

単回帰 = 単変量の線形回帰

「線形」(線の形=linear)

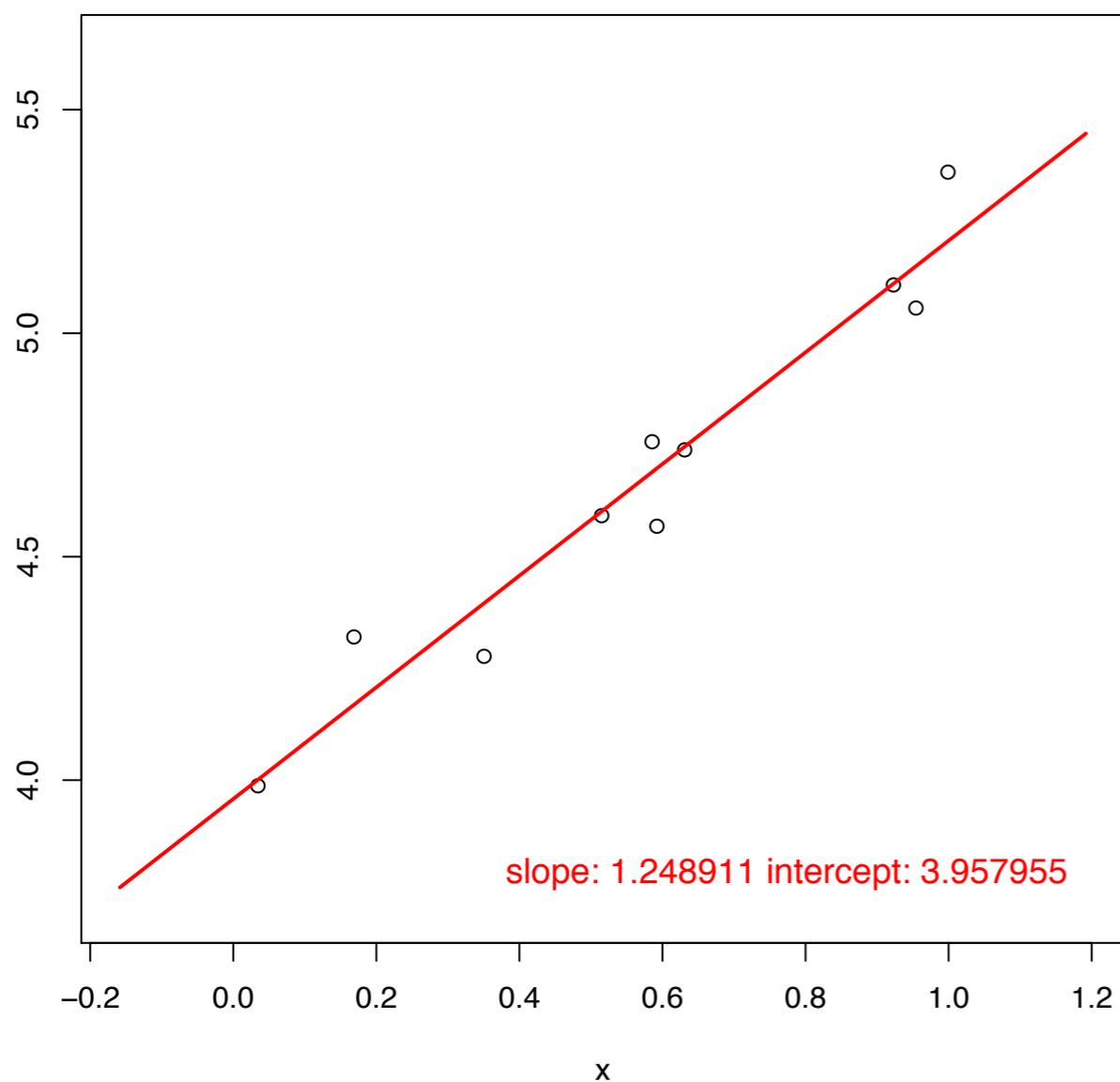
「回帰」とは

<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

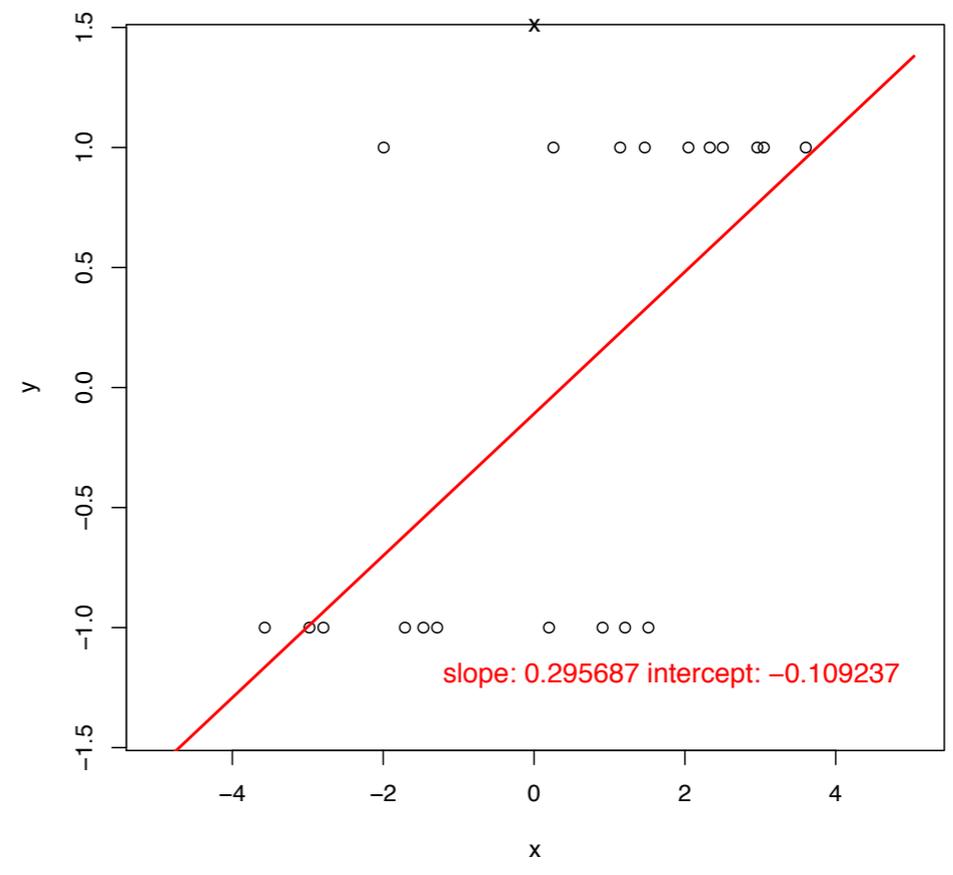
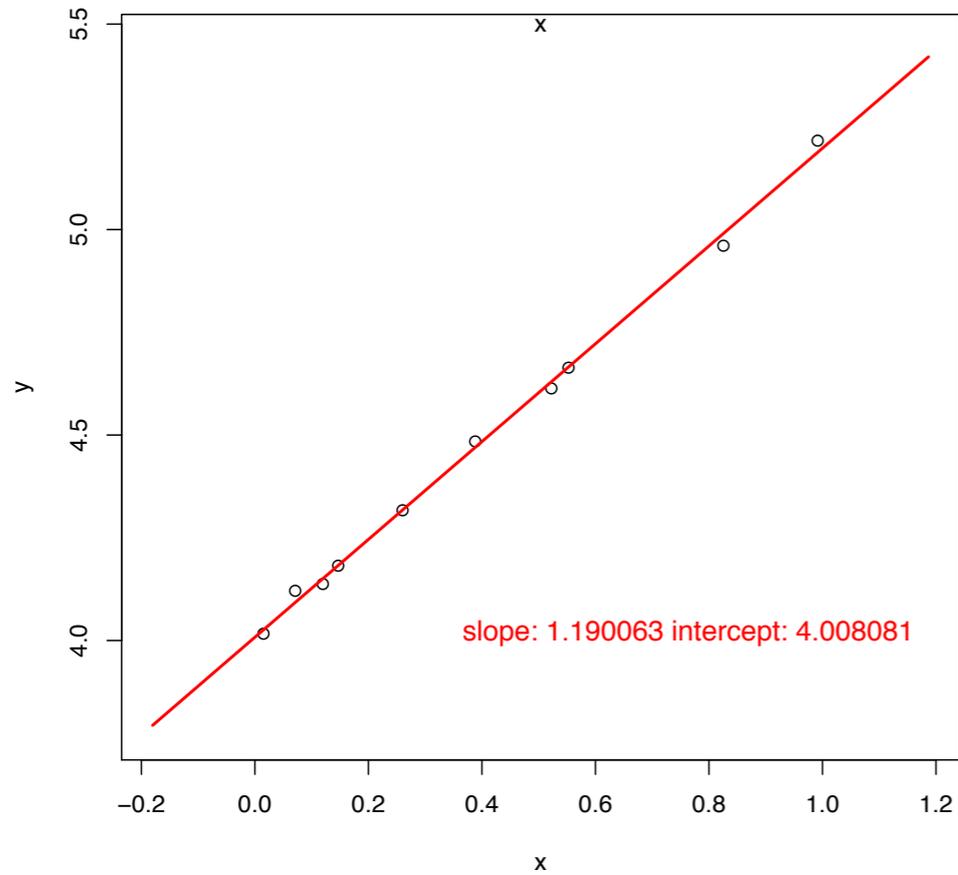
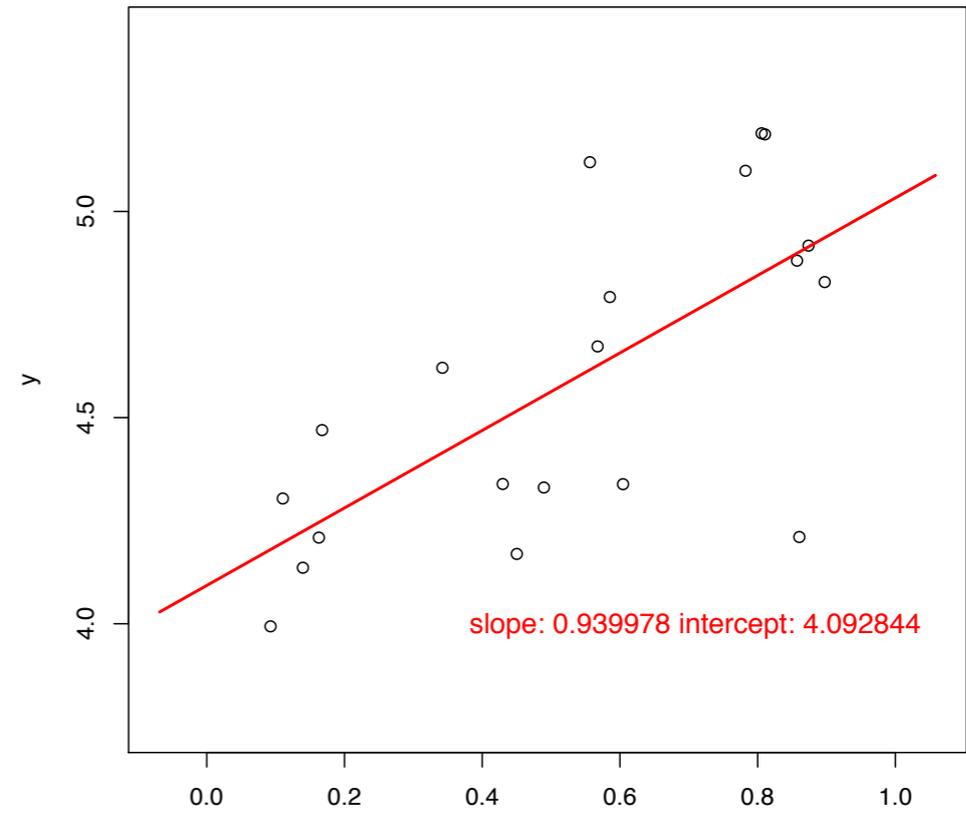
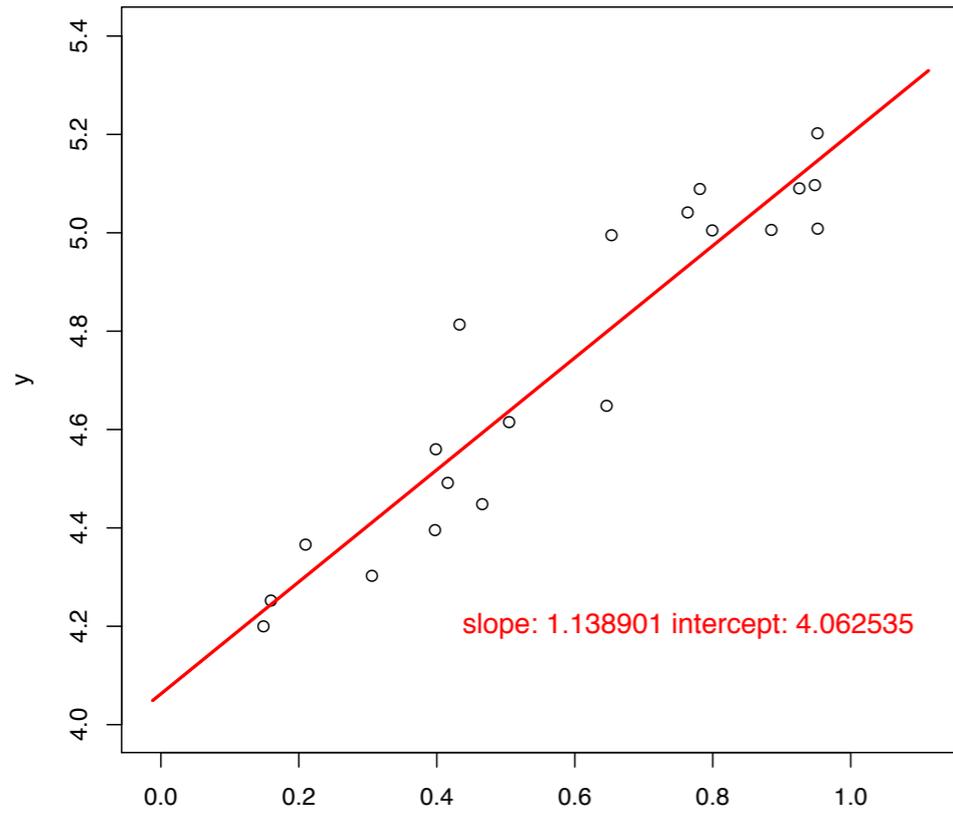
$x=0.85$ のとき、 y の予測値は
いくらくらいだろうか？

ギモン

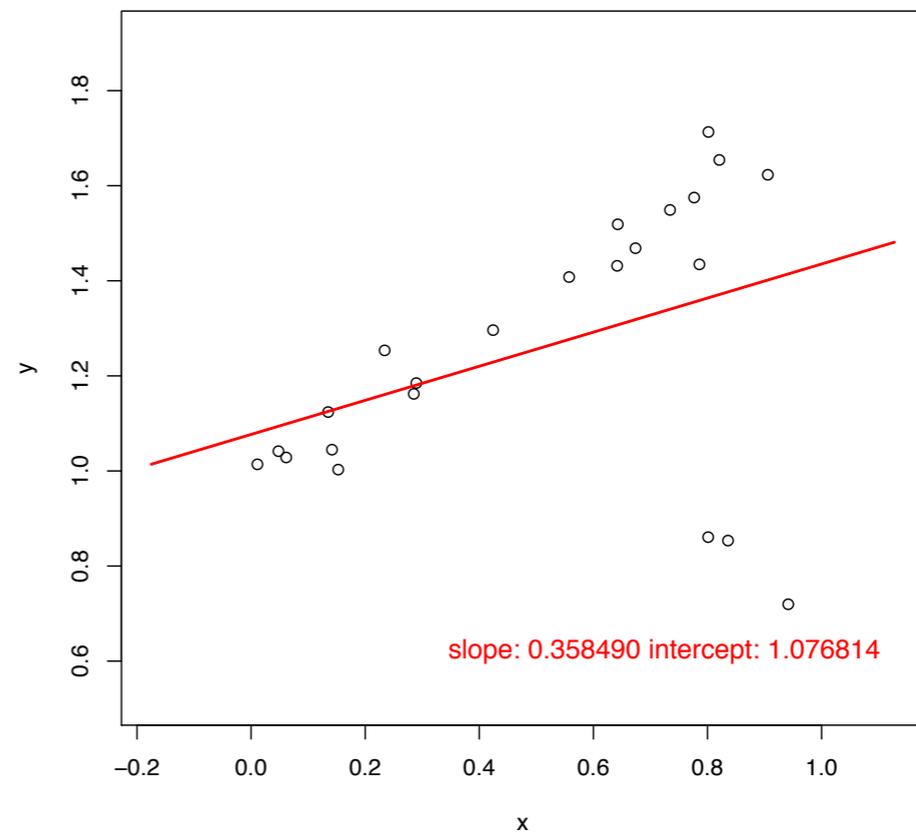
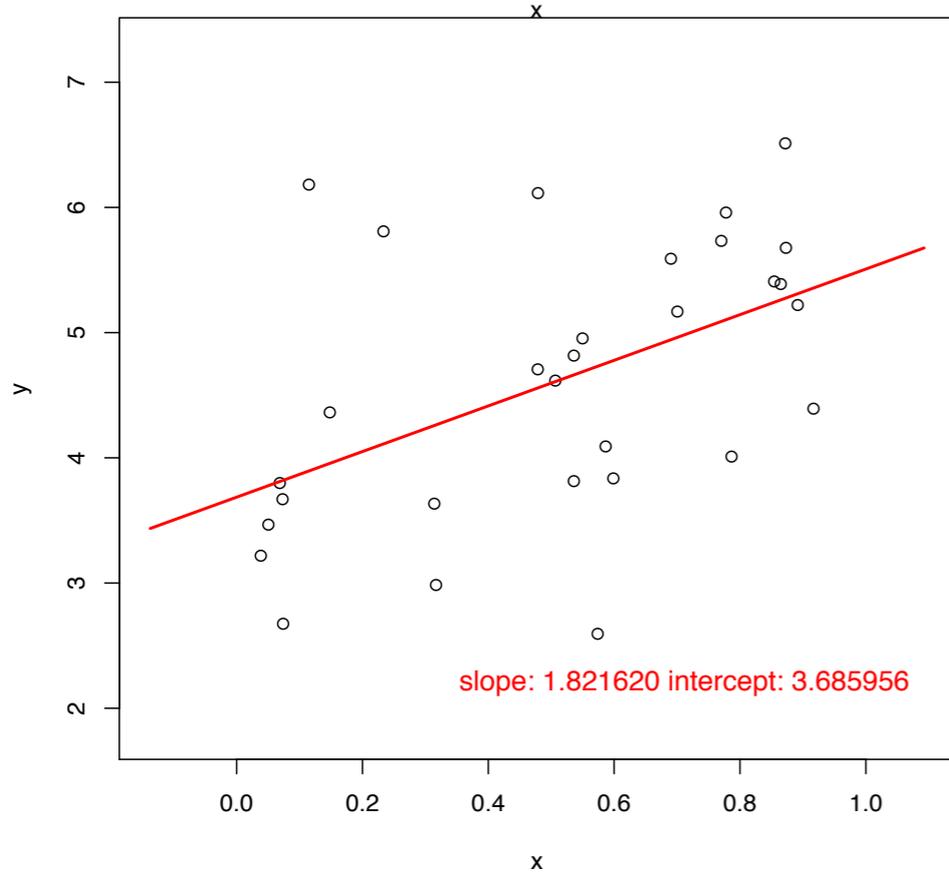
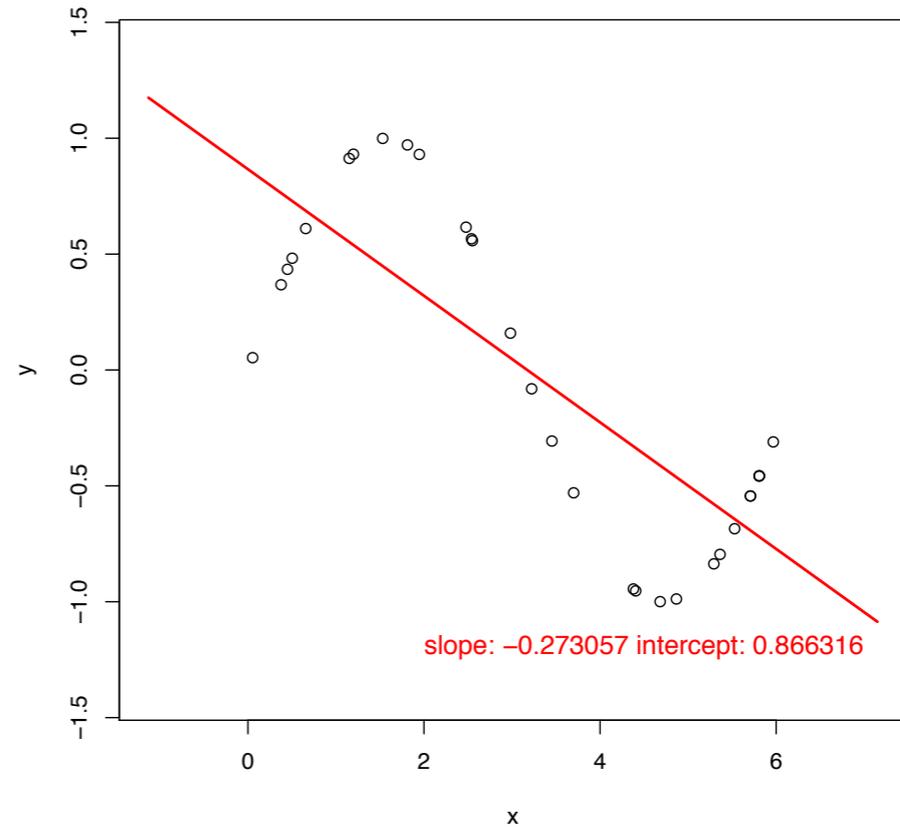
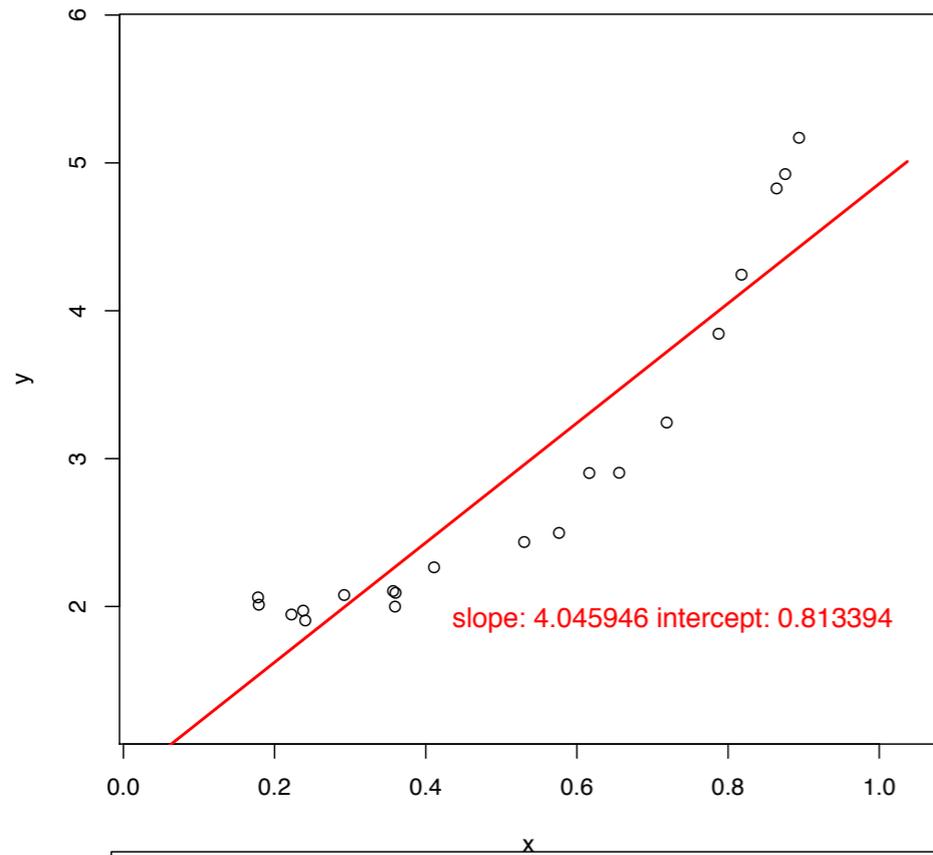
(1) データ点から傾きと切片を
どうやって計算するの？

(2) 良い悪いをどう考えれば
良いのだろうか？

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

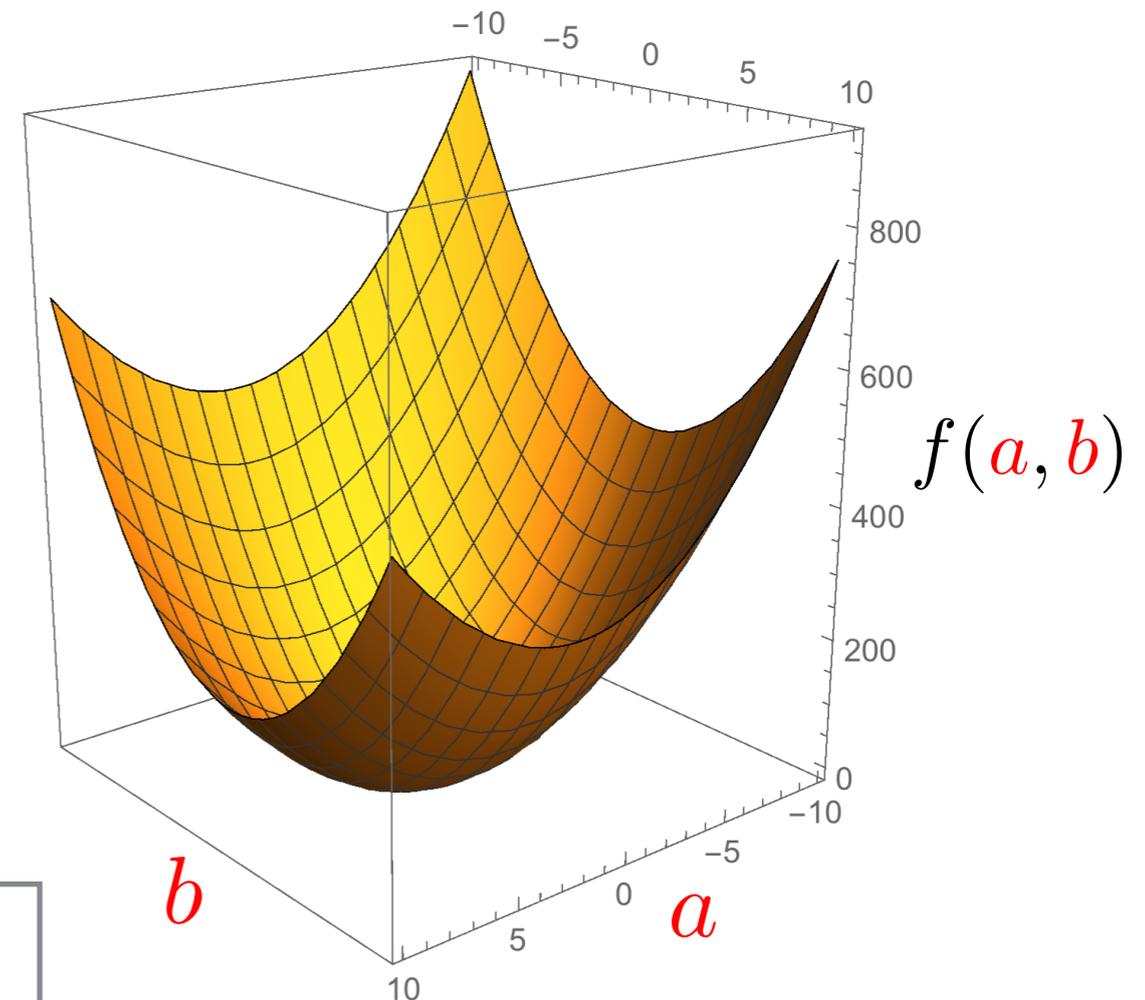


最小二乗推定の計算法(関数の極値問題に)

二乗誤差を最小にする直線当てはめ

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

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



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

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》

$$\begin{aligned} P &= x^2 - 4y \cdot x + 5y^2 - 6y + 10 = (x - 2y)^2 - (2y)^2 + 5y^2 - 6y + 10 \\ &= (x - 2y)^2 + y^2 - 6y + 10 = (x - 2y)^2 + (y - 3)^2 - 3^2 + 10 \\ &= (x - 2y)^2 + (y - 3)^2 + 1 \end{aligned}$$

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、 $x = 6, y = 3$

《別法》

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

よって、 P の最小値は1

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

偏微分で解く場合

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

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

単回帰分析 (教科書第4章の要点)

予測したい



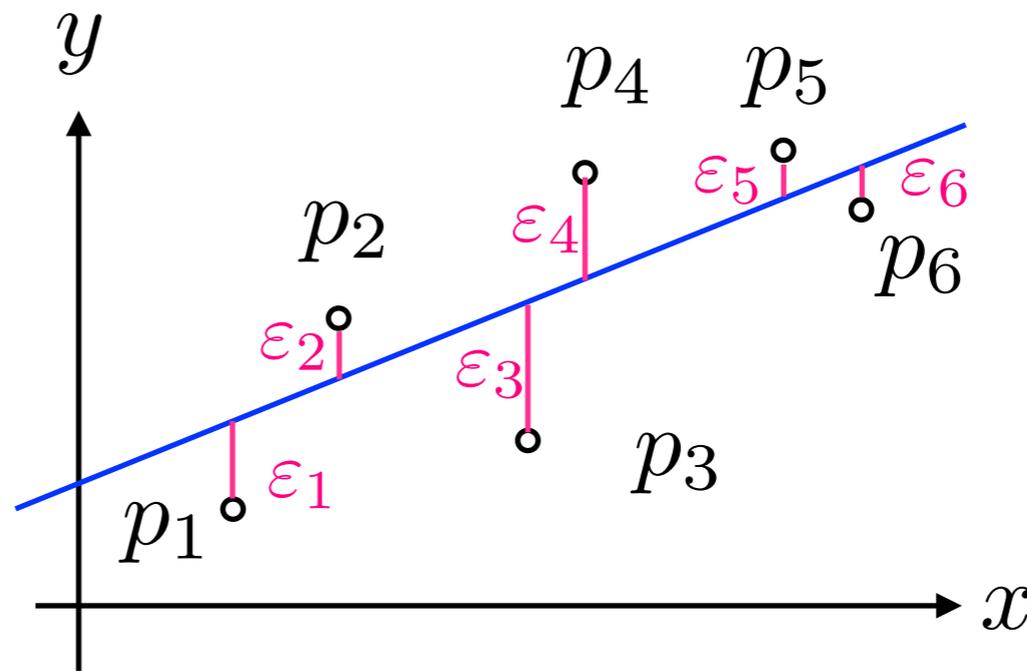
説明変数 目的変数

	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

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

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



$$y = ax + b$$

↑ ↑

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)

二乗誤差を最小にする直線当てはめ

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

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

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

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

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

行列とベクトルで表してみる

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

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

最小二乗回帰の行列形

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

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2 + \varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2 &\rightarrow \min \\ &= \|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2 = \sum_{i=1}^6 \varepsilon_i^2 \end{aligned}$$



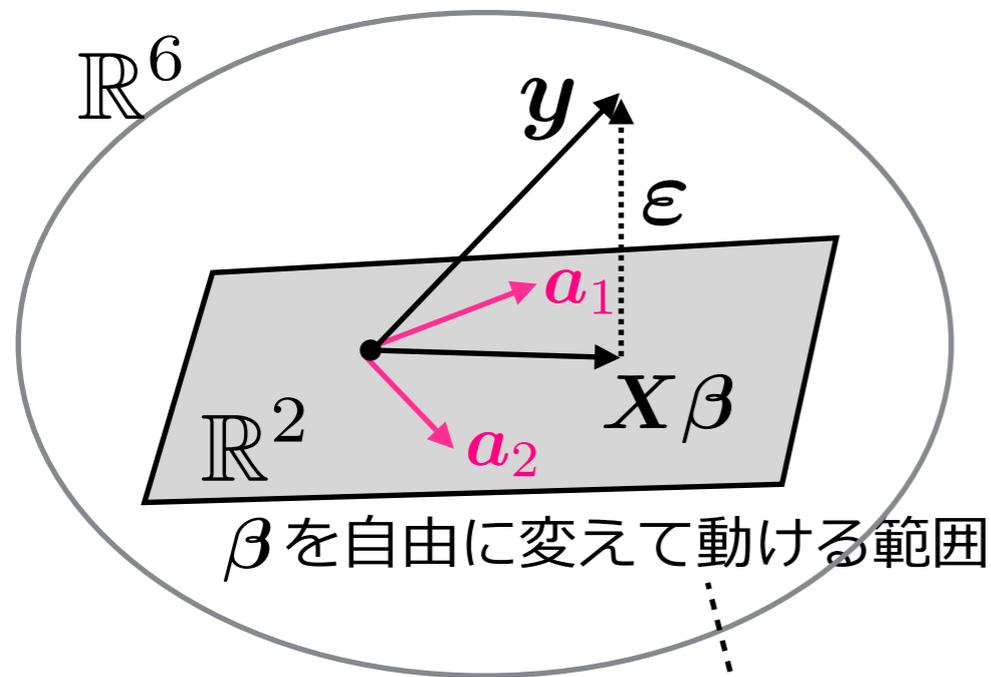
$$\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2 \rightarrow \min$$

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

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

が最小になるところを
見つければ良い。

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

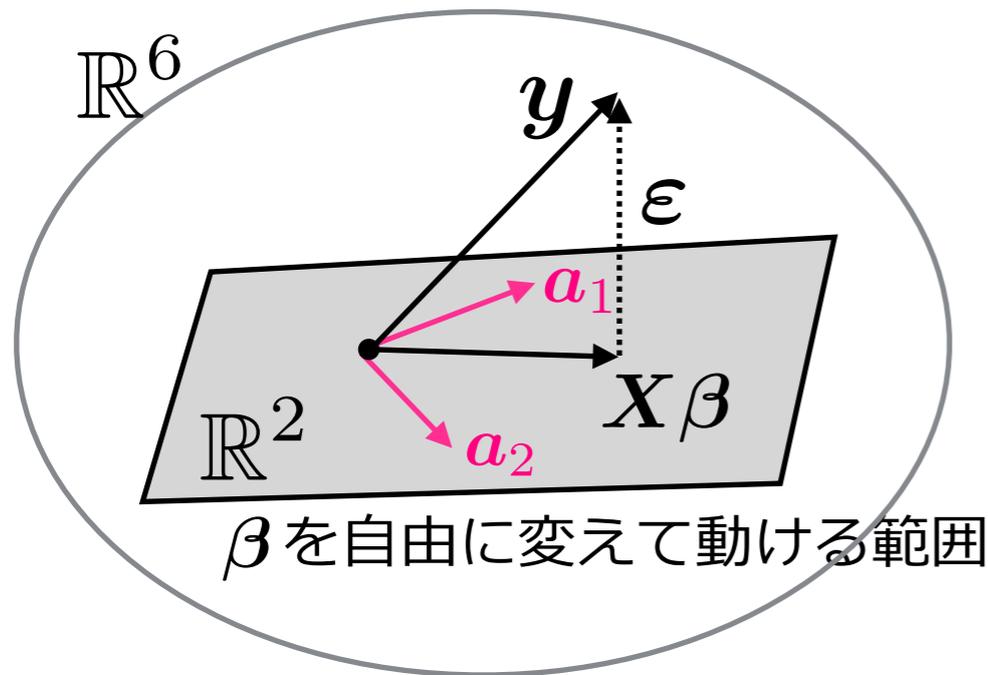


$$X\beta = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ x_4 & 1 \\ x_5 & 1 \\ x_6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

6次元空間のなかの2次元の部分空間

最も $\|\epsilon\|^2$ が小さくなるのは 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)



$$X\beta = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ x_4 & 1 \\ x_5 & 1 \\ x_6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} a_1 \perp \varepsilon, a_2 \perp \varepsilon &\Leftrightarrow \begin{bmatrix} a'_1 \varepsilon \\ a'_2 \varepsilon \end{bmatrix} = X' \varepsilon = \mathbf{0} \\ &\Leftrightarrow X'(y - X\beta) = \mathbf{0} \\ &\Leftrightarrow \beta = (X'X)^{-1} X'y \end{aligned}$$

$$X\beta = \underbrace{X(X'X)^{-1}X'}_{\text{直交射影変換}} y \quad \xrightarrow{\text{射影行列}} \quad P = X(X'X)^{-1}X'$$

単回帰を具体的に成分計算してみよう

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \textcircled{2} \quad \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 &= \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 2\bar{x}x_i + \bar{x}^2) \\ &= \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2\bar{x} \sum_{i=1}^n x_i + n\bar{x}^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2 \end{aligned}$$

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

$\textcircled{1}$
 $\textcircled{2}$

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

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

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

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

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

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

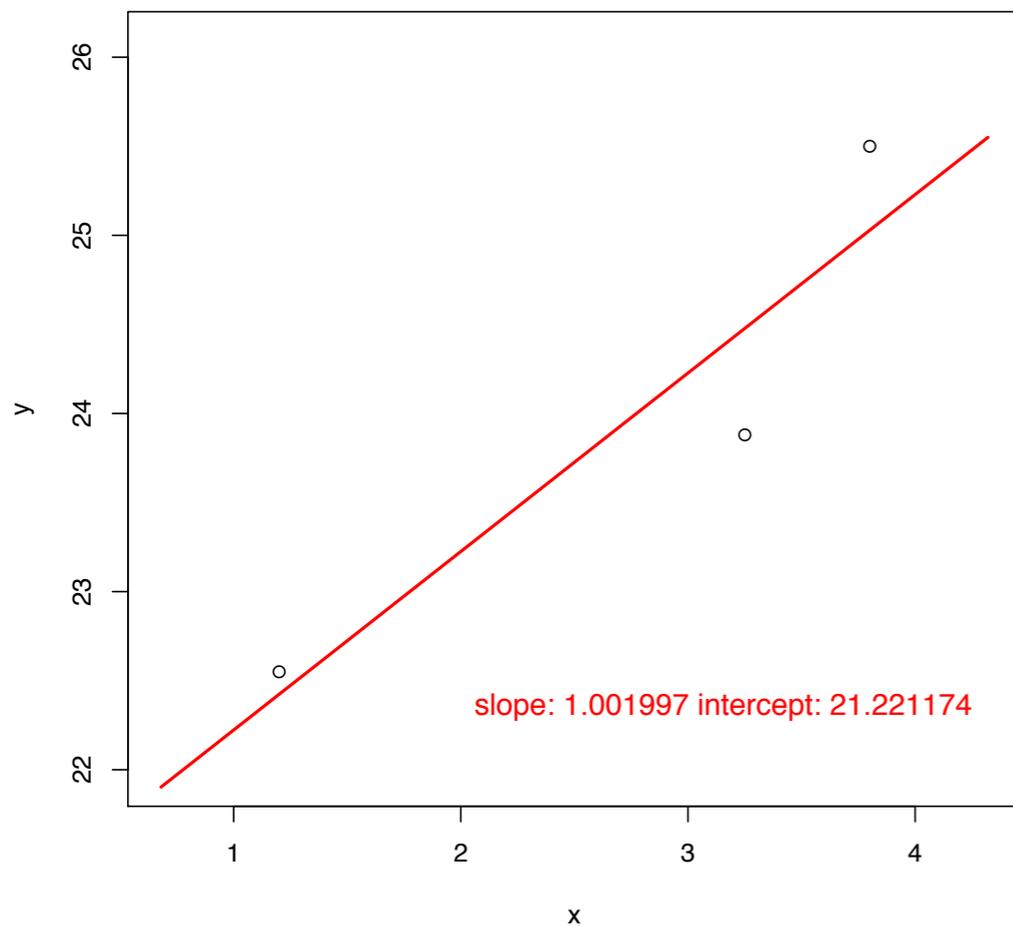
比較: 教科書(4.10)(4.15)式

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

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

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

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

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)

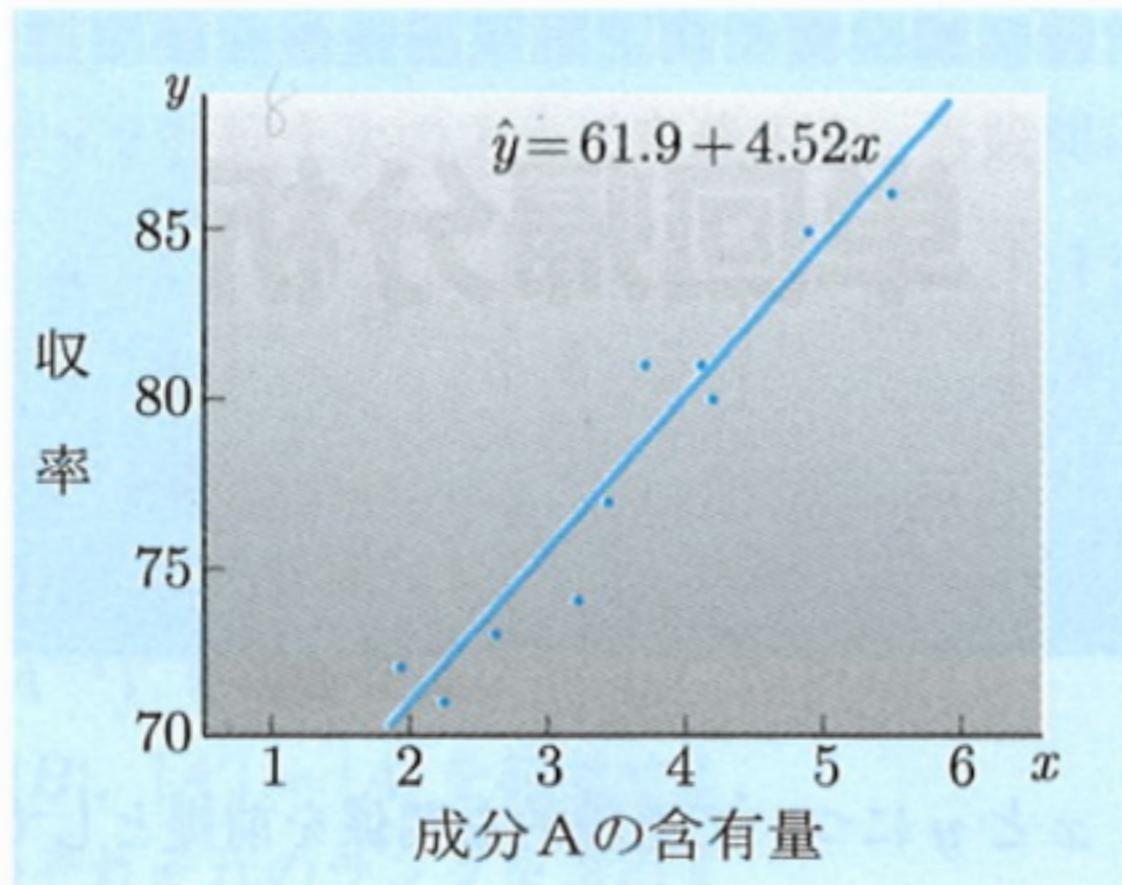


図 4.1 散布図

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>

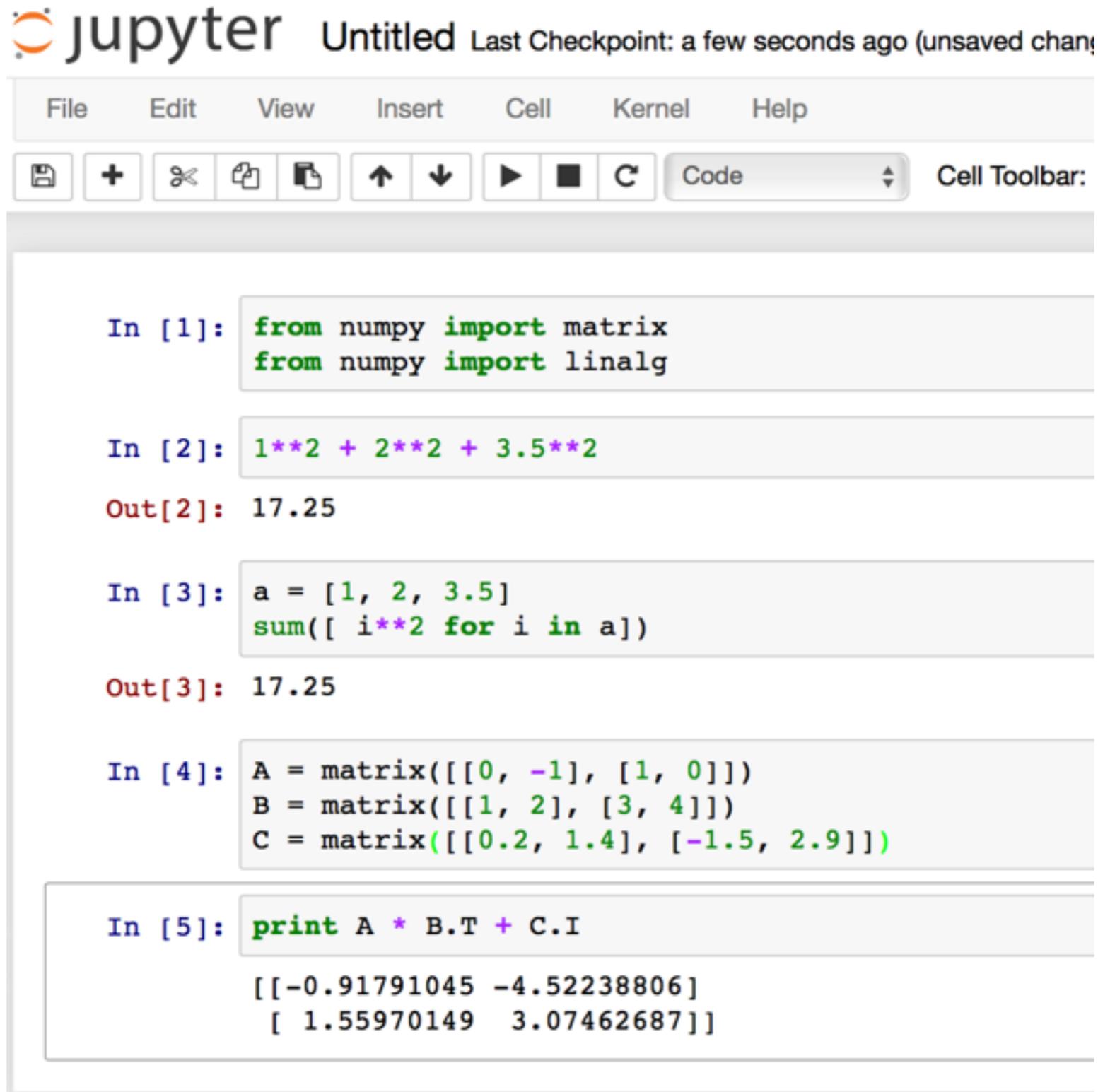
手計算も大変か と思うので紹介

パソコンでもスマホ
でもブラウザさえあれ
ば使えます。

The image displays two screenshots of the WolframAlpha website. The top screenshot shows a search for the expression $1^2 + 2^2 + 3.5^2$. The input is shown as $1^2 + 2^2 + 3.5^2$ and the result is 17.25 . The bottom screenshot shows a search for a matrix operation: $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}^T + \begin{pmatrix} 0.2 & 1.4 \\ -1.5 & 2.9 \end{pmatrix}^{-1}$. The input is shown as $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}^T + \begin{pmatrix} 0.2 & 1.4 \\ -1.5 & 2.9 \end{pmatrix}^{-1}$ and the result is $\begin{pmatrix} -0.91791 & -4.52239 \\ 1.5597 & 3.07463 \end{pmatrix}$. Both screenshots include the WolframAlpha logo and navigation buttons like 'Examples' and 'Random'.

参考) Python(numpy)でやる方法

メモ(簡単な方法)



The screenshot shows a Jupyter Notebook interface with the following content:

```
jupyter Untitled Last Checkpoint: a few seconds ago (unsaved changes)
File Edit View Insert Cell Kernel Help
[Icons] Code Cell Toolbar:
In [1]: from numpy import matrix
        from numpy import linalg
In [2]: 1**2 + 2**2 + 3.5**2
Out[2]: 17.25
In [3]: a = [1, 2, 3.5]
        sum([ i**2 for i in a])
Out[3]: 17.25
In [4]: A = matrix([[0, -1], [1, 0]])
        B = matrix([[1, 2], [3, 4]])
        C = matrix([[0.2, 1.4], [-1.5, 2.9]])
In [5]: print A * B.T + C.I
        [[-0.91791045 -4.52238806]
         [ 1.55970149  3.07462687]]
```

<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
```