補。

回帰直線(4)

- 目分量で直線を描く⇒客観的でない。
  - 同じデータに対していくつもの「妥当な」直線が描けることになってしまう。
- 客観的な基準の必要性
  - 「すべての観察点(x_i, y_i) $(i=1,2,\ldots,n)$と直線とのズレ」を数量的に定義し、ズレが最小になるように直線の位置を選ぶ（すなわち、a, b の値を定める）。

最小二乗法(1)

- 記号の整理

$y_i = (\text{観察された} y \text{の値})$

$\hat{y}_i = a + bx_i = (x \text{によって予想される} y \text{の値})$

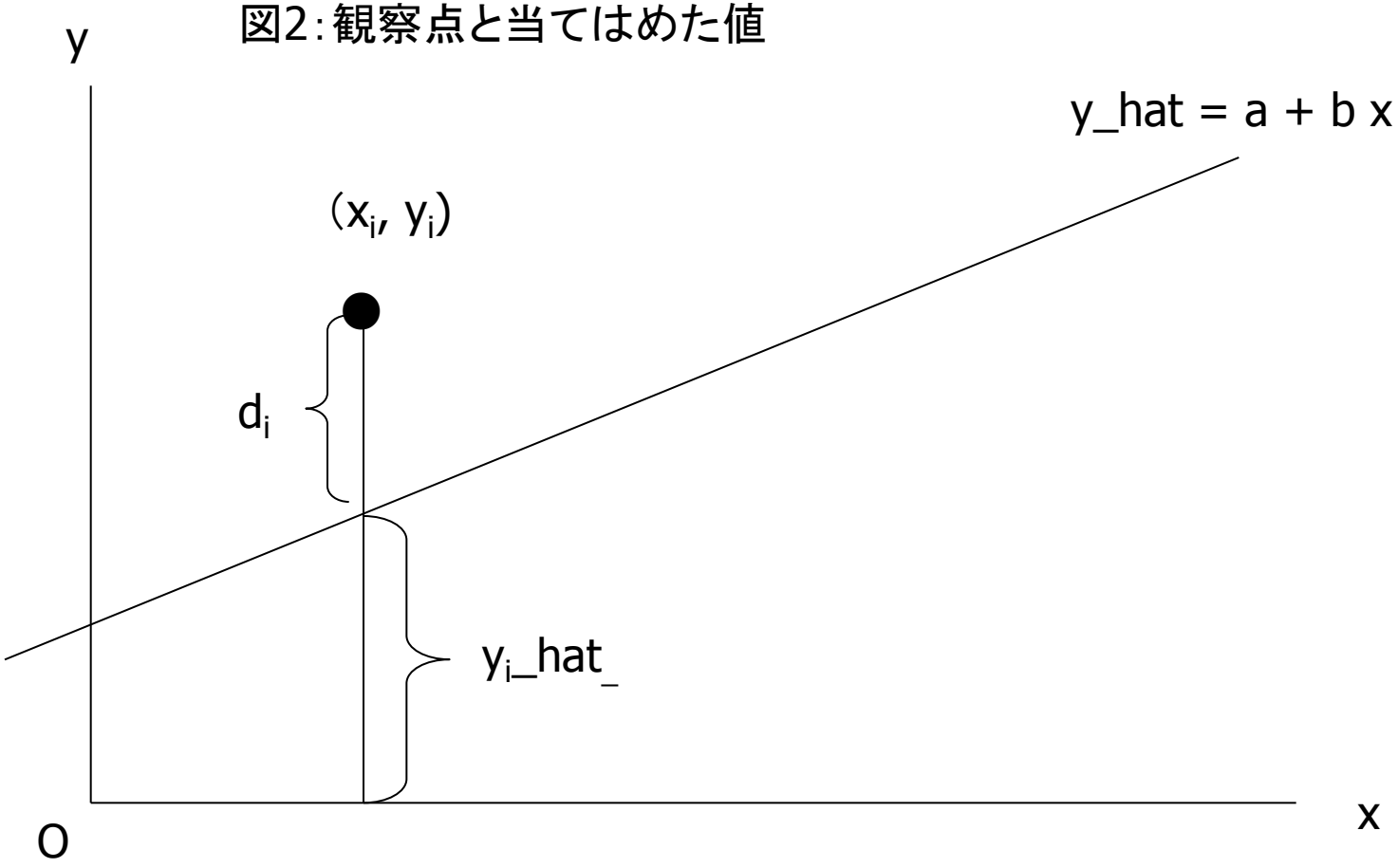
$d_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (a + bx_i)$

$= (\text{観察された} y \text{と、} x \text{で予想される} y \text{の値との差})$

$(d_i \text{を残差とよぶ})$

最小二乗法(2)

図2：観察点と当てはめた値



最小二乗法(3)

- 残差 d_i は、第 i 観察点における、観察値と予想値との乖離を示す。
  - x と y との関係を「うまく」要約したいのなら、$d_i = 0$ となることが望ましい。
  - 特定の（2つまでの）i について、$d_i = 0$ とするのは可能である。しかし、全部0にすることは無理である。
  - 「観察点全体と直線とのズレ」を残差によって数量的に定義し、それを最小にする。

最小二乗法(4)

最小二乗法： $\min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} d_i^2 \Leftrightarrow \min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2$

この最小化問題の解 ⇔ 下の方程式（正規方程式）の解

$$\begin{cases} n\,a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b = \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right) \\ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) b = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i\right) \end{cases}$$

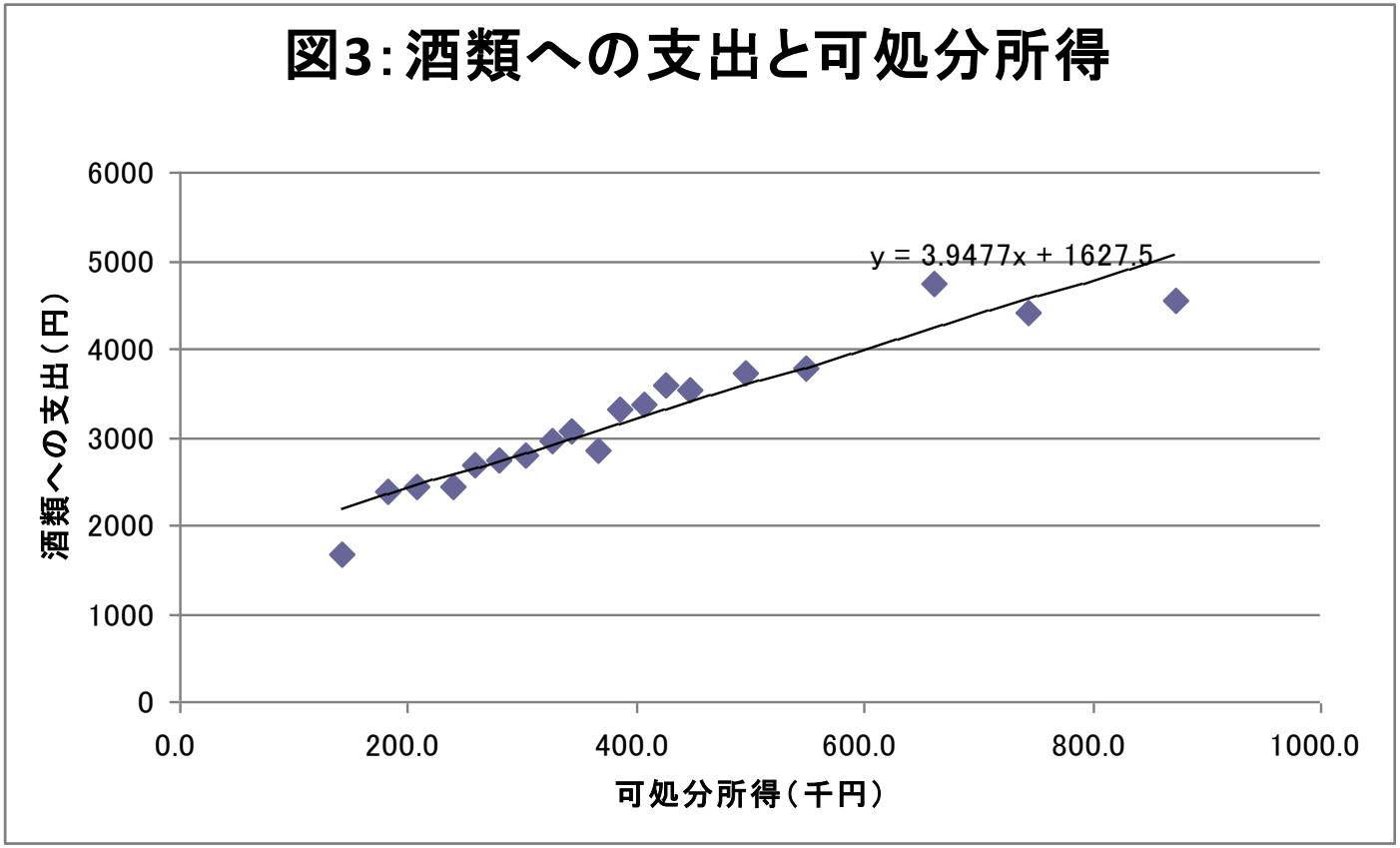
この連立方程式の解は下のようになる。

$$\begin{cases} b = S_{xy} / S_x^2 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \Big/ \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \\ a = \bar{y} - b\bar{x} \end{cases}$$

最小二乗法(5)

- 可処分所得(x)と酒類 (y)について、最小二乗法によって切片 a と傾き b とを求めると、
  - $b = 3.9$
  - $a = 1628$

最小二乗法(6)



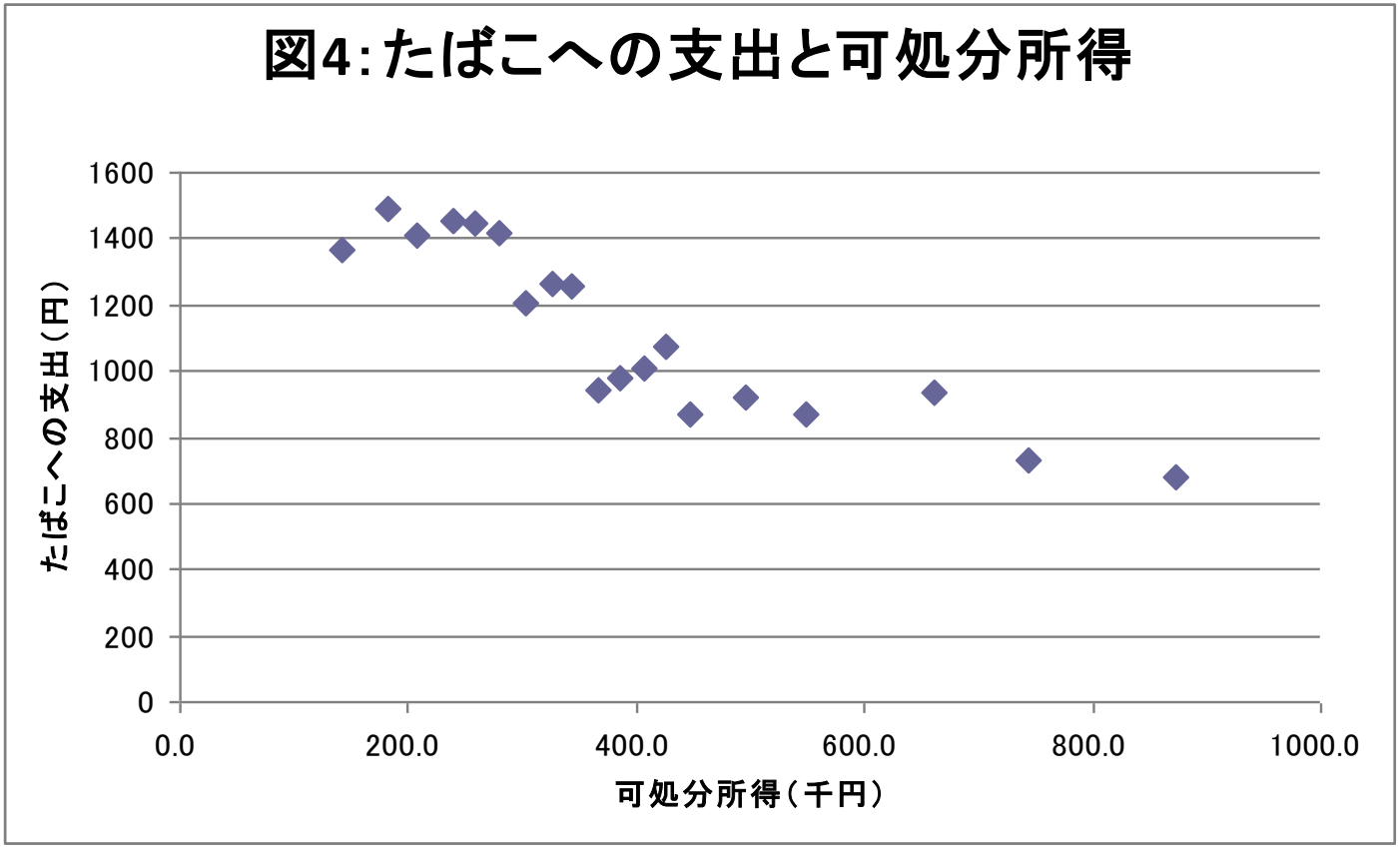
資料：総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

当てはまりの評価(1)

- 対象によって当てはまりに差がある。
  - A. x =(可処分所得), y =(酒類)
  - B. x =(可処分所得), y =(たばこ)

  見た目の当てはまりはどちらが良い？
- このような相違の評価方法は？
  - 決定係数
  - 散布図･残差プロットの活用

当てはまりの評価(2)



資料:総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

決定係数(1)

- 平方和の分解

$d_i = y_i - \hat{y}_i$であるから、

$$y_i = \hat{y}_i + d_i$$

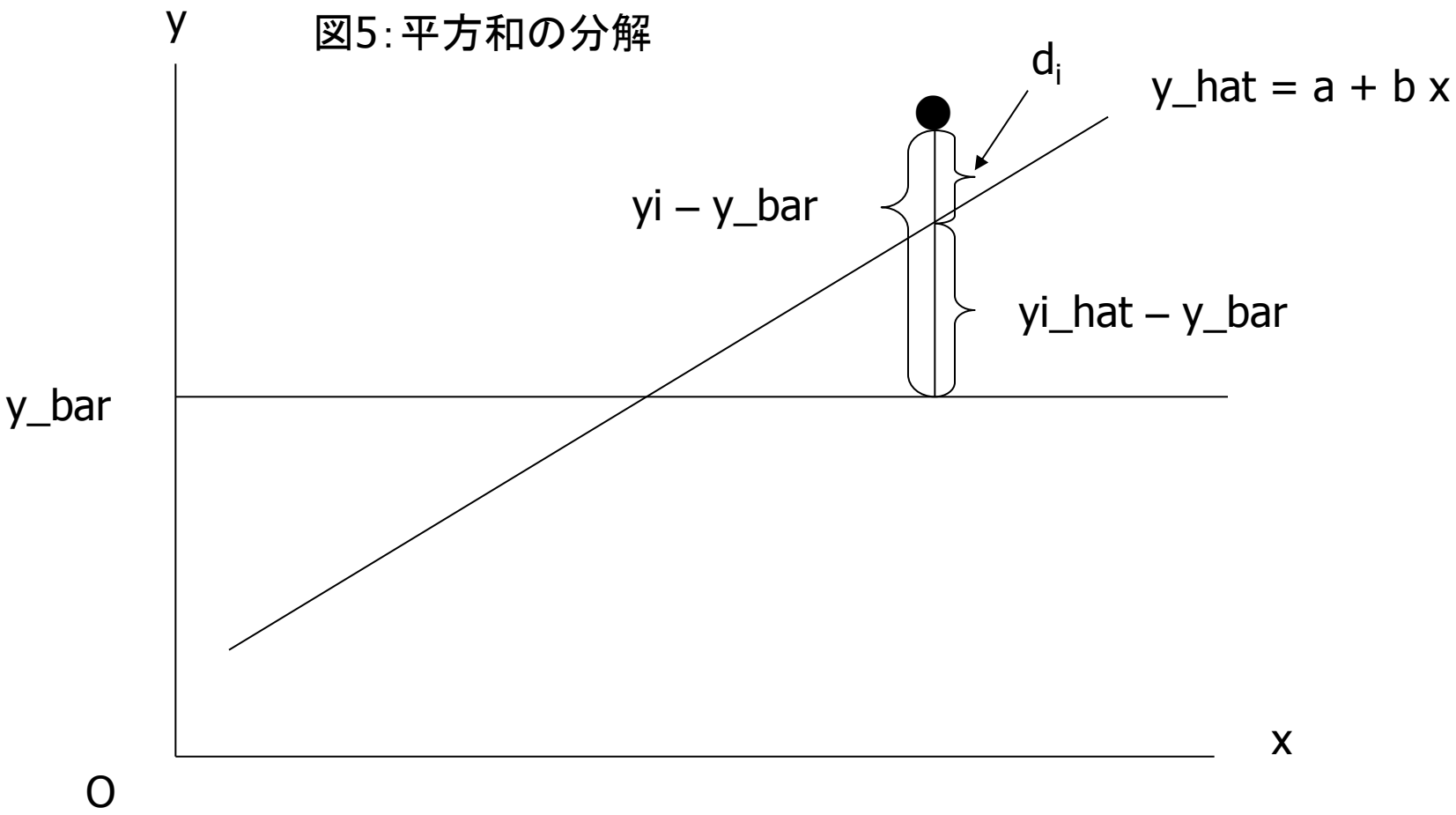
両辺から$\bar{y}$を引いて、

$$(y_i - \bar{y}) = (\hat{y}_i - \bar{y}) + d_i$$

残差d_iの性質を利用すると、

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

決定係数(2)



決定係数(3)

$$SS_0 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 = (\text{観察される}y\text{の変動})$$

$$SS_R = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = (\text{回帰式で説明できる}y\text{の変動})$$

$$SS_E = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = (\text{回帰式で説明できない}y\text{の変動})$$

とすれば、

$$SS_0 = SS_R + SS_E$$

決定係数(4)

平方和（二乗和）なので、

$$SS_0 \geq 0,\ SS_R \geq 0,\ SS_E \geq 0$$

したがって、

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_0} = \frac{\left(\text{回帰式で説明できる}y\text{の変動}\right)}{\left(\text{観察される}y\text{の変動}\right)}$$

$$= 1 - \frac{SS_E}{SS_0}$$

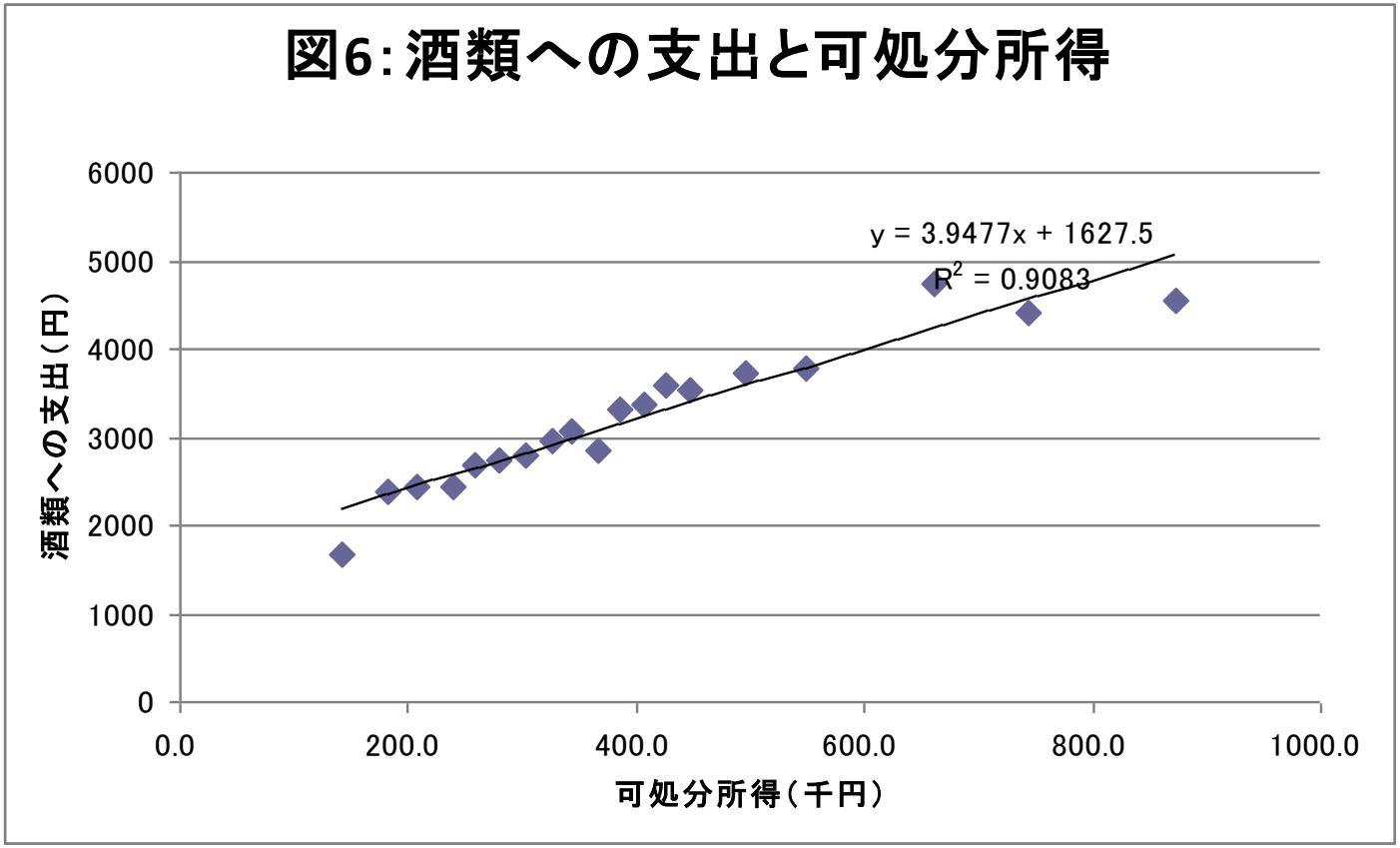
とすれば、$0 \leq R^2 \leq 1$であり、

これが1に近いほど当てはまりがいいことをあらわす。

決定係数(5)

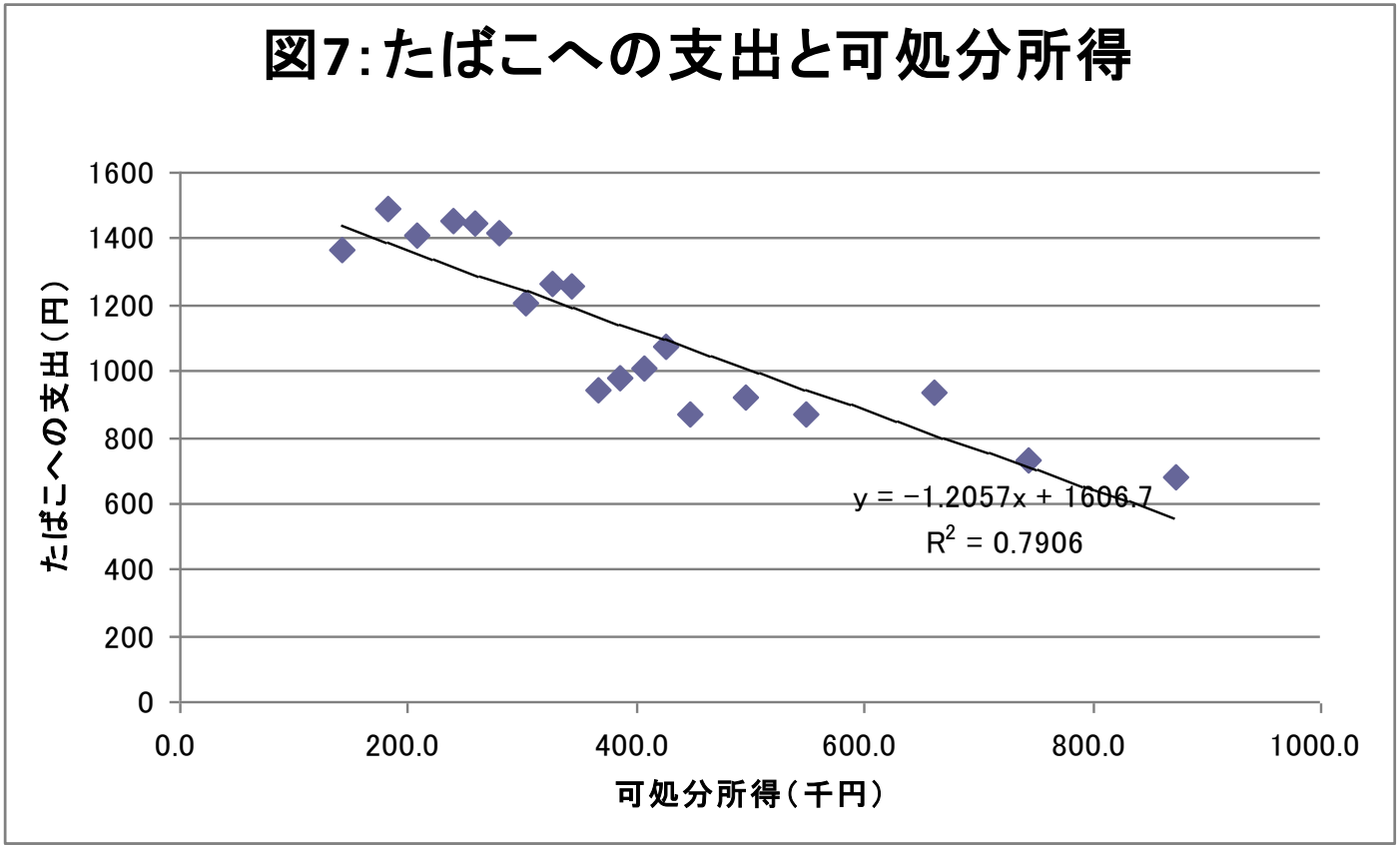
- 決定係数
  - A: 可処分所得と酒類　　$R^2 = 0.91$
  - B: 可処分所得とたばこ　$R^2 = 0.79$
- 決定係数と相関係数との関係
  - $R^2 = r_{xy}^2$
    - 教科書はこの関係式を使って決定係数を定義している。
  - 直線関係の強さの尺度のひとつにすぎないことに注意する。

決定係数(6)



資料:総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

決定係数(7)



資料:総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

散布図・残差プロットの活用(1)

- 散布図の活用
  - 散布図に回帰直線を描き込む。
    - 観察点全体への回帰直線の当てはまり具合は適切か？
      - 直線による近似に無理がないか。
        - 無理があると判断できるようなら、変数変換などの対応策を講じる（次回）。

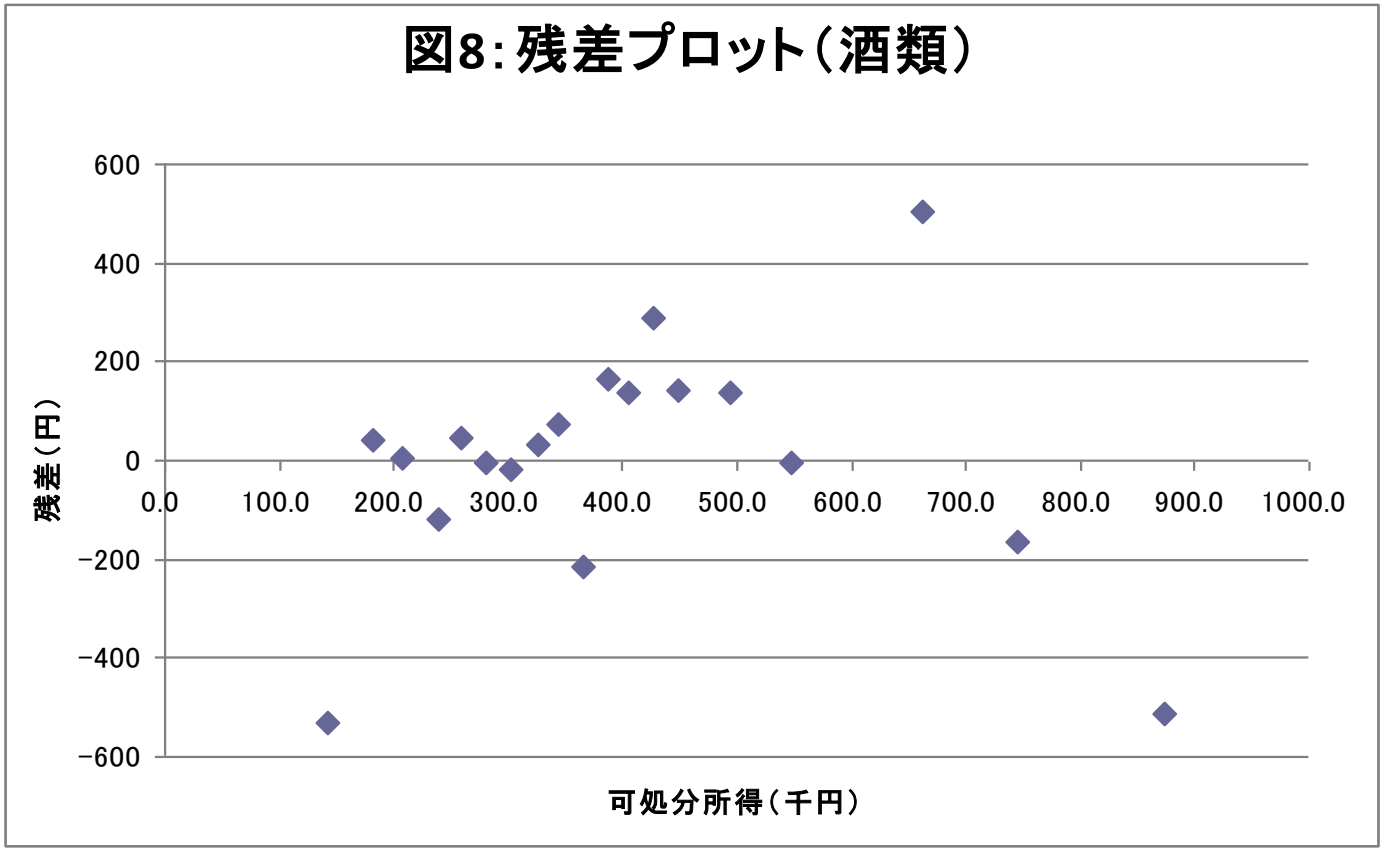
散布図・残差プロットの活用(2)

- 残差プロットの活用
  - 残差プロットの例：
    - (x_i, d_i) を座標平面にあらわしたもの。
    - 説明要因 x_i の値を所与としたときに、観察値 y_i と当てはめられた値 y_i_hat との乖離をグラフにしたもの。
    - 何らかの規則性あり。→ 問題あり。
      - 読み取りにはコツがいる。

散布図・残差プロットの活用(3)

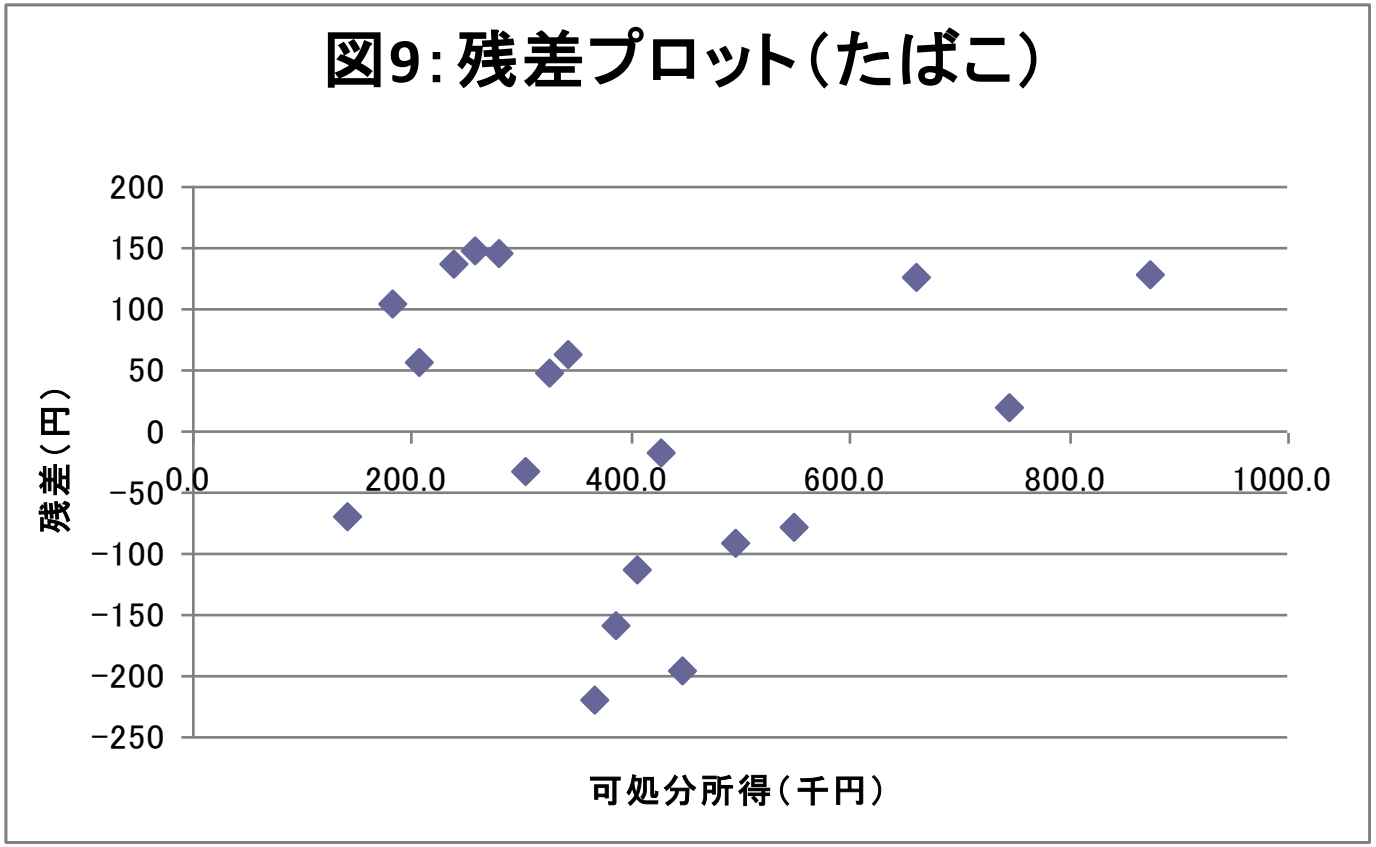
- 残差プロット（酒類）
  - 横軸：可処分所得
  - 縦軸：回帰式（酒類）からえた残差
- 残差プロット（たばこ）
  - 横軸：可処分所得
  - 縦軸：回帰式（たばこ）からえた残差

散布図・残差プロットの活用(4)



資料：総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

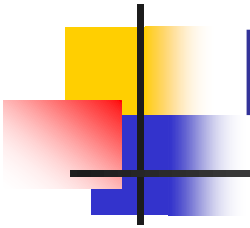
散布図・残差プロットの活用(5)



資料：総務省統計局「平成21年全国消費実態調査」表1

散布図・残差プロットの活用(6)

- 散布図・残差プロットによる吟味
  - 目視による判断なので主観的になりやすい。
  - しかし、決定係数の大小のみで当てはまりを判断するのは危険なので、必ず散布図・残差プロットも確認する必要がある。



PC実習

- 回帰直線の計算
  - 関数の利用
  - 分析ツールの利用
- 残差プロットの描画