# 回帰モデル 概~~様~~

概要

木村 朗 (木村)

---

✓ 線形モデルは「e」を「存在」させる。

✓「最小二乗法」の数理メカニズム→偏微分。

✓重回帰モデル以降 線形代数・ベクトル（確率を扱う）点。

✓ 多次元線形モデル → d次元ベクトル

---

式の構造をながめると、統計ソフトの「セル入力」→処理→「結果出力」がイメージできる。

✓「回帰モデル」は基本中の基本。
以降 数理モデル、確率モデルとつづく……のデス。

回帰分析

$Y = aX + b + \varepsilon$ とする。

$(X = 1 \ldots n)$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial a} aX + b + \varepsilon \\ \dfrac{\partial}{\partial b} aX + b + \varepsilon \end{cases}$$

を求める。

ここで $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i = \cancel{na}\ \bar{X} \cdot na$

$\left( \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i = \cancel{n}\bar{Y} \cdot n \cdot b \right) \cdots ?$

回帰モデル

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i,\ i = 1, 2, \cdots, n$$

$$E[\varepsilon_i] = 0,\ V[\varepsilon_i] = \sigma^2,\ Cov(\varepsilon_i \varepsilon_j) = 0$$

$$(i \neq j),\ \forall i$$

---

LSD coefficient.

$$S(\alpha, \beta) = \sum \varepsilon_i^2 = \sum (y_i - \alpha - \beta x_i)^2$$

$$\left( \sum_{i=1}^{n} \right)$$

$\varepsilon_i$の2乗

これを最小にする係数$(\alpha, \beta)$の推定値を$(a, b)$とする.

偏微分

---

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial \alpha} S(a, b) = \dfrac{\partial}{\partial \cancel{\alpha}\, a} \cancel{\sum (\alpha + \beta x_i + \varepsilon_i)^2} = 0 \\ \quad \varepsilon_i = y_i - \cancel{\alpha}\, a - \cancel{\beta}\, b\, x_i \\ \dfrac{\partial}{\partial \beta} S(a, b) = \dfrac{\partial}{\partial \cancel{\beta}\, b} \cancel{\sum (\alpha + \beta x_i + \varepsilon_i)^2} = 0 \\ \quad \varepsilon_i = y_i - \cancel{\alpha}\, a - \cancel{\beta}\, b\, x_i \end{cases}$$

---

の連立方程式を解く.

$\cancel{\frac{\partial}{\partial \alpha}(\alpha}$

$$\frac{\partial}{\partial a}\sum(y_i - a - bx_i)^2 \;(= 0)$$

$$= \cancel{\frac{\partial}{\partial a}(}$$

$$= 2\sum(y_i - a - bx_i)\cdot(-1) \quad — ①$$

$$\frac{\partial}{\partial b}\sum(y_i - a - bx_i)^2$$

$$= 2\sum(y_i - a - bx_i)\cdot(-x_i) \quad — ②$$

①, ② を "0" となるので

$$\begin{cases} 2\sum(y_i - a - bx_i)\cdot(-1) = 0 \\ 2\sum(y_i - a - bx_i)\cdot(-x_i) = 0 \end{cases}$$

ここで $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum x_i$

$$\sum x_i = n\bar{x}$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n}\sum y_i$$

$$\sum y_i = n\bar{y}$$

$\frac{\partial f}{\partial a}$ $2\sum(y_i - a - bx_i)\cdot -1 = 0$

$\sum(y_i - a - bx_i) = 0$

$\sum y_i - \sum a - b\sum x_i = 0$

$\bar{x}$ ~ [illegible] $\bar{y}$ [illegible] -

$n\bar{y} - \underbrace{\sum a}_{=na} - b\cdot n\bar{x} = 0$ —— ③

$2\sum(y_i - a - bx_i)\cdot(-x_i) = 0$

$\sum(y_i - a - bx_i)\cdot\boxed{\cancel{-}}x_i = 0$

$-\sum x_i y_i + \underbrace{\sum a x_i}_{na\sum x_i \to na\bar{x}} + b\sum x_i^2 = 0$

$\bar{x}$ ~ $\bar{y}$ ~

$-n\bar{x}y_i + an\bar{x} + b\cancel{(n\bar{x}_i)}^2 = 0$

$\cancel{\sum n}a$

$\sum x_i y_i - na\bar{x} - b\sum x_i^2 = 0$ —— ④

---

[illegible] ③ [illegible]

~~③ [illegible] ④ [illegible]~~

$n\bar{y} - na - \cancel{bn} \Rightarrow nb\bar{x} = 0$

$\sum x_i y_i - na\bar{x} - b\sum x^2 = 0$

$$n\bar{y} - na - nb\bar{x} = 0$$

両辺をnで割ると

$$\bar{y} - a - b\bar{x} = 0 \rightarrow \bar{y} - b\bar{x} = a$$

$$\underline{a = \bar{y} - b\bar{x}}$$

---

これを連立方程式の④に代入

$$\sum x_i y_i - n(\bar{y} - b\bar{x})\bar{x} - b\sum x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - n\bar{y}\bar{x} + nb\bar{x}^2 - b\sum x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - n\bar{y}\bar{x} + \cancel{nb\bar{x}}\, b(n\bar{x}^2 - \sum x_i^2) = 0$$

$$b(n\bar{x}^2 - \sum x_i^2) = n\bar{y}\bar{x} - \sum x_i y_i$$

$$b = \frac{n\bar{y}\bar{x} - \sum x_i y_i}{n\bar{x}^2 - \sum x_i^2}$$

$$\leftrightarrow \frac{\sum x_i y_i - n\bar{y}\bar{x}}{\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

決定係数

$$R^2 = 1 - \underbrace{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}}_{残差.}$$

$$0 \leq R^2 \leq 1,$$

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

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

→ $R^2 \to 1$ のとき. $r_{xy}$ は 1 or −1 に近くなる.

[illegible]
ベクトル

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i^2 = (y_i - \alpha - \beta x_i)^2$$

$\alpha \to a,\ \beta \to b$

$$\frac{\partial}{\partial b} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^{2}$$

$$= \sum 2 (y_i - \overset{a}{\cancel{\alpha}} - \overset{b}{\cancel{\beta}} x_i) \cdot (-x_i) = 0$$

$$= \cancel{\sum 2 y}$$

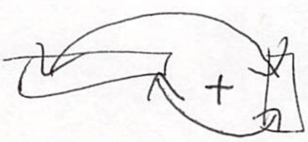
$$= \cancel{2} \sum (y_i x_i - \overset{a}{\cancel{\alpha}} x_i - \overset{b}{\cancel{\beta}} x_i^2) = 0$$

$$\sum y_i x_i - \sum x_i \cdot \overset{a}{\cancel{\alpha}} - \sum x_i \cdot \overset{b}{\cancel{\beta}} = 0$$

$\alpha$ [illegible]

$$\begin{cases} na + nb\bar{x} = n\bar{y} \\ na\bar{x} + b\sum x_i^2 = \sum x_i y_i \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$



左辺の
行列式

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

$$= n^2 \times (\text{データの分散}) \neq 0.$$

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

$$n = \frac{n^2}{n} = n^2 \times \underbrace{\frac{1}{n}\left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \bar{x}^2}_{\text{分散}}\right)}_{\overline{\text{平均}}^2 - 2\text{乗の平均}}$$

$$\boxed{n^2 \times \text{データの分散} = \text{行列式}} \neq 0$$

となるので

逆行列を持つ.

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$

係数の確率的表示.

$$\begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum(\alpha + \beta x_i + e_i) \\ \sum x_i(\alpha + \beta x_i + e_i) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n\alpha + \beta \sum x_i + \sum e_i \\ \alpha \sum x_i + \beta \sum x_i^2 + \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n\alpha + \beta \sum x_i \\ \alpha \sum x_i + \beta \sum x_i^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

よって.

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \left\{ \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix} \right\}$$

$$= \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum \varepsilon_i \\ \sum x_i \varepsilon_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

ここで

$$\begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{n\sum x_i^2 - (n\bar{x})^2}}_{n^2 \times (\text{データ分散})} \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & -n\bar{x} \\ -n\bar{x} & n \end{pmatrix}$$

//

$(\ )^{-1}$

---

重回帰

$$y_i = \alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \cdots, n$$

$$E[\varepsilon_i] = 0, \quad V[\varepsilon_i] = \sigma^2, \quad Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \quad (i \neq j) \ \forall i$$

LSD で ~~coefficient~~

coefficient を ~~推定~~ estimate

残差平方和

$$S(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_{i1} - \gamma x_{i2})^2$$

これを最小にする $(\alpha, \beta, \gamma)$ を $(a, b, c)$

偏微分がゼロ.

$(a, b)$ は 残差平方和を 偏微分ゼロとして 連立方程式

c2

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} S(a,b,c) = -2\sum(y_i - a - b x_{i1} - c x_{i2}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} S(a,b,c) = -2\sum(y_i - a - b x_{i1} - c x_{i2}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \gamma} S(a,b,c) = -2\sum(y_i - a - b x_{i1} - c x_{i2}) = 0$$

---

−2を三項に分けると.

$$\sum y_i - na - b\sum x_{i1} - c\sum x_{i2} = 0$$

$$\sum y_i x_{i1} - a\sum x_{i1} - b\sum x_{i1}^2 - c\sum x_{i1}x_{i2} = 0$$

$$\sum y_i x_{i2} - a\sum x_{i2} - b\sum x_{i1}x_{i2} - c\sum x_{i2}^2 = 0$$

移項すると

$$na + b\sum x_{i1} + c\sum x_{i2} = \sum y_i$$

$$a\sum x_{i1} + b\sum x_{i1}^2 + c\sum x_{i1}x_{i2} = \sum y_i x_{i1}$$

$$a\sum x_{i2} + b\sum x_{i1}x_{i2} + c\sum x_{i2}^2 = \sum y_i x_{i2}$$

---

[illegible]

$$\begin{pmatrix} n & \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i2} \\ \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i1}^2 & \Sigma x_{i1}x_{i2} \\ \Sigma x_{i2} & \Sigma x_{i1}x_{i2} & \Sigma x_{i2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma y_i \\ \Sigma y_i x_{i1} \\ \Sigma y_i x_{i2} \end{pmatrix}$$

---

左辺の行列が逆行列をもつとすると（∵ 正則行列であるということ）

a, b, c は、

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i2} \\ \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i1}^2 & \Sigma x_{i1}x_{i2} \\ \Sigma x_{i2} & \Sigma x_{i1}x_{i2} & \Sigma x_{i2}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \Sigma y_i \\ \Sigma y_i x_{i1} \\ \Sigma y_i x_{i2} \end{pmatrix}$$

---

ここで、

$$\begin{pmatrix} \Sigma y_i \\ \Sigma y_i x_{i1} \\ \Sigma y_i x_{i2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma(\alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + \varepsilon_i) \\ \Sigma(\alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + \varepsilon_i) x_{i1} \\ \Sigma(\alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + \varepsilon_i) x_{i2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n\alpha + \beta \Sigma x_{i1} + \gamma \Sigma x_{i2} + \Sigma e_i \\ \alpha \Sigma x_{i1} + \beta \Sigma x_{i1}^2 + \gamma \Sigma x_{i1}x_{i2} + \Sigma x_{i1} e_i \\ \alpha \Sigma x_{i2} + \beta \Sigma x_{i1}x_{i2} + \gamma \Sigma x_{i2}^2 + \Sigma x_{i2} e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i2} \\ \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i1}^2 & \Sigma x_{i1}x_{i2} \\ \Sigma x_{i2} & \Sigma x_{i1}x_{i2} & \Sigma x_{i2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Sigma e_i \\ \Sigma x_{i1} e_i \\ \Sigma x_{i2} e_i \end{pmatrix}$$

よって

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n & \sum x_{i1} & \sum x_{i2} \\ \sum x_{i1} & \sum x_{i1}^2 & \sum x_{i1}x_{i2} \\ \sum x_{i2} & \sum x_{i1}x_{i2} & \sum x_{i2}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_{i1}\varepsilon_i \\ \sum x_{i2}\varepsilon_i \end{pmatrix}$$

---

重要

△ この逆行列、正則性がない時。

↓

多重共線性。

この計算はできない。(a, b, c)を決定できない

重回帰(d 変数、行列表示)

行列とベクトルを使って ~~s~~ LSD により推定。

係数を

回帰モデルの変数が d 個

線形回帰モデル

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_d x_{id} + \varepsilon_i, \quad i=1,\ldots,n$$

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nd} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_d \end{pmatrix}, \quad e = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

線形回帰モデルは

$$y = X\beta + \varepsilon, \quad E[e] = 0, \quad V[e]\ \sigma^2 I_n$$

ここで $I_n$ は n 次元単位行列、残差平方和

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = e^T e$$

$$= (y - X\beta)^T (y - X\beta)$$

$$= (y - \beta^T X^T)(y - X\beta)$$

$$= y^T y - 2\beta^T X^T y + \beta^T X^T X \beta$$

2~~次元~~ これを$\beta$で微分して0とおいて
方程式を解けば係数推定できる.

○ベクトルでの微分(勾配ベクトル)の公式を確認する

$a$は定数ベクトル, $A$は定数の対称行列

$$\frac{\partial}{\partial x} x^T a = a, \quad \frac{\partial}{\partial x} x^T A x = 2Ax$$

---

2次元

$$\frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} (x \ y) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} (ax + by)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(ax+by) \\ \frac{\partial}{\partial y}(ax+by) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

---

$$\frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} (x \ y) \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} (ax^2 + 2bxy + dy^2)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(ax^2+2bxy+dy^2) \\ \frac{\partial}{\partial y}(ax^2+2bxy+dy^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2ax+2by \\ 2bx+2dy \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

これを使って残差平方和を微分すると

$$\frac{\partial}{\partial \beta} S(\beta) = -2X^T y + 2X^T X \beta$$

これが0になる$\beta$を$b$とする.

$$-2X^T y + 2X^T X b = 0$$

$$X^T X b = X^T y$$

$$\boxed{\begin{aligned} -2X^T y + 2X^T X b &= 0 \\ X^T X b &= X^T y \\ b &= (X^T X)^{-1} X^T y \end{aligned}}$$

これが $X^T X$ が正則(逆行列をもつ)ならば

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y$$

◎ もしこれの逆行列が存在しなければ, $b$を決定することができない.

$$\Updownarrow$$

多重共線性が起きている.

# 自由度調整済み決定係数

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \varepsilon$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon'$$

当てはまりぐあい → 1変数のとき 決定係数

多変数のとき ↓ $\boxed{\text{弱点}}$があるので使えない

☆ どんな変な説明変数をもってきても、
説明変数が多くなる程、決定係数は
必ず大きくなる。

↓

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \varepsilon$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon'$$

という2つのモデルをLSDで推定する

( 最適化を行うと 後の残差平方和は必ず
後者のほうが小さい。 )

前者で残差平方和を最小にすると 後者で $\beta_2 = 0$
という制約をつけた残差平方和を最小にすることと等しい

↓
予想：制約無しで最小化する方が小さくなる

前者で最小化した残差平方和は後者より小さくはなれない。

したがって、残差平方和が小さいほど決定係数は大きくなる。↓

後者のモデルの $R^2$ は必ず前者以上になる

$x_2$ がどんな変数でも成り立つ

---

したがって重回帰分析では決定係数は使えない

↓

そこで変数の数を考慮した自由度調整済み決定係数を使う

---

$\hat{R}^2$

$$1-\left\{(1-R^2)\times\frac{n-1}{n-d-1}\right\}$$

$$\hat{R}^2=1-(1-R^2)\frac{n-1}{n-d-1}$$

$n-1$

$n-1-d$

変数が増えて $R^2$ ↑しても、その増加量が少なければ、変数の数 $d$ により全体の値が小さくなるように調整されている。増加した変数の説明力が ~~弱いと $\hat{R}^2$ は小さくなるようになっている。~~

# regression model

$$y_i = \underline{\underline{\alpha}} + \underline{\underline{\beta}} x_i + e_i \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$E[e_i] = 0, \quad V[e_i] = \sigma^2$$

LSDとは $e_i$ が $\hat{y}_i - y_i$ を最小化すること

パラメータ $\alpha, \beta$ を推定すること

① 偏微分して0とおく連立方程式を解く

$$e_i = y_i - \alpha - \beta x_i \qquad (\alpha, \beta)$$

$\downarrow$

$(a, b)$ とする

$$\frac{\partial}{\partial a} \sum e_i^2 = 0, \quad \frac{\partial}{\partial b} \sum e_i^2 = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \sum e_i^2 = 2 \sum (y_i - \underline{a} - b x_i) \cdot (-1) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial b} \sum e_i^2 = 2 \sum (y_i - a - \underline{b x_i}) \cdot (-x_i) = 0$$

$$\sum y_i - \sum a - b\sum x_i = 0$$

$$\sum x_i y_i - \sum a x_i - b\sum x_i^2 = 0$$

$$\frac{1}{n}\sum x_i = \cancel{n}\bar{x} \quad , \frac{1}{n}\sum y_i = \bar{y} \qquad \sum a = na$$

$$\sum x_i = n\bar{x} \qquad \sum y_i = n\bar{y}$$

---

$$n\bar{y} - na - \cancel{bn\bar{x}} = 0$$

$$\therefore \bar{y} - a - b\cancel{n}\bar{x} = 0 \qquad b = \boxed{\frac{\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{n\bar{x}^2 - \sum x_i^2}}$$

$$\bar{y} - a - b\bar{x} = 0$$

$$\underline{a = \bar{y} - b\bar{x}}$$

$$\sum x_i y_i - \sum(\bar{y} - b\bar{x})x_i - b\sum x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - \sum \bar{y}x_i - b\sum \bar{x}x_i - b\sum x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - \sum \bar{y}x_i - b\left(\sum \bar{x}x_i - \sum x_i^2\right) = 0$$

$$b\left(\sum \bar{x}x_i - \sum x_i^2\right) = \sum x_i y_i - \sum \bar{y}$$

$$b = \frac{\sum x_i y_i - \sum x_i \bar{y}}{\sum \bar{x}x_i - \sum x_i^2}$$

$$n\bar{x}\bar{y}$$

$$\frac{\sum x_i y_i - \cancel{\sum x_i \bar{y}}}{n\bar{x}\,\bar{x} - \sum x_i^2}$$

# Regression Model

データ

$\underset{\sim\sim\sim}{y_i = \alpha + \beta x_i + e_i}$

但, $i = 1, 2, \cdots, n$

$e_i = y_i - \alpha - \beta x_i$

$S = \sum e_i^2 = \sum (y_i - \alpha - \beta x_i)$ $\quad \sum_{i=1}^{n}$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial a} S = \sum (y_i - \sum \alpha - \sum \beta x_i) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial b} S = \sum (y_i - \sum \alpha - \sum \beta x_i) = 0 \end{cases}$$

$\frac{\partial}{\partial a} (\sum y_i - \sum \alpha - \sum \beta x_i)^2 = 0$

$\frac{\partial}{\partial b} (\sum y_i - \sum \alpha - \sum \beta x_i)^2 =$

$2 (\sum y_i - \sum a - \sum b x_i) \cdot (-1) = 0$

$\sum y_i - \sum a - \sum b x_i = 0$

(ここで $\frac{1}{n} \sum y_i = \bar{y}$ , $\frac{1}{n} \sum x_i = \bar{x}$

$\sum y_i = n\bar{y}$ , $\sum x_i n\bar{x}$ )

⇒ ⟨i⟩ → $n\bar{y} - na - b n\bar{x} = 0$

$\bar{y} - a - b\bar{x} = 0$

$\underset{\sim\sim\sim}{a = \bar{y} - b\bar{x}}$

$$\cancel{2}\sum (y_i-\alpha-\beta x_i)\cdot(+x_i)=0$$

$$\Rightarrow \sum x_i y_i - \sum \alpha x_i - \sum \beta x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - a n\bar{x} - b\sum x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - b\sum x_i^2 - (\bar{y}-b\bar{x})n\bar{x} = 0$$

$$\sum x_i y_i - b\sum x_i^2 - n\bar{x}\bar{y} + bn\bar{x}^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y} = b(\sum x_i^2 - n\bar{x}^2)$$

$$\cancel{\frac{1}{n}}\quad b = \frac{\frac{1}{n}\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\frac{1}{n}(\sum x_i^2 - n\bar{x}^2)} \qquad \boxed{\frac{\frac{1}{n}(\sum x_i y_i - \bar{x}\bar{y})}{(\frac{\sum}{n} x_i^2 - \bar{x}^2) = x_i\text{の分散}}}$$

---

$$R^2 = \underline{1 - S} = \left(\frac{\sum (x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum(x_i-\bar{x})^2}\sqrt{\sum(y_i-\bar{y})^2}}\right)^2$$

$$S = \frac{\sum \hat{e}^2}{\sum y-\bar{y}}$$

$$= \frac{\sum(y_i-\alpha-\beta x_i)^2}{\sum(y_i-\bar{y})} \quad \#$$

$$=$$

$\cancel{na - nb}$

$$na - nb\bar{x} - n\bar{y} = 0$$

$$\begin{cases} na + nb\bar{x} = n\bar{y} \\ na\bar{x} + b\sum x_i^2 = \sum x_i y_i \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} n & +n\bar{x} \\ n\bar{x} & +\sum x_i^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$

左辺のdet

$+$ $+$

$$n\sum x_i^2 - (n\bar{x})^2 = \underline{n}^2 \times \left(\sum x_i^2 - \bar{x}^2\right) \neq 0.$$

$V$ $\neq 0$ $\sum x_i^2 > \bar{x}^2$

逆行列がある = 分散がある ということ

☆ $$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$

もとの回帰モデルは

$$\begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum (\alpha + \beta x_i + e_i) \\ \sum x_i (\alpha + \beta x_i + e_i) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n\alpha + \beta \sum x_i + \sum e_i \\ \alpha \sum x_i + \beta \sum x_i^2 + \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n\alpha + \beta \sum x_i \\ \alpha \sum x_i + \beta \sum x_i^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i + & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum e_i \\ \sum x_i e_i \end{pmatrix}$$

---

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \Big\{ \qquad \Big\}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \Sigma x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \Sigma x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \Sigma x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \Sigma e_i \\ \Sigma x_i e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \Sigma x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \Sigma e_i \\ \Sigma x_i e_i \end{pmatrix}$$

ここで

$$\begin{pmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \Sigma x_i^2 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{n\Sigma x_i^2 - (n\bar{x})^2} \begin{pmatrix} \Sigma x_i^2 & -n\bar{x} \\ -n\bar{x} & n \end{pmatrix}$$

//

# Multiple Regression Model

添え字の②つに注意.

$$y_i = \alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + e_i \quad . \ i = 1, 2, \cdots, n$$

$$E[e_i] = 0, \quad V[e_i] = \sigma^2, \quad \mathrm{cov}[e_i e_j] = 0$$

$(i \neq j)$

$\forall = i$

---

$$S(\alpha, \beta, \gamma) = \sum e_i^2$$

$$= \sum (y_i - \alpha - \beta x_{i1} - \gamma x_{i2})^2$$

$(\alpha, \beta, \gamma) \to (a, b, c)$

$$\frac{\partial}{\partial a} S(\alpha, \beta, \gamma) = \cancel{2}\sum(y_i - a - b x_{i1} - c x_{i2}) \cdot (-1) \qquad = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial b} S(\alpha, \beta, \gamma) = \cancel{2}\sum(y_i - a - b x_{i1} - c x_{i2}) \cdot (- x_{i1}) \qquad = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial c} S(\alpha, \beta, \gamma) = \cancel{2}\sum(y_i - a - b x_{i1} - c x_{i2}) (- x_{i2}) \qquad = 0$$

---

$$\sum y_i - \overset{na}{\sum a} - \sum b x_{i1} - \sum c x_{i2} = 0$$

$\cancel{\sum x_i y_i - \sum a - \sum b}$

$$\sum x_{i1} y_i - \underset{a \sum x_{i1}}{\underline{n a x_{i1}}} - \sum b x_{i1}^2 - c \sum x_{i1} x_{i2} = 0$$

$$\sum x_{i2} y_i - \underset{a \sum x_{i2}}{\underline{n a x_{i2}}} - \sum b x_{i1} x_{i2} - c \sum x_{i2}^2 = 0$$

コ%

ミス
ミス多め

$$na + b\sum x_{i1} + c\sum x_{i2} = \sum y_i$$

$$\cancel{\sum x_{i1} y_i - a\sum x_{i1}}$$

$$a\sum x_{i1} + b\sum x_{i1}^2 + c\sum x_{i1}x_{i2} = \sum x_{i1} y_i$$

$$a\sum x_{i2} + b\sum x_{i1}x_{i2} + c\sum x_{i2}^2 = \sum x_{i2} y_i$$

---

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_{i1} & \sum x_{i2} \\ \sum x_{i1} & \sum x_{i1}^2 & \sum x_{i1}x_{i2} \\ \sum x_{i2} & \sum x_{i1}x_{i2} & \sum x_{i2}^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{i1} y_i \\ \sum x_{i2} y_i \end{pmatrix}$$

---

a、b、c を求めるということは 逆(n …)が あるってことね

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_{i1} & \sum x_{i2} \\ \sum x_{i1} & \sum x_{i1}^2 & \sum x_{i1}x_{i2} \\ \sum x_{i2} & \sum x_{i1}x_{i2} & \sum x_{i2}^2 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} \ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum - \\ \\ \end{pmatrix}$$

---

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \sum x_{i1} & \sum x_{i2} \\ \sum x_{i1} & \sum x_{i1}^2 & \sum x_{i1}x_{i2} \\ \sum x_{i2} & \sum x_{i1}x_{i2} & \sum x_{i2}^2 \end{pmatrix}^{-1}\boxed{\begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{i1} y_i \\ \sum x_{i2} y_i \end{pmatrix}}$$

$y_i = \alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + e_i$

ここで

$$\begin{pmatrix} \Sigma y_i \\ \Sigma x_{i1} y_i \\ \Sigma x_{i2} y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma(\alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + e_i) \\ \Sigma x_{i1}(\alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + e_i) \\ \Sigma x_{i2}(\alpha + \beta x_{i1} + \gamma x_{i2} + e_i) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n\alpha + \beta \Sigma x_{i1} + \gamma \Sigma x_{i2} + \Sigma e_i \\ \alpha \Sigma x_{i1} + \beta \Sigma x_{i1}^2 + \gamma \Sigma x_{i1} x_{i2} + \Sigma x_{i1} e_i \\ \alpha \Sigma x_{i2} + \beta \Sigma x_{i1} x_{i2} + \gamma \Sigma x_{i2}^2 + \Sigma x_{i2} e_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i2} \\ \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i1}^2 & \Sigma x_{i1} x_{i2} \\ \Sigma x_{i2} & \Sigma x_{i1} x_{i2} & \Sigma x_{i2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Sigma e_i \\ \Sigma x_{i1} e_i \\ \Sigma x_{i2} e_i \end{pmatrix}$$

---

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n & \Sigma_{i1} & \Sigma x_{i2} \\ \Sigma x_{i1} & \Sigma x_{i1}^2 & \Sigma x_{i1} x_{i2} \\ \Sigma x_{i2} & \Sigma x_{i1} x_{i2} & \Sigma x_{i2}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \Sigma e_i \\ \Sigma x_{i1} e_i \\ \Sigma x_{i2} e_i \end{pmatrix}$$

//

## d-varible, matrix representation

regression model → varible = d

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_d x_{id} + e_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

---

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nd} \end{pmatrix},$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_d \end{pmatrix}, \quad e = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

---

$$y = X\beta + e, \quad E[e] = 0, \quad V[e] = \sigma^2 \times I_n$$

単位行列

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

n: 次元 単位行列

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = e^T e$$

$y = \beta X + e$

$e = y - \beta X$

$$= (y - \beta X)^T (y - \beta X)$$

$$= (y^T - \beta^T X^T)(y - \beta X)$$

$$= y^T y - \cancel{\beta^T X^T y} -$$

$= y \beta^T X^T$

$$= y^T y \underbrace{- y^T \beta X - \beta^T X^T y} + \beta^T X^T \cdot \beta X$$

$$= y^T y - 2 y \beta^T X^T + \beta^T X^T \cdot \beta X$$

ここで $\frac{\partial}{\partial \beta} = 0$ とする

aは定数ベクトル
Aは定数の対称行列

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} x^T \underline{a} = \underline{a}, \\ \frac{\partial}{\partial x} x^T \underline{Ax} = \underline{2Ax} \end{cases}$$

2次元で確認する

$$\frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} (ax+by) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(ax+by) \\ \frac{\partial}{\partial y}(ax+by) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

---

$$\frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}} (ax^2+2bxy+dy^2)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(ax^2+2bxy+dy^2) \\ \frac{\partial}{\partial y}(ax^2+2bxy+dy^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2ax+2by \\ 2bx+2dy \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

---

これを使って $S$ を微分する

$$\frac{\partial}{\partial \beta} S(\beta) = -2X^T y + 2X^T X \beta$$

これが0になる $\beta$ を $b$ とする

$$-2X^T y + 2X^T X b = 0$$

$$X^T X b = X^T y$$

よって、$X^TX$ が正則で逆行列をもてば

$$b = (X^TX)^{-1}X^Ty$$

---

自由度調整済み決定係数

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1' + e \quad ―①$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + e' \quad ―②$$

---

② $d$ 変数のとき。$d$↑ 程、多くなる。決定係数は必ず大きくなる。

---

最適化をすると、残差平方和は必ず の②の方が ~~[illegible]~~ 小さくなる。

$\boxed{\beta_2 = 0}$ という制約をつけて残差平方和を最小にすることと等しい。

---

制約をつけ最小化されたものと制約無しで最小化したものなら → 制約無しで最小化するほうが小さくなる。

---

①は②より小さくなれない。→ 重回帰分析では決定係数は使えない。→ 変数の数を考慮した自由度調整済み決定係数 $\bar{R}^2$ を使う。

$$\bar{R}^2 = 1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-d-1}$$

---

$$1 - (1 - R^2) \times \frac{(n-1)}{(n-1) - d}$$

dは変数の数

---

係数の確率分布　　b が決定できるとすると

$$y = X\beta + e$$

$$b = (X^TX)^{-1}X^T(X\beta + e)$$

---

$$= \underbrace{(X^TX)^{-1}X^TX}_{1}\beta + (X^TX)^{-1}X^Te$$

$$= \beta + (X^TX)^{-1}X^Te$$

これから平均ベクトル・分散共分散行列を計算する

$$E[AX] = AE[X], \quad V[AX] = AV(X)A^T$$

---

$$E[b] = \beta + E[(X^TX)^{-1}X^Te] = \beta + (X^TX)^{-1}X^TE(e) = \beta$$

$$V(b) = V((X^TX)^{-1}X^Te) = (X^TX)^{-1}X^TV(e)((X^TX)^{-1}X^T)^T$$

$$= (X^TX)^{-1}X^TV(e)X(X^TX)^{-1} = (X^TX)^{-1}X^T(\sigma^2 I_n)X(X^TX)^{-1}$$

$$= \sigma^2(X^TX)^{-1}X^TX(X^TX)^{-1} = \sigma^2(X^TX)^{-1}$$

$E[b]=\beta$, $V(b)=\sigma^2(X^TX)^{-1}$

$\varepsilon$ が多次元正規分布に従う

$$e \sim N(0, \sigma^2 I_n)$$

$b$も多次元正規分布に従う

$$b \sim N(\beta, \sigma^2(X^TX)^{-1})$$

---

Multiple Regression Analysis Test

---

$H_0: \beta_i = 0$, $H_1: \beta_1 \neq 0$

(単回帰分析同様 t検定 or

仮説に応じて 複数の係数が関わっている

$\Downarrow$

$\boxed{\text{F検定}}$

$\boxed{H_0: \beta_1 = \cdots = \beta_d = 0, \quad H_1: H_0\text{でない}}$

これは定数以外の説明変数はどれもyと関係がなく回帰に使えないという仮説を表す。

---

$H_1$のもとでの残差平方和に比べ、$H_0$を仮定したとき、残差平方和が非常に大きくなれば、$H_0$は正しくない。

---

定数以外ひとつも説明変数に使わないと残差が非常に大きくなる、ということは ~~[illegible]~~ 説明変数に意味があるものが少なくとも1つはあるということ。

H₀を仮定 → $R_0^2$，仮定していないとき $R_1^2$

F統計量で

$$F = \frac{R_0^2}{R_1^2}$$

$$\boxed{F = \frac{(R_0^2 - R_1^2)/d}{R_1^2/(n-d-1)}}$$

H₀が正しいなら $F \sim F(d, n-d-1)$

Fが大きな正の数 → $R_0^2 > R_1^2$ より大.

（残差が増えすぎている）

Fが充分大きな値をとれば H₀を棄却すればいい。

---

$(X^T X)^{-1}$が存在しないとき ― Xの列ベクトル

各要素ごとのデータのベクトルが1次従属になっている

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} \\ \vdots \\ x_{n1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{12} \\ \vdots \\ x_{n2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{13} \\ \vdots \\ x_{n3} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} x_{1d} \\ \vdots \\ x_{nd} \end{pmatrix}$$

ある列のベクトルが他の列ベクトルで書けてしまうとき

○ 多重共線性があるときへ対処

---

余計なデータの係数は0になるよう工夫すればよい。

↓

これを **正則化** という

もともと

$$\min_{\beta_0,\cdots,\beta_d} S(\beta_0,\cdots,\beta_d)$$

↓

それを修正し

$$\min_{\beta_0,\cdots,\beta_d}\left[S(\beta_0,\cdots,\beta_d)+\left(\begin{array}{c}|\beta_0|,\cdots,|\beta_d|\text{が大きくなるほど}\\ \text{値が大きくなる項.}\end{array}\right)\right]$$

これを正則化項という.

全体の最小化のためには この部分が小さければ小さい程よい。

↓

$|\beta_0|,\cdots,|\beta_d|$ たちはできる限り0に近い値であるほうが好ましい。

最適解では余計な変数の係数のように
$S(\beta_0, \cdots, \beta_d)$を小さくするのに役立たないような係数は
0か0に近い値のはず.

↓

余計な変数の係数を小さくして(消して)する

↓

---

Lasso回帰 (1次)

絶対値の和 ×λ

$$\min_{\beta_0,\cdots,\beta_d}\left[S(\beta_0, \cdots, \beta_d) + \boxed{\lambda \sum_{j=0}^{d} |\beta_j|}\right]$$

λ>0

---

&

Ridge回帰 (2次)

2乗の和 ×λ

$$\min_{\beta_0,\cdots,\beta_d}\left[S(\beta_0, \cdots, \beta_d) + \lambda \sum_{j=0}^{d} |\beta_j|^2\right]$$

---

L 1次
N
O
P
Q
R 2次
S
T
U
V
W
X
Y
Z

# Qualitative variable Logistic Regression

被説明変数が $0<\pi<1$ のときは

両辺が同じ範囲の数をとらないので

上記の regression model は使えない

そこで 質的回帰分析

$\pi = \alpha + \beta x$ ×

↓

これを使う方法は2通り

左辺を $-\infty \sim \infty$ とするか

右辺を $0 \sim 1$ の値に変換する

## ① Logistic Regression Model

$$\boxed{\log \frac{\pi}{1-\pi}} = \alpha + \beta x$$

これは $\pi = \dfrac{\exp(\alpha+\beta x)}{1+\exp(\alpha+\beta x)} = \dfrac{1}{\exp\{-(\alpha+\beta x)\}+1}$

○ 具体的には、$\alpha, \beta$の推定はLSDではなく最尤法で行う

尤度関数　$y_1, \dots y_n$が得られた確率

$P(y_i=1)=\pi_i$, $P(y_i=0)=1-\pi_i$

とする

---

$$L(\alpha,\beta)=\prod_{i=1}^{n}\pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i}$$

---

$i=1$なら

$$\pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i}=\pi_i^{1}(1-\pi_i)^{0}=\pi_i$$

$i=0$なら

$$\pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i}=\pi_i^{0}(1-\pi_i)^{1}=1-\pi_i$$

---

尤度関数は、これらの積。

$L(\alpha,\beta)$が尤度関数。

最尤法では対数尤度を最大化する。

$$l(\alpha,\beta)=\log L(\alpha,\beta)=\log\left(\prod_{i=1}^{n}\pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i}\right)$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\log\left(\pi_i^{y_i}(1-\pi_i)^{1-y_i}\right)$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\left\{\log(\pi_i^{y_i})+\log(1-\pi_i)^{1-y_i}\right\}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i\log(\pi_i)+(1-y_i)\log(1-\pi_i)\right\}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i[\log(\pi_i)-\log(1-\pi_i)]+\log(1-\pi_i)\right\}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i\log\frac{\pi_i}{1-\pi}+\log(1-\pi_i)\right\}$$

これに

$$\log\frac{\pi_i}{1-\pi_i}=\alpha+\beta x_i$$

$$1-\pi_i=1-\frac{\exp(\alpha+\beta x_i)}{1+\exp(\alpha+\beta x_i)}=\frac{1}{1+\exp(\alpha+\beta x_i)}$$

を代入。

$$l(\alpha,\beta)=\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i(\alpha+\beta x_i)-\log(1+\exp(\alpha+\beta x_i))\right\}$$

$\alpha,\beta$を最大化する$\hat{\alpha},\hat{\beta}$を求めると

$$\hat{\pi}=\frac{\exp(\hat{\alpha}+\hat{\beta}x_i)}{1+\exp(\hat{\alpha}+\hat{\beta}x)}$$

# プロビット Model

probit Model

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt.$$

$$\pi = \Phi(\alpha + \beta x)$$ とするもの.

---

係数の推定の最尤法 . 合1 . 不合0
$y_1, \cdots, y_n$ の p は

$$L(\alpha, \beta) = \prod_{i=1}^{n} \pi_i^{y_i} (1-\pi_i)^{1-y_i}$$

対数尤度も .

$$l(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{n} \{y_i \log(\pi_i) + (1-y_i) \log(1-\pi_i)\}$$

これに

$$\pi_i = \Phi(\alpha + \beta x_i), \quad 1-\pi_i = 1-\Phi(\alpha+\beta x_i)$$

を代入する

$$l(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{n} \{y_i \log(\Phi(\alpha+\beta x_i)) + (1-y_i) \log(1-\Phi(\alpha+\beta x_i))\}$$

この対数尤度関数を最大にする $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ を見つける。

$$\hat{\pi} = \Phi(\hat{\alpha} + \hat{\beta} x)$$

//