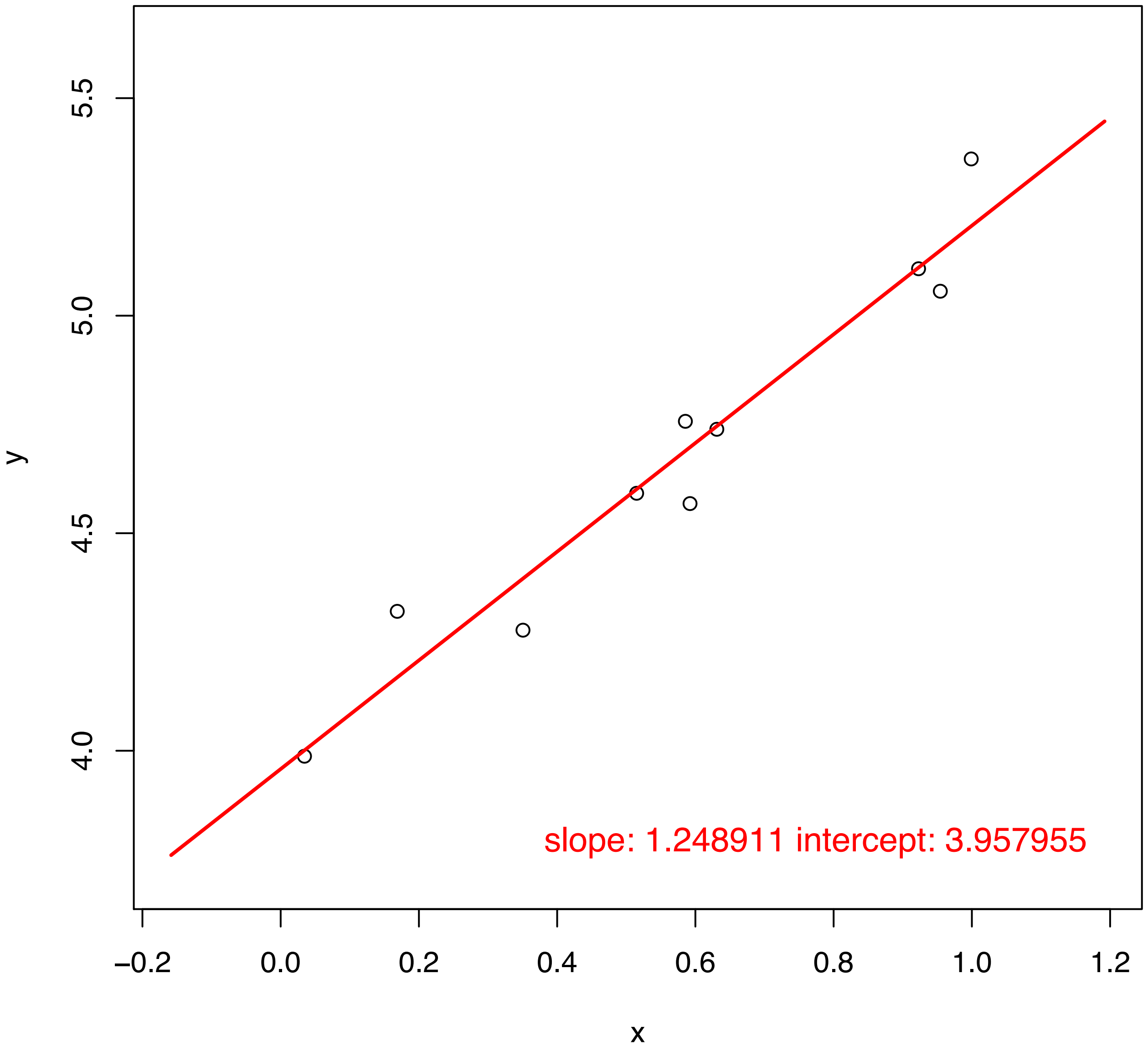
単回帰 = 単変量の線形回帰

「線形」(線の形=linear)
「回帰」とは
https://ja.wikipedia.org/wiki/平均への回帰
https://ja.wikipedia.org/wiki/回帰の誤謬

回帰は語源的には回帰効果（平均への回帰）に由来する。回帰効果は相関（直線的な関係）が低い場合に顕著に現れる。しかし回帰分析では必ずしも直線的関係を仮定しない。また「目的変数yを説明変数xに回帰する」といい、「回帰」という言葉が由来とは異なる意味に使われている。

回帰直線



予測に使う

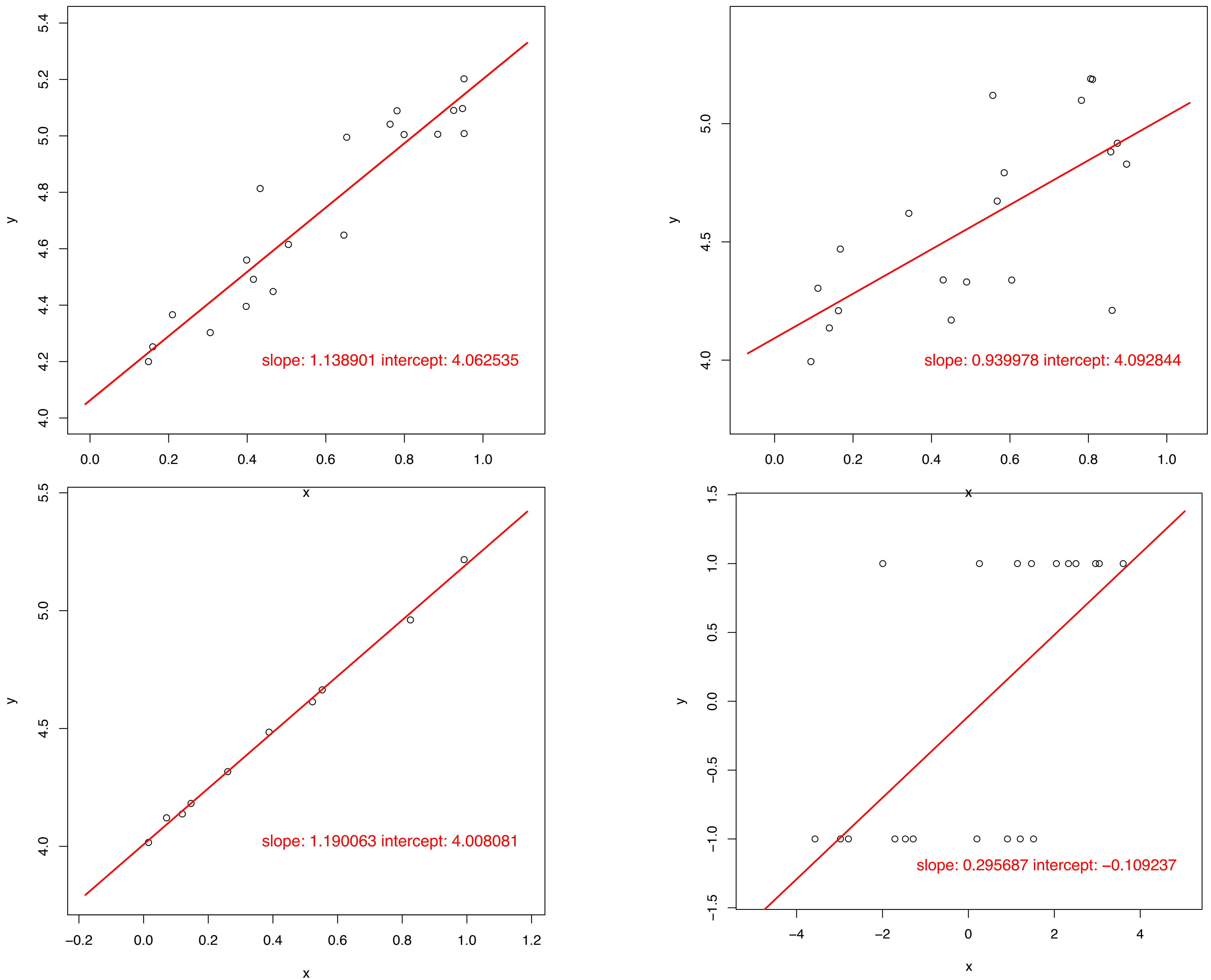
x=0.85のとき、yの予測値はいくらくらいだろうか?

ギモン

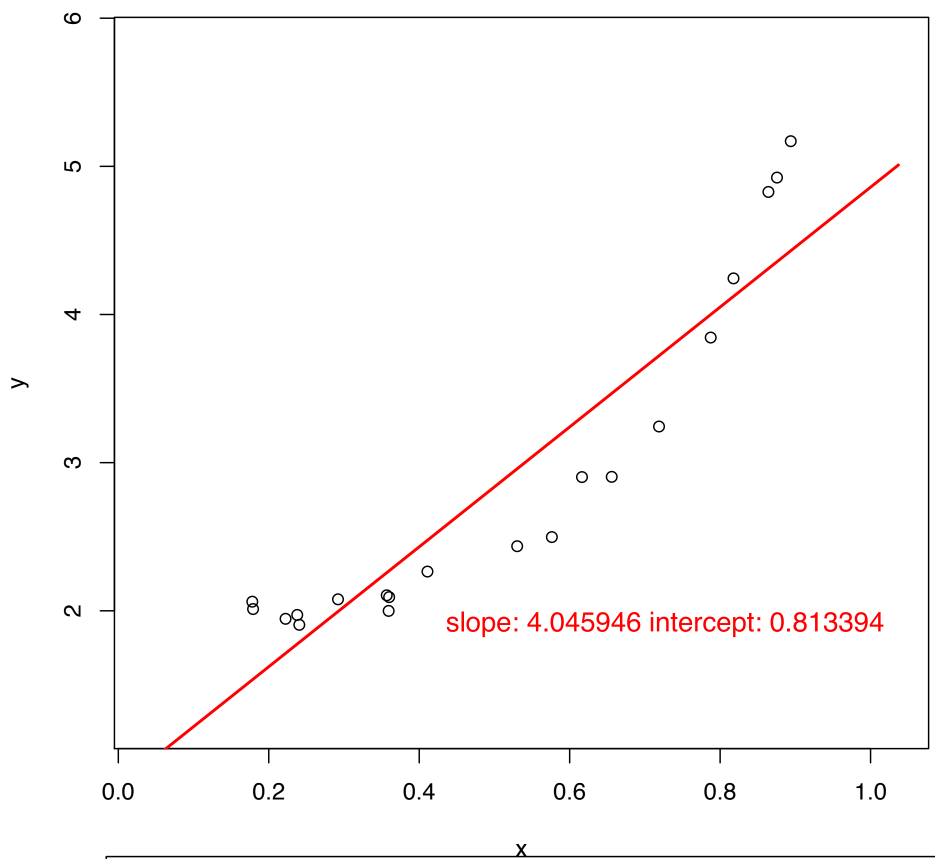
(1)データ点から傾きと切片をどうやって計算するの？

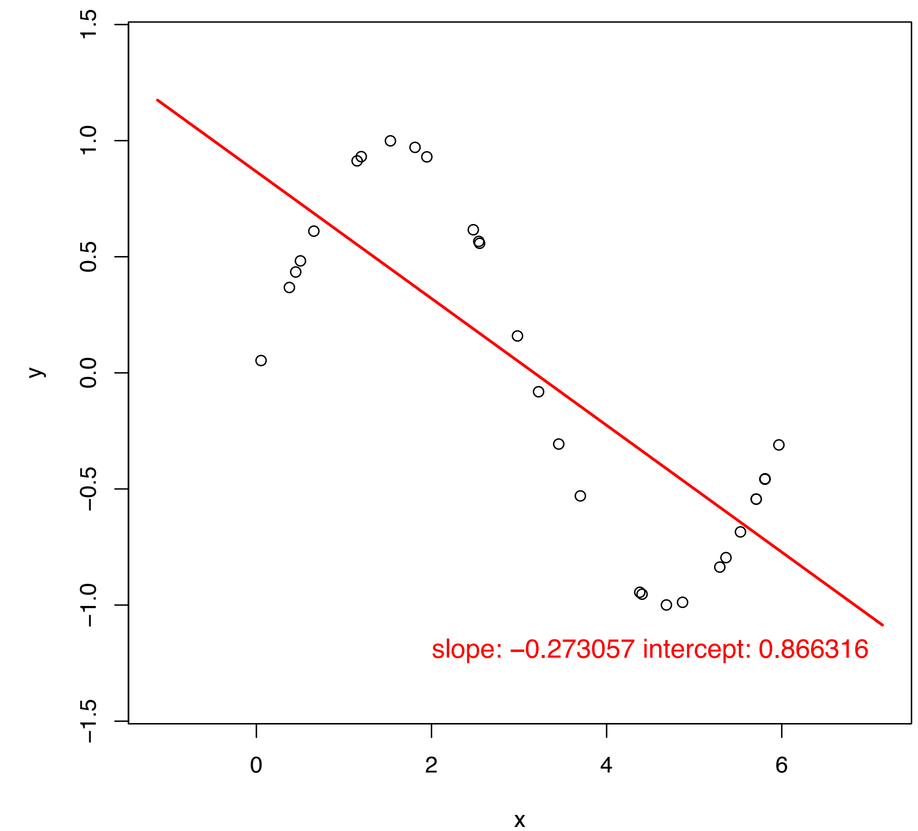
(2)良し悪しをどう考えれば良いのだろう？

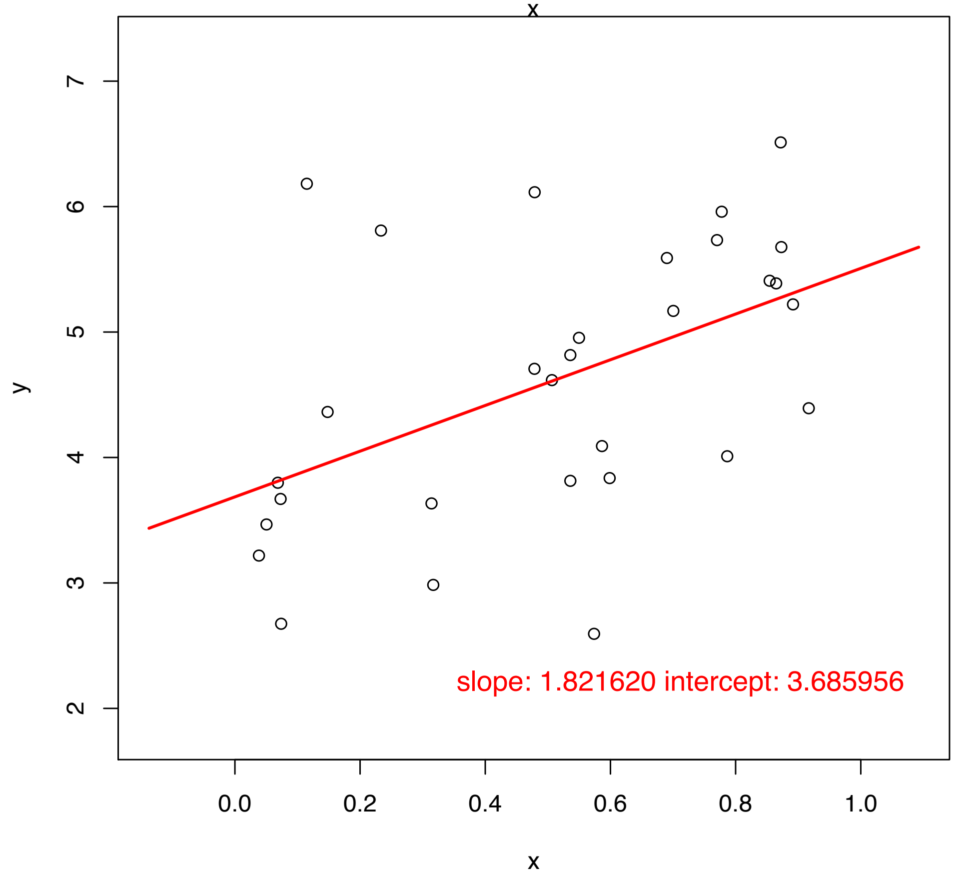
演習0：単回帰の結果を考えてみよう

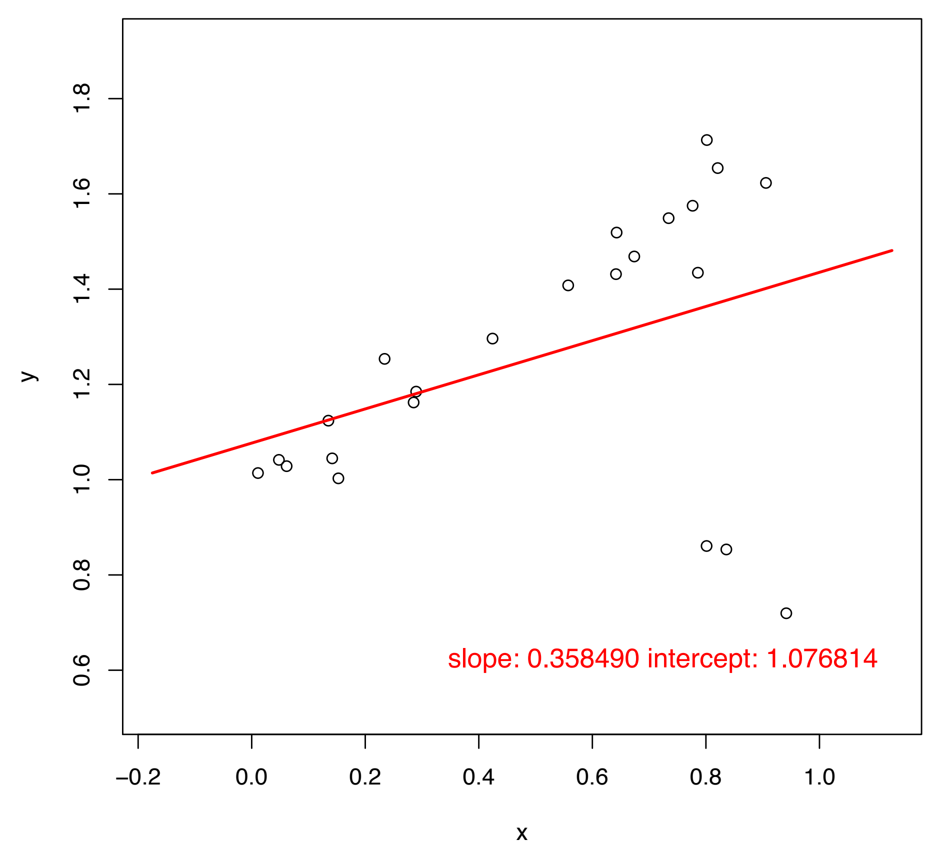


演習0：単回帰の結果を考えてみよう







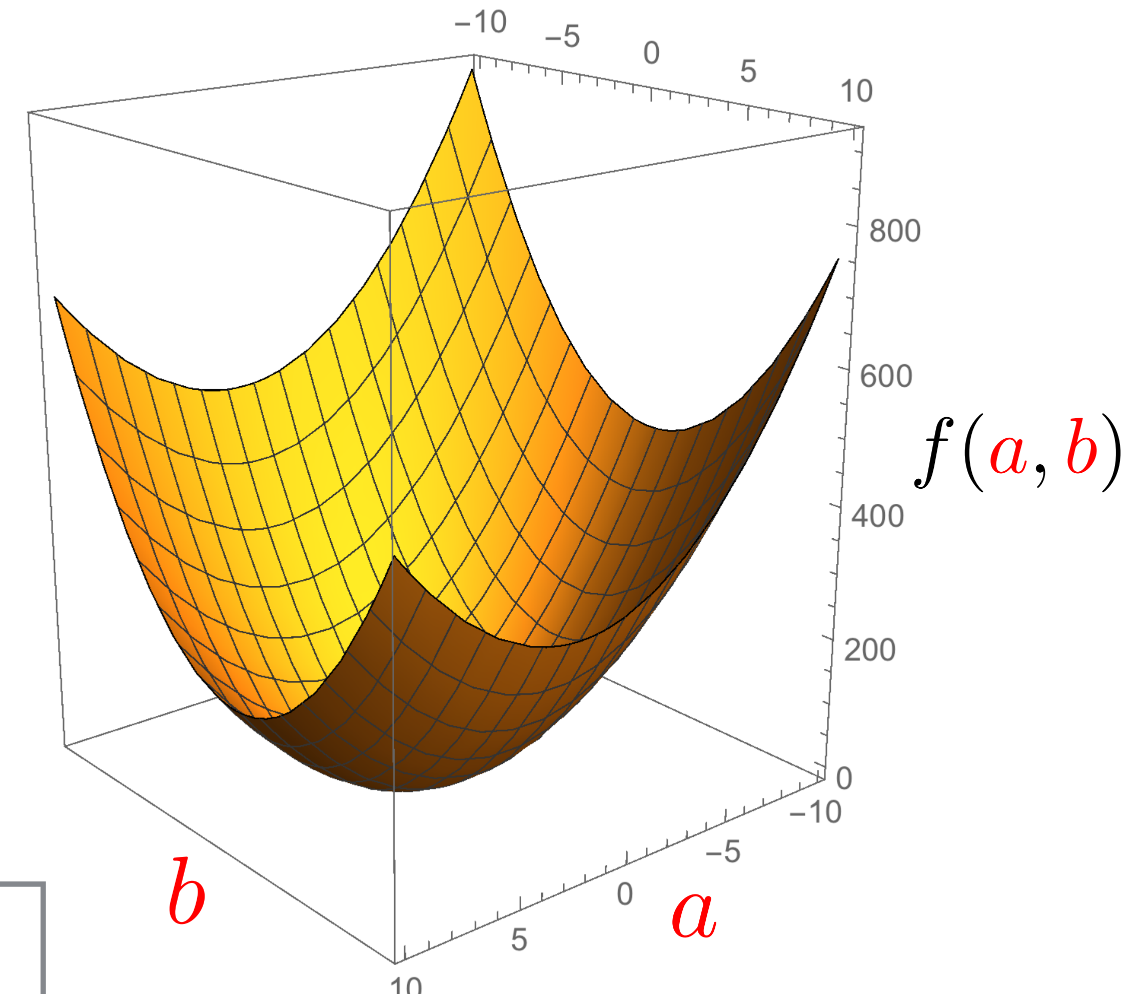


最小二乗推定の計算法(関数の極値問題に)

二乗誤差を最小にする直線当てはめ

$$\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2+\varepsilon_3^2+\varepsilon_4^2+\varepsilon_5^2+\varepsilon_6^2\to\min$$

$$\varepsilon=y_i-(ax_i+b)$$



$$f(a,b):=\sum_{i=1}^{6}\varepsilon^2=\sum_{i=1}^{6}(y_i-(ax_i+b))^2$$

展開すればとにかく a と b の2次関数に！

項の数が多いが、原理上は
がんばれば高校数学で解ける！
大学の微積分を使うなら
偏微分=0の連立方程式を解く。

有名問題	2変数2次関数の最大・最小	サクシード 数学 I p.50 重要例題78 改題 参考：チャートW 数学 I p.119 重要例題78
x, yが互いに関係なく変化するとき、 $P=x^2-4xy+5y^2-6y+10$ の最小値と、そのときのx, yの値を求めよ。		

《解答》

$$P=x^2-4y\cdot x+5y^2-6y+10=(x-2y)^2-(2y)^2+5y^2-6y+10$$
$$=(x-2y)^2+y^2-6y+10=(x-2y)^2+(y-3)^2-3^2+10$$
$$=(x-2y)^2+(y-3)^2+1$$

よって、Pの最小値は1

そのときのx, yの値は、$x-2y=y-3=0$ より、$x=6$, $y=3$

偏微分で解く場合

$$\frac{\partial P}{\partial y}=-6-4x+10y=0$$
$$\frac{\partial P}{\partial x}=2x-4y=0$$

《別法》

$$P=5y^2-2(2x+3)y+x^2+10=5\left\{y^2-\frac{2(2x+3)}{5}y\right\}+x^2+10$$
$$=5\left\{\left(y-\frac{2x+3}{5}\right)^2-\left(\frac{2x+3}{5}\right)^2\right\}+x^2+10=5\left(y-\frac{2x+3}{5}\right)^2+\frac{x^2-12x+41}{5}$$
$$=5\left(y-\frac{2x+3}{5}\right)^2+\frac{(x-6)^2}{5}+1$$

よって、Pの最小値は1

そのときのx, yの値は、$y-\dfrac{2x+3}{5}=x-6=0$ より、$x=6$, $y=3$

単回帰分析 (教科書第4章の要点)

予測したい

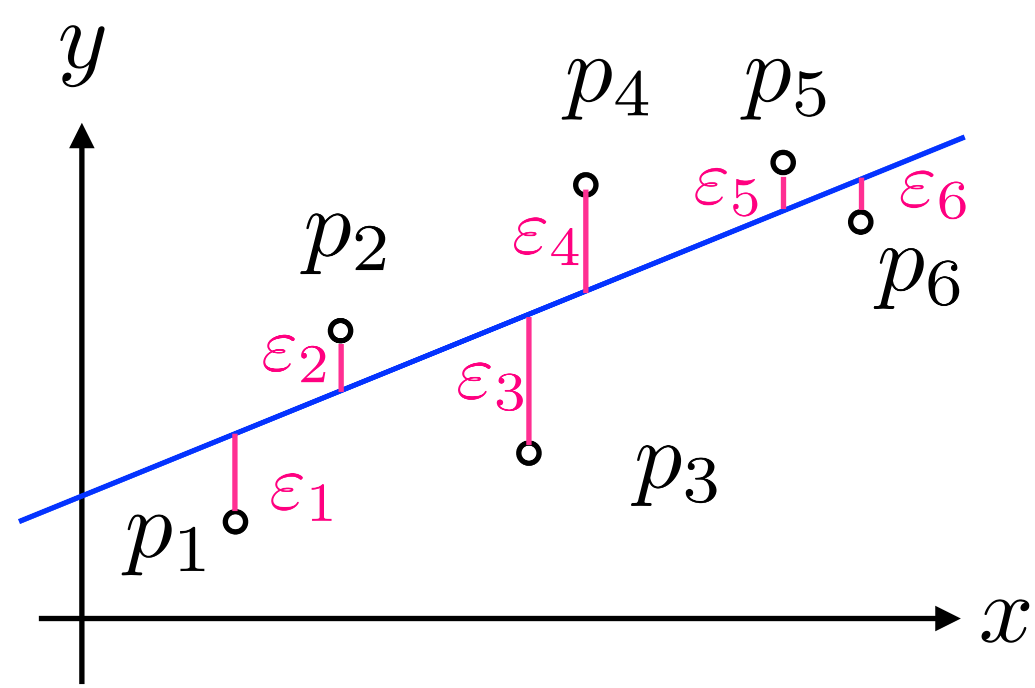
説明変数 目的変数

	x	y
p_1	x_1	y_1
p_2	x_2	y_2
p_3	x_3	y_3
p_4	x_4	y_4
p_5	x_5	y_5
p_6	x_6	y_6

二乗誤差を最小にする直線当てはめ

$$\varepsilon_i = y_i - (ax_i + b)$$

$$\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2 + \varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2 \to \min$$



$$y = ax + b$$

ここをいじる

データ列をベクトル表記する

予測したい(単回帰)

	説明変数	目的変数
	x	y
p_1	x_1	y_1
p_2	x_2	y_2
p_3	x_3	y_3
p_4	x_4	y_4
p_5	x_5	y_5
p_6	x_6	y_6

二乗誤差を最小にする直線当てはめ

$$\varepsilon_i = y_i - (ax_i + b)$$

$$\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2 + \varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2 \to \min$$

$$= \|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2 = \sum_{i=1}^{6} \varepsilon_i^2$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \end{bmatrix} - \left(a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right)$$

行列とベクトルで表してみる

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \end{bmatrix} - \left(a \overset{\boldsymbol{a}_1}{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix}} + b \overset{\boldsymbol{a}_2}{\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}} \right) = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \end{bmatrix} - \begin{array}{cc} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 \end{array} \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ x_4 & 1 \\ x_5 & 1 \\ x_6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

$$= \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\beta}$$

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ x_4 & 1 \\ x_5 & 1 \\ x_6 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

最小二乗回帰の行列形

$$\varepsilon_i = y_i - (ax_i + b)$$

$$\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2 + \varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2 \to \min$$

$$= \|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2 = \sum_{i=1}^{6} \varepsilon_i^2$$

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2 = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}\|^2 \to \min$$

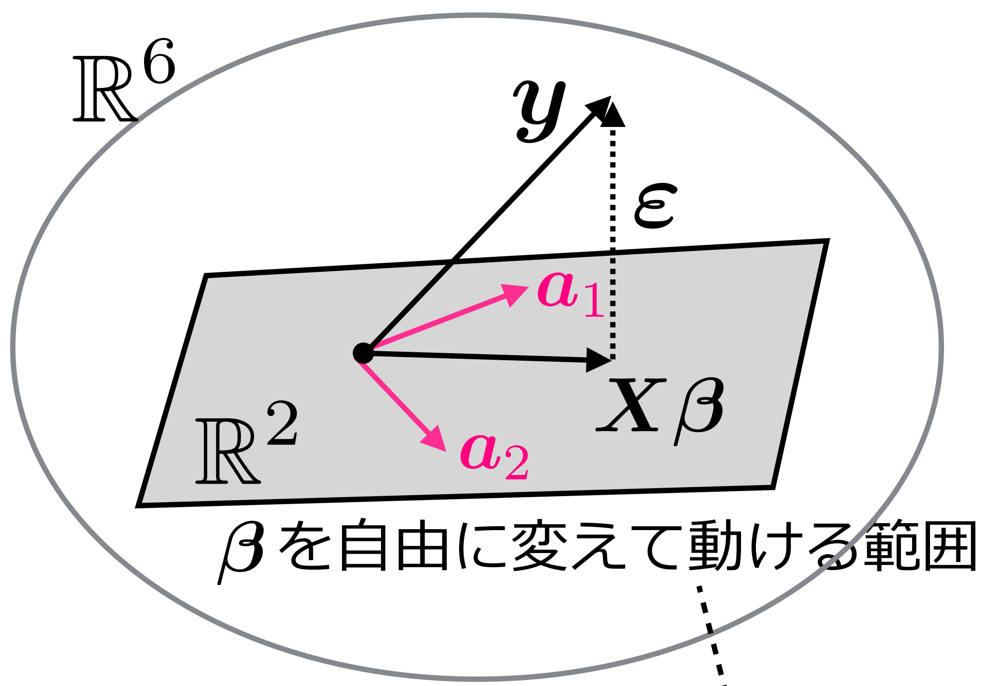
$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ を自由に動かして

$$\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}\|^2$$

が最小になるところを

見つければ良い。

$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ を自由に動かして動ける範囲

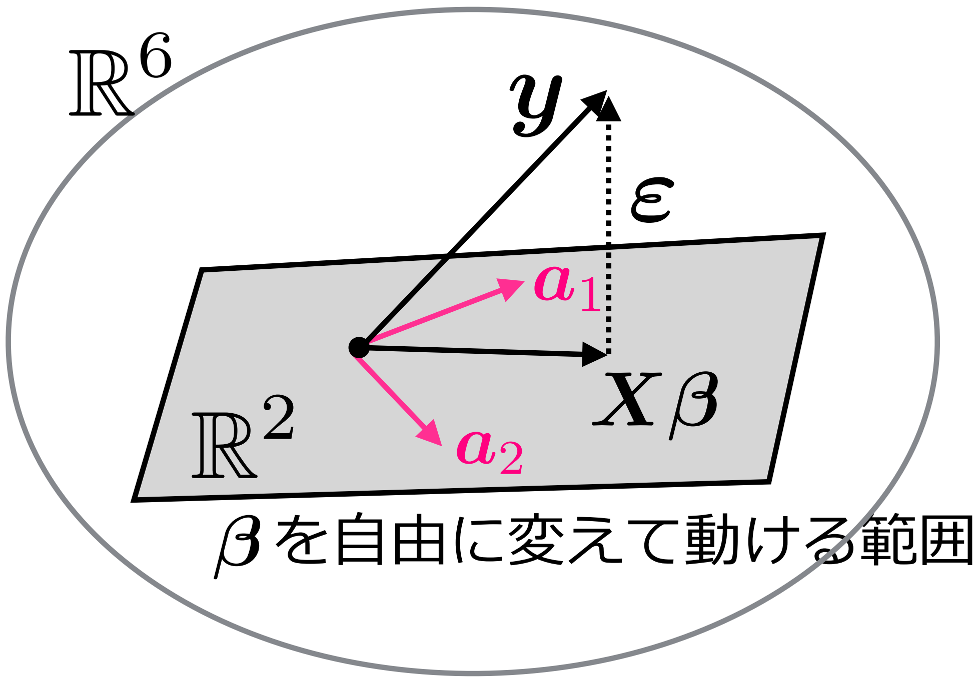


$$\boldsymbol{X\beta} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 \end{array} \\ \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ x_4 & 1 \\ x_5 & 1 \\ x_6 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a \begin{array}{c} \boldsymbol{a}_1 \\ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} \end{array} + b \begin{array}{c} \boldsymbol{a}_2 \\ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{array}$$

6 次元空間のなかの2次元の部分空間

最も $\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2$ が小さくなるのは $\boldsymbol{y}$ をこの空間に直交射影した点

直交射影の計算 (直交射影行列)



$$\boldsymbol{X\beta} = \begin{array}{cc} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 \\ \multicolumn{2}{c}{\begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ x_4 & 1 \\ x_5 & 1 \\ x_6 & 1 \end{bmatrix}} \end{array} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a \begin{array}{c} \boldsymbol{a}_1 \\ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} \end{array} + b \begin{array}{c} \boldsymbol{a}_2 \\ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{\varepsilon} \quad \Leftrightarrow \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1'\boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{a}_2'\boldsymbol{\varepsilon} \end{bmatrix} = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{0}$$

$$\Leftrightarrow \boldsymbol{X}'(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\beta}) = \boldsymbol{0}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}}$$

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

直交射影変換

射影行列

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'$$

単回帰を具体的に成分計算してみよう

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{bmatrix} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$$

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & n \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ \sum_{i=1}^n y_i \end{bmatrix}$$

❶ $$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \quad \Leftrightarrow n\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i$$

❷ $$\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_i^2 - 2\bar{x}x_i + \bar{x}^2)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\bar{x}\sum_{i=1}^{n} x_i + n\bar{x}^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & n\bar{x} \\ \underbrace{n\bar{x}}_{❶} & n \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{\underbrace{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n^2\bar{x}^2}_{❷}} \begin{bmatrix} n & -n\bar{x} \\ -n\bar{x} & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} & \frac{-\bar{x}}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \\ \frac{-\bar{x}}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} & \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \end{bmatrix}$$

❷

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} = \frac{n\bar{x}^2 + \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} = \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} + \frac{1}{n}$$

$$(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} & \frac{-\bar{x}}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} \\ \frac{-\bar{x}}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} & \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2} + \frac{1}{n} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}\hat{a}\\ \hat{b}\end{bmatrix} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - \bar{x}\sum_{i=1}^n y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2} \\ -\frac{\bar{x}\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2} + \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2}\right)\sum_{i=1}^n y_i \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x}) y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2} \\ -\bar{x}\frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2} + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i + \bar{x}\frac{\sum_{i=1}^n \bar{x} y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x}) y_i}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2} \\ \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{n} - \frac{(x_i-\bar{x})\bar{x}}{\sum_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2}\right) y_i \end{bmatrix}$$

$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$ とおくと

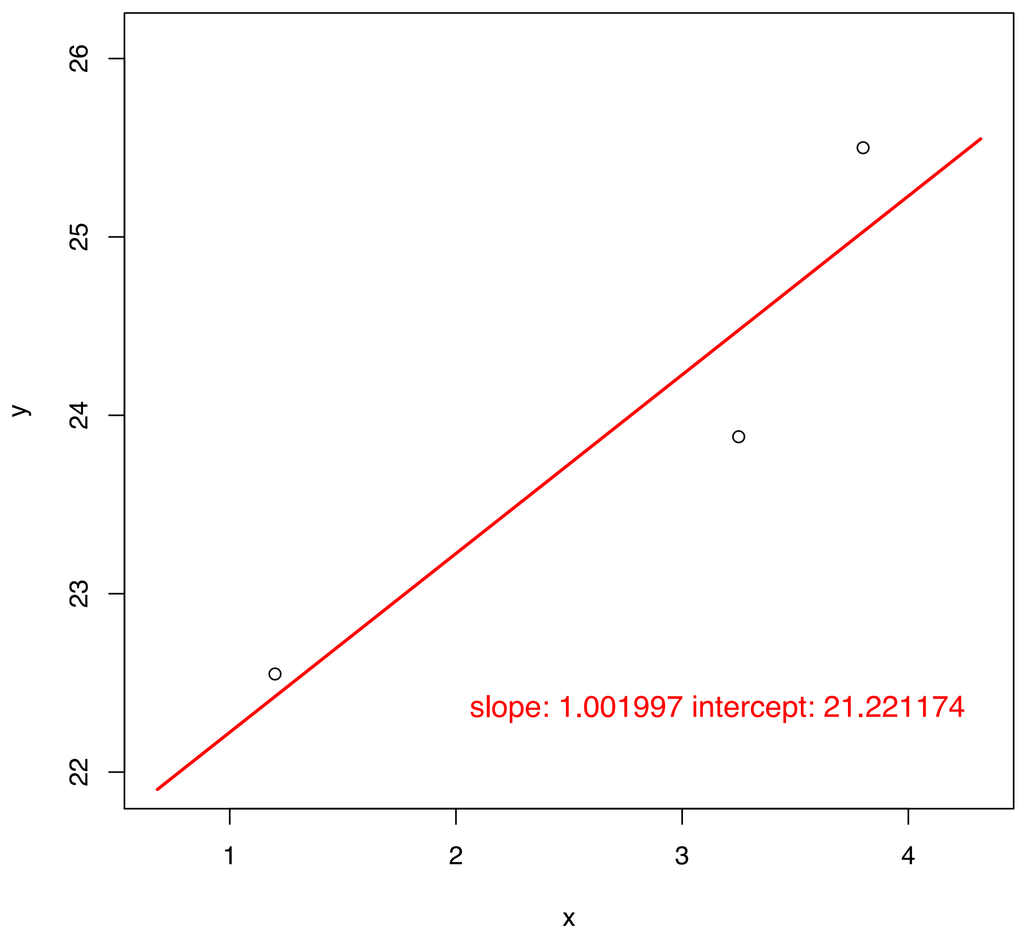
比較: 教科書(4.10)(4.15)式

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) y_i}{S_{xx}} \qquad \hat{b} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{n} - \frac{(x_i - \bar{x})\bar{x}}{S_{xx}}\right) y_i$$

演習1：単回帰を計算してみよう・その1

(1)直線の傾きと切片は?

(2) x=2.0のときのyの回帰による予測は?



x	y
3.8	25.5
1.2	22.55
3.25	23.88

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

演習2：単回帰を計算してみよう(教科書p.43～)

(1)直線の傾きと切片は?(例題1,p.49)

(2) x=5.0のときのyの回帰による予測は?(例題4,p.55)

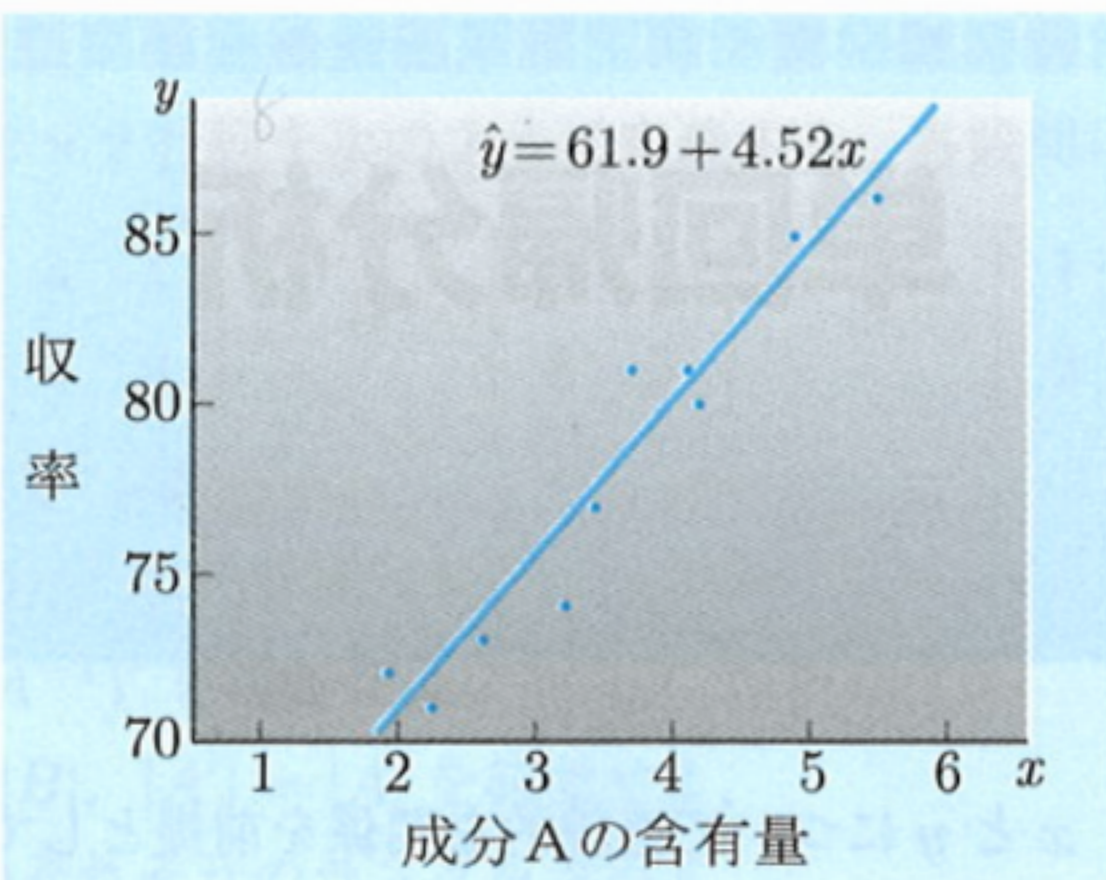


図 4.1　散布図

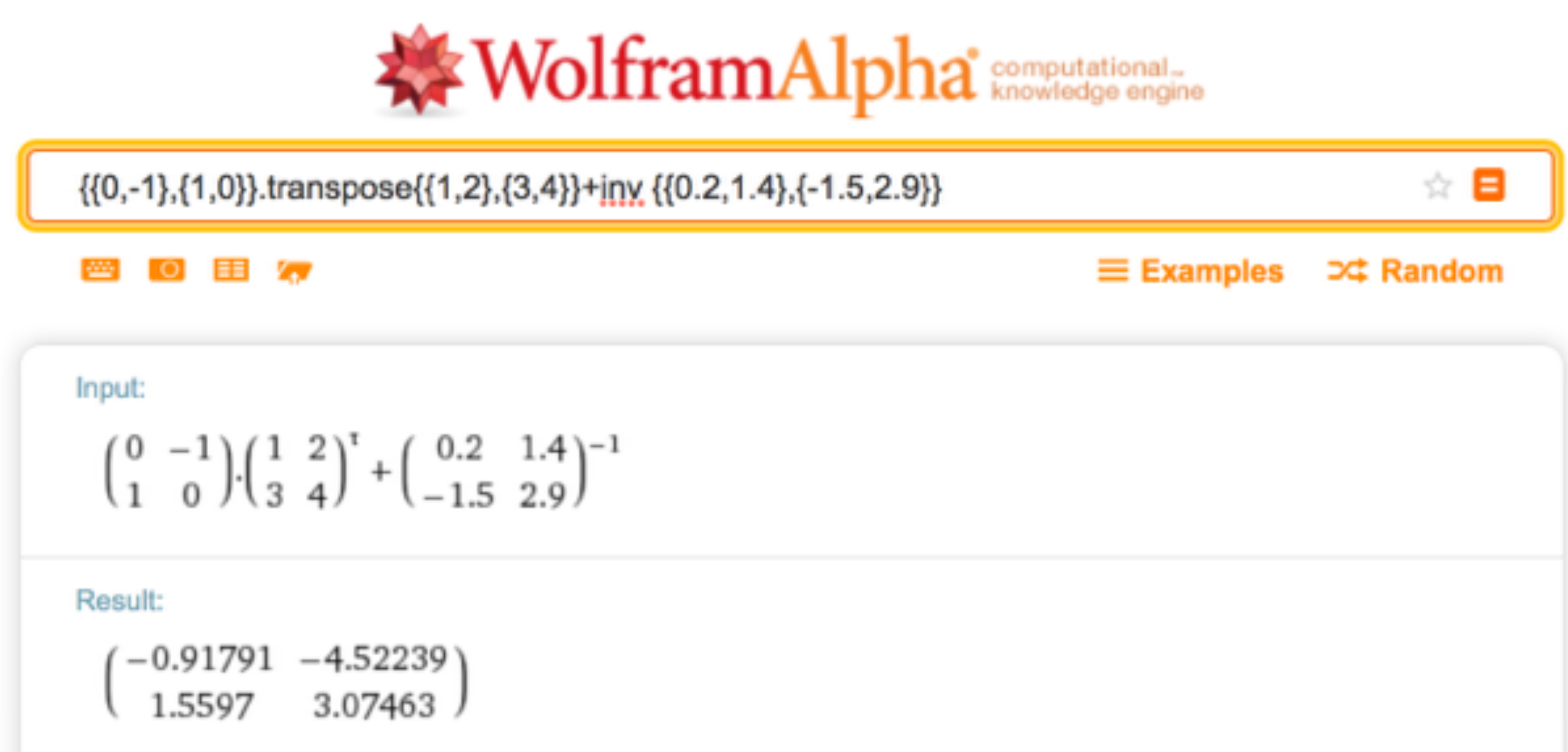
表 4.1　成分Aの含有量 x と収率 y のデータ

サンプル No.	含有量 x	収率 y
1	2.2	71
2	4.1	81
3	5.5	86
4	1.9	72
5	3.4	77
6	2.6	73
7	4.2	80
8	3.7	81
9	4.9	85
10	3.2	74

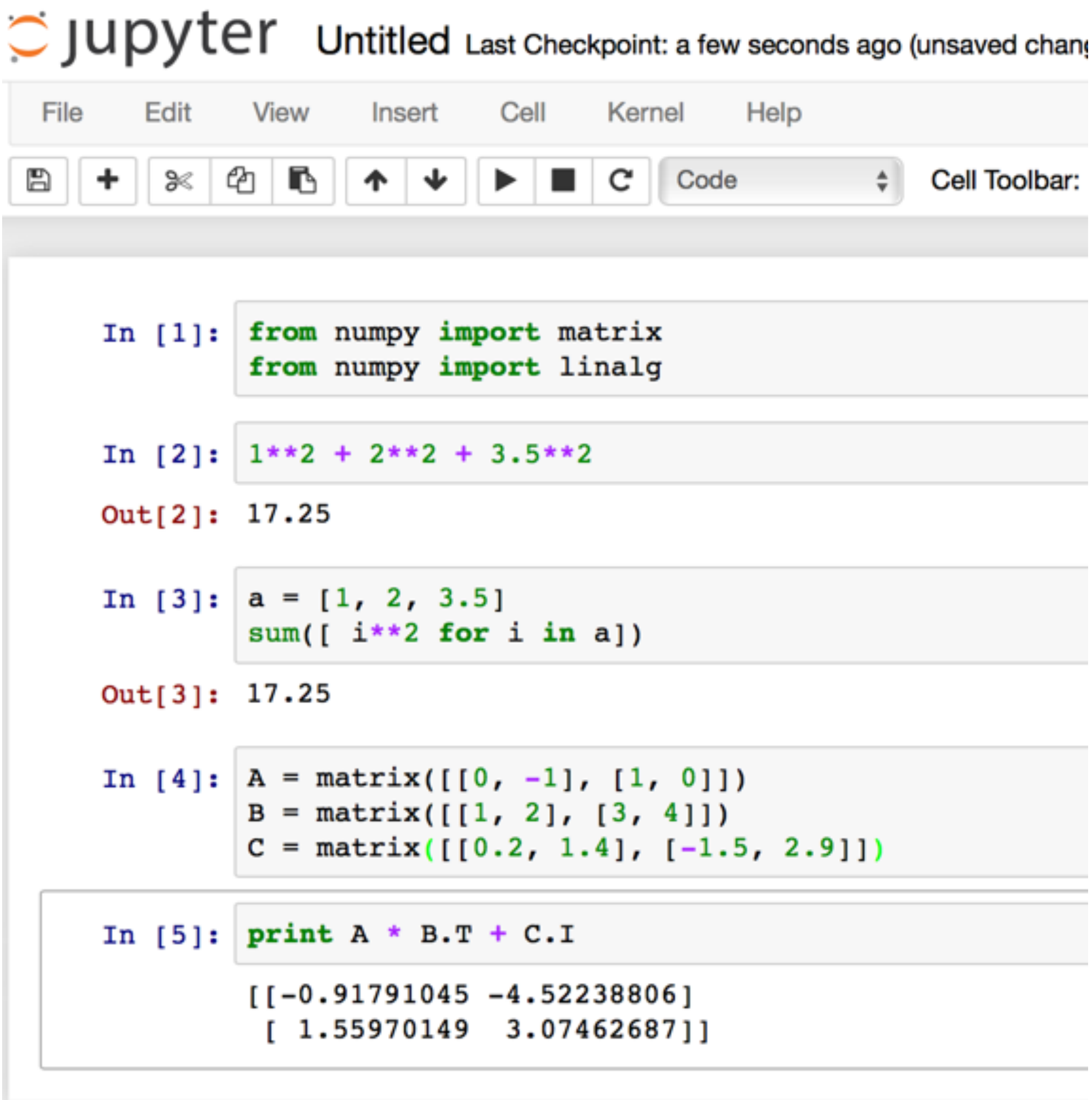
https://www.wolframalpha.com
https://www.wolframalpha.com/examples/Matrices.html

手計算も大変かと思うので紹介

パソコンでもスマホでもブラウザさえあれば使えます。



参考) Python(numpy)でやる方法



メモ(簡単な方法)

https://www.continuum.io/downloads

からAnacondaをダウンロードし
自分のパソコンにインストール

↓

Jupyter Notebookを起動

参考) Rでやる方法

```
> 1**2 + 2**2 + 3.5**2
[1] 17.25
> 1^2 + 2^2 + 3.5^2
[1] 17.25
> a <- c(1, 2, 3.5)
> sum(a**2)
[1] 17.25
> m1 <- matrix(c(0,-1,1,0),nrow=2,byrow=TRUE)
> m2 <- matrix(c(1,2,3,4),nrow=2,byrow=TRUE)
> m3 <- matrix(c(0.2,1.4,-1.5,2.9),nrow=2,byrow=TRUE)
> m1 %*% t(m2) + solve(m3)
           [,1]      [,2]
[1,] -0.9179104 -4.522388
[2,]  1.5597015  3.074627
> m1
     [,1] [,2]
[1,]    0   -1
[2,]    1    0
```