データ解析

http://coconut.sys.eng.shizuoka.ac.jp/data/

静岡大学工学部
安藤和敏

2005.10.26

2-2 1変数を多変数から予測する重回帰分析

重回帰分析のデータ

個体番号	変数 x	変数 u	変数 v	変数 w	…	変数 y
1	x_1	u_1	v_1	w_1	…	y_1
2	x_2	u_2	v_2	w_2	…	y_2
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
i	x_i	u_i	v_i	w_i	…	y_i
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
n	x_n	u_n	v_n	w_n	…	y_n

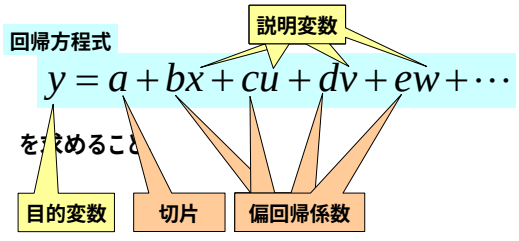
重回帰分析のデータの例

社員 No	社交性	勤勉性	企画力	判断力	給与評価
1	7	6	7	8	10
2	4	5	5	4	4
3	6	8	4	4	8
4	5	5	5	5	8
5	6	6	4	5	6
6	6	5	6	6	7
7	4	4	6	6	8

重回帰分析の目的（の一つ）

与えられたデータに「最もよくあてはまる」方程式

回帰方程式



「最もよくあてはまる」方程式ってどういうこと？

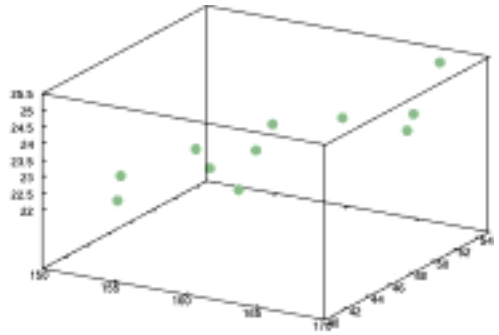
重回帰分析のデータ（説明変数が2個の場合）

個体番号	変数 x	変数 u	変数 y
1	x_1	u_1	y_1
2	x_2	u_2	y_2
⋮	⋮	⋮	⋮
i	x_i	u_i	y_i
⋮	⋮	⋮	⋮
n	x_n	u_n	y_n

重回帰分析のデータ
(説明変数が2個の場合)

番号	身長(x)	体重(u)	靴サイズ(y)
1	162	44	24.0
2	165	48	24.5
3	168	53	25.5
4	160	45	22.5
5	158	45	23.0
6	153	43	22.0
7	158	45	23.0
8	168	50	24.0
9	157	52	23.0
10	154	42	23.0
11	170	48	25.0
12	157	45	23.5
	(cm)	(kg)	(cm)

データの3次元プロット



説明変数が2個の場合の重回帰分析

与えられたデータに「最もよくあてはまる」平面

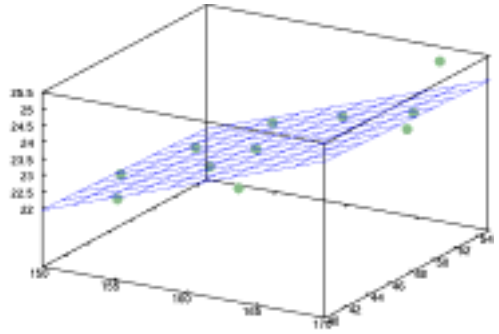
回帰方程式 $y = a + bx + cu \quad \cdots\cdots(1)$

を求めること.

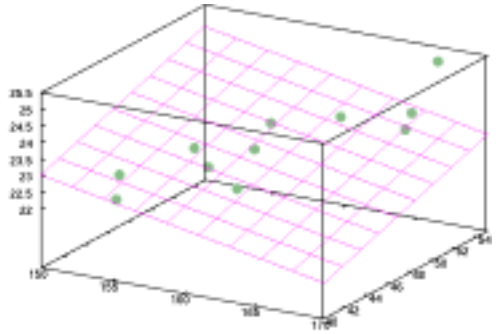
目的変数　切片　回帰係数　説明変数

「最もよくあてはまる平面」ってどういうこと？

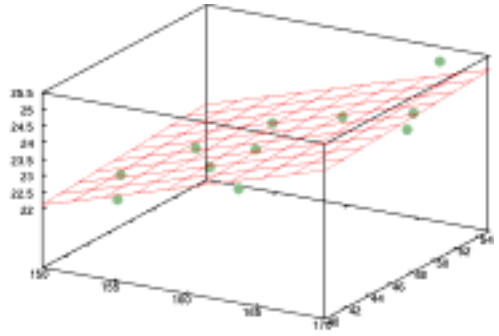
平面のあてはめ (1)



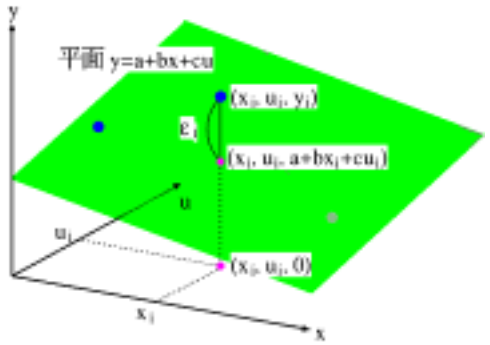
平面のあてはめ (2)



平面のあてはめ (3)



残差　$\varepsilon_i = y_i - (a + bx_i + cu_i)$



残差平方和 Q

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (a + bx_i + cu_i)\}^2$$

Qを a,b ,cを変数にもつ3変数関数として見て，$Q(a,b,c)$を最小にする a,b,cが，データに「最もよくあてはまる」平面を与えると考える．

このようにしてa,b,cを求める方法を最小2乗法と呼ぶ．

どのようにして$Q(a,b,c)$を最小にする a,b,cをもとめるのかを見ていく．

一般に多変数関数の極値（最大値，最小値）を求めるには，各変数で偏微分して0と置いた方程式系を解けばよい

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial a} = \displaystyle\sum_{i=1}^{n} -2\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0, \\ \dfrac{\partial Q}{\partial b} = \displaystyle\sum_{i=1}^{n} -2x_i\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0, \\ \dfrac{\partial Q}{\partial c} = \displaystyle\sum_{i=1}^{n} -2u_i\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0 \end{cases}$$

連立方程式を解く（1）

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0, \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{n} x_i\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0, \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{n} u_i\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0 \end{cases}$$

連立方程式を解く（2）

$$\sum_{i=1}^{n} \{y_i - (a + bx_i + cu_i)\} = 0$$

$$\bar{y} = a + b\bar{x} + c\bar{u}$$

連立方程式を解く（3）

$$\sum_{i=1}^{n} x_i\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} x_i\{y_i - (\bar{y} - b\bar{x} - c\bar{u} + bx_i + cu_i)\}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} x_i\{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \bar{x}\{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})\{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}$$

$$= ns_{xy} - bns_x^2 - cns_{xu}$$

連立方程式を解く (4)

$$\sum_{i=1}^{n} u_i\{y_i - (a + bx_i + cu_i)\}$$
$$= \sum_{i=1}^{n} u_i\{y_i - (\bar{y} - b\bar{x} - c\bar{u} + bx_i + cu_i)\}$$
$$= \sum_{i=1}^{n} u_i\{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}$$
$$+ \sum_{i=1}^{n} \bar{u}\{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}$$
$$= \sum_{i=1}^{n} (u_i - \bar{u})\{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}$$
$$= ns_{uy} - bns_{xu} - cns_u^2$$

連立方程式を解く (5)

$$0 = s_{xy} - bs_x^2 - cs_{xu},$$

$$0 = s_{uy} - bs_{xu} - cs_u^2$$

$$\begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{xy} \\ s_{uy} \end{bmatrix}$$

連立方程式の解

$$\begin{bmatrix} b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} s_{xy} \\ s_{uy} \end{bmatrix},$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x} - c\bar{u}$$

多重共線性 (1)

$\det \begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix} = 0$ のときは,

のときは, 方程式

$$\begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{xy} \\ s_{uy} \end{bmatrix}$$

の解は一意に定まらない. なにが起こっているのか？

多重共線性 (3)

$$\det \begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow s_x^2 s_u^2 - s_{xu}^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow r_{xu}^2 = \frac{s_{xu}^2}{s_x^2 s_u^2} = 1$$

であるから, xとuの間には, $x = \alpha u + \beta$という関係がある. したがって, xかuのうちのどちらか一方をモデルから取り除いてもyを説明できる.

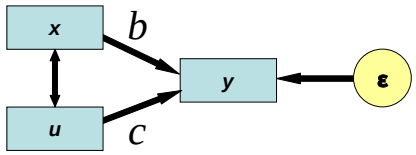
多重共線性 (3)

$$\det \begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix} \quad 0$$

のときも, 同様のことが言える.

重回帰分析のパス図

$$y = a + bx + cu$$



残差平方和の別表現 (1)

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (a + bx_i + cu_i)\}^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \{y_i - \bar{y} + \bar{y} - (a + bx_i + cu_i)\}^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \{y_i - \bar{y} + a + b\bar{x} - (a + bx_i + cu_i)\}^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \{(y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x}) - c(u_i - \bar{u})\}^2$$

残差平方和の別表現 (2)

(つづき)

$$= \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 + b^2 \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 + c^2 \sum_{i=1}^{n} (u_i - \bar{u})^2$$

$$- 2b \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x}) - 2c \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})(u_i - \bar{u})$$

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

$$= ns_y^2 + b^2 ns_x^2 + c^2 ns_u^2 - 2nbs_{xy} - 2ncs_{uy} + 2nbcs_{xu}$$

残差平方和の別表現 (3)

(つづき)

$$= ns_y^2 + b^2 ns_x^2 + c^2 ns_u^2 - 2nbs_{xy} - 2ncs_{uy} + 2nbcs_{xu}$$

$$= ns_y^2 + n\begin{bmatrix} b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b \\ c \end{bmatrix} - 2nbs_{xy} - 2ncs_{uy}$$

$$= ns_y^2 + n\begin{bmatrix} b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_{xy} \\ s_{uy} \end{bmatrix} - 2nbs_{xy} - 2ncs_{uy}$$

$$= ns_y^2 - n\begin{bmatrix} b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_{xy} \\ s_{uy} \end{bmatrix} = ns_y^2 - n\begin{bmatrix} b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b \\ c \end{bmatrix}$$

残差平方和の別表現 (4)

$$s_\varepsilon^2 = s_y^2 - \begin{bmatrix} b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_x^2 & s_{xu} \\ s_{xu} & s_u^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b \\ c \end{bmatrix}$$

$$= s_y^2 - bs_x^2 - cs_u^2 - 2bcs_{xu}$$

つまり

$$s_y^2 = s_\varepsilon^2 + bs_x^2 + cs_u^2 + 2bcs_{xu} \quad \cdots\cdots (3)$$

本日のまとめ

- 説明変数が2個の場合の重回帰分析のモデルを理解した.
- 説明変数が2個の場合の最小2乗法の考え方, 及び, 回帰方程式の求め方を理解した.
- Excelを用いて重回帰分析を行う方法を理解した.
- 次の式

  $s_y^2 = s_\varepsilon^2 + bs_x^2 + cs_u^2 + 2bcs_{xu} \cdots\cdots (3)$

  の導出法を理解した.