統計解析論　第3回

最小二乗法の統計学

1．問題設定（1）

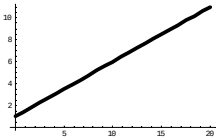
- 係数推定量の信頼性を知る
  - 係数推定量のばらつきの評価（標準誤差）
    - そのための仮定（データのなりたちについて想定）

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \text{撹乱項（誤差項）}$$

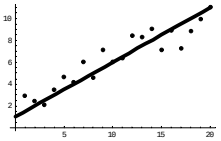
      - 撹乱項ε_iに確率的仮定をする
        - » 平均0，分散σ^2（一定）でiが違うと独立
          （つまり，i毎にサイコロをふって撹乱項の値がきまる）
        - » σ^2　や，α，βは我々には分からないが，確かにあるとする．（真のパラメータと呼ぶ）
    - パラメータの推定とそのばらつき＝分散の評価

データの成り立ちについての想定

- データの成り立ち
  - 回帰直線を想定

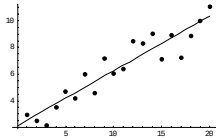


  - 回帰直線＋確率的に決まる誤差

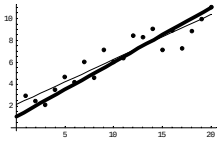


推定誤差

- 最小二乗法による推定



- データの成り立ちの回帰直線と推定された回帰直線の比較



2．問題設定（2）

- 回帰自身に意味があるかの検討
  - R^2の統計的性質はあまり明確ではない
  - 統計的な意味づけをもった指標
  - F統計量

3．残差分散

- 回帰直線からの乖離の程度を測る
  - 残差分散

$$S^2 = \frac{RSS}{\text{標本数} - \text{説明変数の数（定数項含む）}} = \frac{RSS}{n-K}$$

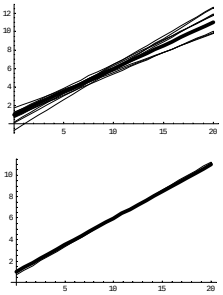
    - この値が回帰直線 $y_i = \alpha + \beta x_i$ からの乖離＝撹乱項 ε_i の分散σ^2 の一つの推定量となる．
    - 不偏推定量
      - この推定量 S^2の確率的期待値が実はσ^2　　（∗）

不偏性(0)

- 不偏性
  - 推定値と真の値との間に何か関係があるか？
    - 推定値の期待値が真の値になるという性質
    - 推定値が平均的には真の値になっている．

不偏性(1)

- 実験
  - 撹乱項を10セット用意．
  - これを元に説明変数と被説明変数の組み合わせを10セット用意．
  - この10セットそれぞれについて最小二乗法でパラメータを推定
  - 上図
    - 太線：真の回帰直線，細線：推定された回帰直線群
  - 下図
    - 細線：推定された回帰直線の平均
    - 真の回帰直線とほとんど同じである．



4．標準化残差による回帰のチェック

- 残差標準偏差 $S=\sqrt{\frac{RSS}{n-K}}$
- 標準化残差 $\frac{\hat{u}_i}{S}$
  - 残差を残差の標準偏差で割るのでその標本分散は1である．この絶対値が2以上になる確率は少ない．(チェビシェフの不等式)
  - 2以上があまりに多い(標本数の5%よりかない多い)，2．5以上の値がある(標本数の1%よりかなり多い)場合決定係数がいくら大きくてもさらなるチェックが必要
  - S^2はそのままでは残差の分散とならない．(教科書参照)従って，標準化残差によるチェックはおおまかなもの．

5．回帰分散と残差分散

- 回帰分散 $\frac{ESS}{K-1}$
  - 回帰係数推定値の変動(推定誤差)による予測値 $\hat{\alpha}+\hat{\beta}x_i$ の変動の指標
  - もし，$\beta=0$ で撹乱項が正規分布なら $\frac{ESS}{\sigma}$ は自由度K-1のカイ二乗分布に従って変動する (∗)
- 残差分散 $\frac{RSS}{n-K}$
  - $\frac{RSS}{\sigma}$ は自由度 $n-K$のカイ二乗分布に従って変動する (∗)
  - 残差分散と回帰分散は独立に変動する

6．F統計量による回帰のチェック

- F統計量＝回帰分散／残差分散
- F統計量は $\beta=0$ のとき，分子自由度K－1，分母自由度n－KのF分布に従う(正規分布の仮定に依存) (∗)
- $\beta=0$のチェックに使用できる．(検定参照)
- こちらのほうが決定係数より統計学的根拠をもつ
- 大きいと回帰変数の一部または全部が意味をもち，小さいと回帰は意味を持たない．

7．係数値の信頼性

- 標準誤差(係数推定値の)
  - 係数推定値の変動の指標
    - 係数値の真の値からの隔たりの標準偏差を推定(∗)

$$\hat{\beta}:s.e.(\hat{\beta})=\frac{S}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}}\qquad \hat{\alpha}:s.e.(\hat{\alpha})=S\sqrt{\frac{1}{n}+\frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}}$$

    - 大きいほど最小二乗法による推定値は当てにならない．小さいほど信頼できる．
  - 信頼区間が計算される(∗)

8．t統計量

- t統計量
  - 理論，仮説が示す値を検証するためのツール
  - 理論や仮説で与えられている値を α, β とする
  - βのt統計量 $t_{\hat{\alpha}} = \dfrac{\hat{\beta}-\beta}{s.e.(\hat{\beta})} = \dfrac{\hat{\beta}-\beta}{\dfrac{S}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}}}$
    - この値は自由度 $n-K$ のt分布に従って変動する （∗）
      - これは標本数が大きいと標準正規分布（平均0，分散1）とほぼ同じ分布
      - この絶対値が大きい（目安としては1.96以上，検定で述べる）と理論，仮説ははずれている可能性が高いか，回帰式が不適切かのいずれかである

続き

- αに関するt統計量（自由度n-Kのt分布）

$$t_{\hat{\alpha}} = \frac{\hat{\alpha}-\alpha}{s.e.(\hat{\alpha})} = \frac{\hat{\alpha}-\alpha}{S\sqrt{\frac{1}{n}+\frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}}}$$

- 通常出力されるのは，$\alpha = 0$ ，$\beta = 0$ としたときのt統計量
  - Excel出力を変換すれば任意のα，βに対してt統計量が計算できる

9．なぜ最小二乗法を使うのか

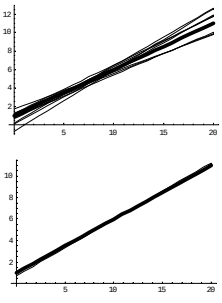
- 二つの望ましい性質
  - 不偏性
  - 一致性
- 最小二乗推定量はこの両方の性質を持つ

9．1　不偏性（0）

- 望ましい性質（1）＝不偏性
  - 推定値と真の値との間に何か関係があるか？
    - 推定値の期待値が真の値になるという性質
    - 推定値が平均的には真の値になっている．
  - 最小二乗推定量は不偏である．
    $E[\beta_1] = \beta_1, \cdots, E[\beta_K] = \beta_K$

9．2　不偏性（1）

- 実験
  - 撹乱項を10セット用意．
  - これを元に説明変数と被説明変数の組み合わせを10セット用意．
  - この10セットそれぞれについて最小二乗法でパラメータを推定
  - 上図
    - 太線：真の回帰直線，細線：推定された回帰直線群
  - 下図
    - 細線：推定された回帰直線の平均
    - 真の回帰直線とほとんど同じである．



9．2　一致性（0）

- 不偏性で十分か？
  - 半々の確率で1と-1の値をとる確率変数の期待値は0
    - 推定値の期待値が真の値と等しくても推定値が真の値に近づくという保証はない．（標本数が増えたとき）
  - 「近づく」というのにふさわしい概念が必要．
- 望ましい性質（2）＝一致性
  - 標本数が増えると推定誤差がどんどん小さくなる．
    - 推定誤差は確率変動するから小さくなるというのをうまく表現しなければならない．
  - 標本数が増えると「推定誤差の2乗の期待値」＝平均二乗誤差が0に近づく．平均二乗誤差の極限が0．

9．2 一致性(1)

- 実験
  - 同じデータの成り立ちの場合についてデータ数が増加したときの推定された回帰直線を比較
  - 上図
    - 標本数20の場合の推定された回帰直線群(細線)と真の回帰直線群(太線)
  - 下図
    - 標本数1000の場合
    - 太線と細線がほぼ一致