3.3.1 重回帰モデルにおける回帰係数の意味

結論： 他の変数の影響を取り除いての被説明変数への影響を表す。

$k=2$ の単純なモデル：

$$Y_i = \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + u_i, \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

ある基準の下で，β_1, β_2 の解を $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$ とする。

最小二乗法によって，

$$\min_{\hat{\beta}_1,\, \hat{\beta}_2} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i} - \hat{\beta}_2 X_{2i})^2$$

を解く。

$\hat\beta_1, \hat\beta_2$ について微分して，それぞれゼロとおく。

すなわち，

$$-2\sum_{i=1}^{n} X_{1i}(Y_i - \hat\beta_1 X_{1i} - \hat\beta_2 X_{2i}) = 0 \quad\longrightarrow\quad \sum_{i=1}^{n} X_{1i}Y_i = \hat\beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_{1i}^2 + \hat\beta_2 \sum_{i=1}^{n} X_{1i}X_{2i}$$
$$-2\sum_{i=1}^{n} X_{2i}(Y_i - \hat\beta_1 X_{1i} - \hat\beta_2 X_{2i}) = 0 \quad\longrightarrow\quad \sum_{i=1}^{n} X_{2i}Y_i = \hat\beta_1 \sum_{i=1}^{n} X_{2i}X_{1i} + \hat\beta_2 \sum_{i=1}^{n} X_{2i}^2$$

行列表示で，

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_{1i}Y_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_{2i}Y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_{1i}^2 & \sum_{i=1}^{n} X_{1i}X_{2i} \\ \sum_{i=1}^{n} X_{2i}X_{1i} & \sum_{i=1}^{n} X_{2i}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat\beta_1 \\ \hat\beta_2 \end{pmatrix}$$

となり，$\hat{\beta}_1$，$\hat{\beta}_2$ は次のように得られる。

$$\begin{pmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum X_{1i}^2 & \sum X_{1i}X_{2i} \\ \sum X_{1i}X_{2i} & \sum X_{2i}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum X_{1i}Y_i \\ \sum X_{2i}Y_i \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{(\sum X_{1i}^2)(\sum X_{2i}^2) - (\sum X_{1i}X_{2i})^2} \begin{pmatrix} \sum X_{2i}^2 & -\sum X_{1i}X_{2i} \\ -\sum X_{1i}X_{2i} & \sum X_{1i}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum X_{1i}Y \\ \sum X_{2i}Y \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \dfrac{(\sum X_{2i}^2)(\sum X_{1i}Y_i) - (\sum X_{1i}X_{2i})(\sum X_{2i}Y_i)}{(\sum X_{1i}^2)(\sum X_{2i}^2) - (\sum X_{1i}X_{2i})^2} \\ \\ \dfrac{-(\sum X_{1i}X_{2i})(\sum X_{1i}Y_i) + (\sum X_{1i}^2)(\sum X_{2i}Y_i)}{(\sum X_{1i}^2)(\sum X_{2i}^2) - (\sum X_{1i}X_{2i})^2} \end{pmatrix}$$

2 つ目の等式では，2×2 の逆行列の公式が用いられている。

(*) 復習：

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

また，$\sum_{i=1}^{n} X_{ji}X_{li}$**，**$\sum_{i=1}^{n} X_{ji}Y_i$ **をそれぞれ** $\sum X_{ji}X_{li}$**，**$\sum X_{ji}Y_i$ **と表記する。**

ただし，$j = 1, 2$**，**$l = 1, 2$ **とする。**

一方，次の 2 つの回帰式を考える。

$$Y_i = \alpha_1 X_{2i} + v_i$$

$$X_{1i} = \alpha_2 X_{2i} + w_i$$

α_1，α_2 の最小二乗推定量を求める。

$$\min_{\hat{\alpha}_1} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{\alpha}_1 X_{2i})^2 \quad \longrightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n} X_{2i}(Y_i - \hat{\alpha}_1 X_{2i}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \sum_{i=1}^{n} X_{2i} Y_i = \hat{\alpha}_1 \sum_{i=1}^{n} X_{2i}^2$$
$$\min_{\hat{\alpha}_2} \sum_{i=1}^{n} (X_{1i} - \hat{\alpha}_2 X_{2i})^2 \quad \longrightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n} X_{2i}(X_{1i} - \hat{\alpha}_2 X_{2i}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \sum_{i=1}^{n} X_{2i} X_{1i} = \hat{\alpha}_2 \sum_{i=1}^{n} X_{2i}^2$$

を解いて，最小二乗推定量 $\hat{\alpha}_1$，$\hat{\alpha}_2$ をそれぞれ求めると，

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{\sum X_{2i} Y_i}{\sum X_{2i}^2}, \qquad \hat{\alpha}_2 = \frac{\sum X_{2i} X_{1i}}{\sum X_{2i}^2}$$

となる。

$\hat{\alpha}_1$，$\hat{\alpha}_2$ を用いて，v_i，w_i の残差 $\hat{v}_i$，$\hat{w}_i$ を下記のようにそれぞれ求める。

$$\hat{v}_i = Y_i - \hat{\alpha}_1 X_{2i}, \qquad \hat{w}_i = X_{1i} - \hat{\alpha}_2 X_{2i}$$

$\hat{v}_i$，$\hat{w}_i$ は Y_i，X_{1i} から X_{2i} の影響を取り除いたものと解釈できる。

更に，次の回帰式を考える。

$$\hat{v}_i = \gamma \hat{w}_i + \epsilon_i$$

γ の最小二乗推定量 $\hat{\gamma}$ は $\hat{\beta}_1$ に一致することを示す。

$$\min_{\hat{\gamma}} \sum_{i=1}^{n} (\hat{v}_i - \gamma \hat{w}_i)^2$$

を解くと，

$$\hat{\gamma} = \frac{\sum \hat{w}_i \hat{v}_i}{\sum \hat{w}_i^2}$$

となり，変形していくと，

$$\begin{aligned}
\hat{\gamma} = \frac{\sum \hat{w}_i \hat{v}_i}{\sum \hat{w}_i^2} &= \frac{\sum (X_{1i} - \hat{\alpha}_2 X_{2i})(Y_i - \hat{\alpha}_1 X_{2i})}{\sum (X_{1i} - \hat{\alpha}_2 X_{2i})^2} \\
&= \frac{\sum X_{1i} Y_i - \hat{\alpha}_1 \sum X_{1i} X_{2i} - \hat{\alpha}_2 \sum X_{2i} Y_i + \hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 \sum X_{2i}^2}{\sum X_{1i}^2 - 2\hat{\alpha}_2 \sum X_{1i} X_{2i} + \hat{\alpha}_2^2 \sum X_{2i}^2}
\end{aligned}$$

$$
= \frac{\sum X_{1i}Y_i - \dfrac{(\sum X_{2i}Y_i)(\sum X_{1i}X_{2i})}{\sum X_{2i}^2}}{\sum X_{1i}^2 - \dfrac{(\sum X_{1i}X_{2i})^2}{\sum X_{2i}^2}}
$$

$$
= \frac{(\sum X_{2i}^2)(\sum X_{1i}Y_i) - (\sum X_{1i}X_{2i})(\sum X_{2i}Y_i)}{(\sum X_{1i}^2)(\sum X_{2i}^2) - (\sum X_{1i}X_{2i})^2} = \hat{\beta}_1,
$$

となる。

すなわち,「Y_i から X_{2i} の影響を取り除いた変数」を被説明変数,「X_{1i} から X_{2i} の影響を取り除いた変数」を説明変数とした回帰係数が β_1 に等しい。

一般化： 次の回帰モデルを考える。

$$
Y_i = \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \cdots + \beta_k X_{ki}
$$

j 番目の回帰係数 β_j の意味は，「Y_i から $X_{1i}, \cdots, X_{j-1,i}, X_{j+1,i}, \cdots, X_{ki}$ (すなわち，X_{ji} 以外の説明変数) の影響を取り除いた変数」を被説明変数，「X_{ji} から $X_{1i}, \cdots, X_{j-1,i}, X_{j+1,i}, \cdots, X_{ki}$ (すなわち，X_{ji} 以外の説明変数) の影響を取り除いた変数」を説明変数とした回帰係数となる。

3.3.2　決定係数 R^2 と自由度修正済み決定係数 $\overline{R}^2$ について

また，決定係数 R^2 についても同様に表される。

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \overline{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \overline{Y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \hat{u}_i^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \overline{Y})^2}$$

ただし，$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_1 X_{1i} + \hat{\beta}_2 X_{2i} + \cdots + \hat{\beta}_k X_{ki}$，$Y_i = \hat{Y}_i + \hat{u}_i$ である。

R^2 は，説明変数を増やすことによって，必ず大きくなる。なぜなら，説明変数が増えるこ

とによって，$\sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i^2$ が必ず減少するからである。

補足：　簡単化のために，説明変数が 2 つの場合を考える。

最小二乗法とは，

$$Y_i = \hat{\beta}_1 X_{1i} + \hat{\beta}_2 X_{2i} + \hat{u}_i$$

からの残差平方和：

$$S(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i} - \hat{\beta}_2 X_{2i})^2$$

を最小にするような $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$ を求める。

すなわち，下記の最適化問題を解くことになる。

$$\min_{\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2} S(\hat{\beta}_1,\ \hat{\beta}_2)$$

一方，説明変数が 1 つの場合，

$$Y_i = \hat{\beta}_1 X_{1i} + \hat{u}_i$$

からの残差平方和：

$$S_*(\hat{\beta}_1) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{\beta}_1 X_{1i})^2$$

を最小にするような $\hat{\beta}_1$ **を求める。**

$S(\cdot,\cdot)$ と区別するために $S_*(\cdot)$ としている。

$S(\cdot,\cdot)$ と $S_*(\cdot)$ との関係は，

$$S_*(\hat{\beta}_1) = S(\hat{\beta}_1,\ 0)$$

となる（$\hat{\beta}_2 = 0$ という制約が付いていることに注意せよ）。

すなわち，この場合，下記の最適化問題を解くことになる。

$$\min_{\hat{\beta}_1} S_*(\hat{\beta}_1) = \min_{\hat{\beta}_1} S(\hat{\beta}_1,\ 0)$$

したがって，

$$\min_{\hat{\beta}_1,\hat{\beta}_2} S(\hat{\beta}_1,\ \hat{\beta}_2) \leq \min_{\hat{\beta}_1} S(\hat{\beta}_1,\ 0)$$

となる。

このように，R^2 を基準にすると，被説明変数にとって意味のない変数でも，説明変数が多いほど，よりよいモデルということになる。この点を改善するために，自由度修正済み決定係数 $\overline{R}^2$ を用いる。

$$\overline{R}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i^2/(n-k)}{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \overline{Y})^2/(n-1)},$$

$\sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i^2/(n-k)$ は u_i の分散 σ^2 の不偏推定量であり，$\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \overline{Y})^2/(n-1)$ は Y_i の分散の不偏推定量である。分散や不偏推定量の意味は，統計学の知識を必要とし，後述する。

R^2 と $\overline{R}^2$ との関係は，

$$\overline{R}^2 = 1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-k},$$

となる。さらに，

$$\frac{1-\overline{R}^2}{1-R^2} = \frac{n-1}{n-k} \geq 1,$$

という関係から，$\overline{R}^2 \leq R^2$ という結果を得る。($k = 1$ のときのみに，等号が成り立つ。)

数値例：　今までと同じ数値例で，$\overline{R}^2$ を計算する（最新の表を再掲する）。

i	X_i	Y_i	X_i^2	X_iY_i	$\hat{Y}_i$	$\hat{u}_i$	$X_i\hat{u}_i$	$\hat{Y}_i\hat{u}_i$	$\hat{u}_i^2$	Y_i^2
1	**5**	**4**	**25**	**20**	**4.0**	**0.0**	**0.0**	**0.00**	**0.00**	**16**
2	**1**	**1**	**1**	**1**	**1.2**	−0.2	−0.2	−0.24	**0.04**	**1**
3	**3**	**1**	**9**	**3**	**2.6**	−1.6	−4.8	−4.16	**2.56**	**1**
4	**2**	**3**	**4**	**6**	**1.9**	**1.1**	**2.2**	**2.09**	**1.21**	**9**
5	**4**	**4**	**16**	**16**	**3.3**	**0.7**	**2.8**	**2.31**	**0.49**	**16**
合計	$\sum X_i$	$\sum Y_i$	$\sum X_i^2$	$\sum X_iY_i$	$\sum \hat{Y}_i$	$\sum \hat{u}_i$	$\sum X_i\hat{u}_i$	$\sum \hat{Y}_i\hat{u}_i$	$\sum \hat{u}_i^2$	$\sum Y_i^2$
	15	**13**	**55**	**46**	**13**	**0.0**	**0.0**	**0.0**	**4.3**	**43**
平均	$\overline{X}$	$\overline{Y}$								
	3	**2.6**								

$\overline{Y} = 2.6$，$\sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i^2 = 4.3$，$\sum_{i=1}^{n} Y_i^2 = 43$ なので，

$$R^2 = 1 - \frac{\sum \hat{u}_i^2}{\sum Y_i^2 - n\overline{Y}^2} = 1 - \frac{4.3}{43 - 5 \times 2.6^2} = 1 - \frac{4.3}{9.2} = 0.5326$$

となり，$\overline{R}^2$ は，

$$\overline{R}^2 = 1 - \frac{\sum \hat{u}_i^2/(n-k)}{(\sum Y_i^2 - n\overline{Y}^2)/(n-1)} = 1 - \frac{4.3/(5-2)}{9.2/(5-1)} = 0.3768$$

となる。

自由度について：　分子について，残差 $\hat{u}_i$ を求めるためには，$\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \cdots, \hat{\beta}_k$ の k 個の推定値を得なければならない。データ数 n から推定値の数 k を差し引いたものを自由度 (degree of freedom) と呼ぶ。

一方，分母については，X_{1i} が定数項だとして，Y_i が定数項を除く $X_{2i}, X_{3i}, \cdots, X_{ki}$ に依存しない場合を考える。この場合，$\beta_2 = \beta_3 = \cdots = \beta_k = 0$ とするので，$\hat{u}_i = Y_i - \hat{\beta}_1$ となる。$\hat{u}_i$ を得るためには $\hat{\beta}_1$ だけを求めればよい。最小二乗法の考え方に沿って求めれば，$\hat{\beta}_1 = \overline{Y}$ となる（読者は確認すること）。すなわち，自由度は「データ数 − 推定値の数 $= n - 1$」ということになる。

このように，決定係数の第二項目の分子・分母をそれぞれの自由度で割ることによって，自由度修正済み決定係数が得られる。

注意：　R^2 や $\overline{R}^2$ を比較する場合，被説明変数が同じであることが重要である。被説明変数が対数かまたはそのままの値であれば，決定係数・自由度修正済み決定係数の大小比較は意

味をなさない。ただし，被説明変数が異なる場合であっても，被説明変数を上昇率とするかそのままの値を用いるかの比較では，決定係数・自由度修正済み決定係数の大小比較はできないが，誤差項 u_i の標準誤差での比較は可能である (標準誤差の小さいモデルを採用する)。

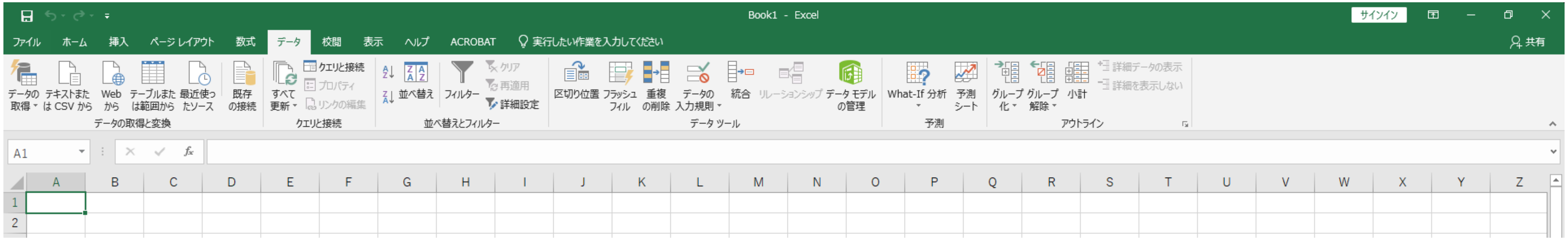
$\Longrightarrow$ **関数型の選択**

3.4　Excel 2019 による回帰分析

回帰分析が出来るように，Excel 2019 をセットアップする。

Excel 2013，Excel 2016 も同様の手順。

まず，エクセルの最初のページで，「データ」タブをマウスでクリックすると，下記の画面が出てくる。

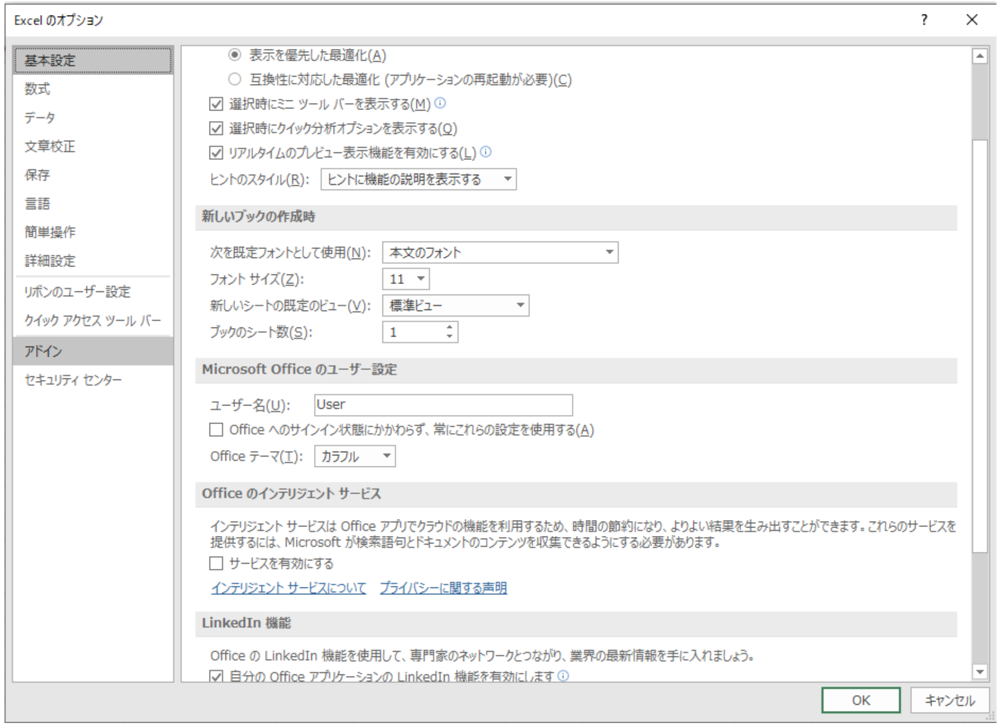


様々な選択肢があり，一番左（「アウトライン」の右隣の右）に注目。

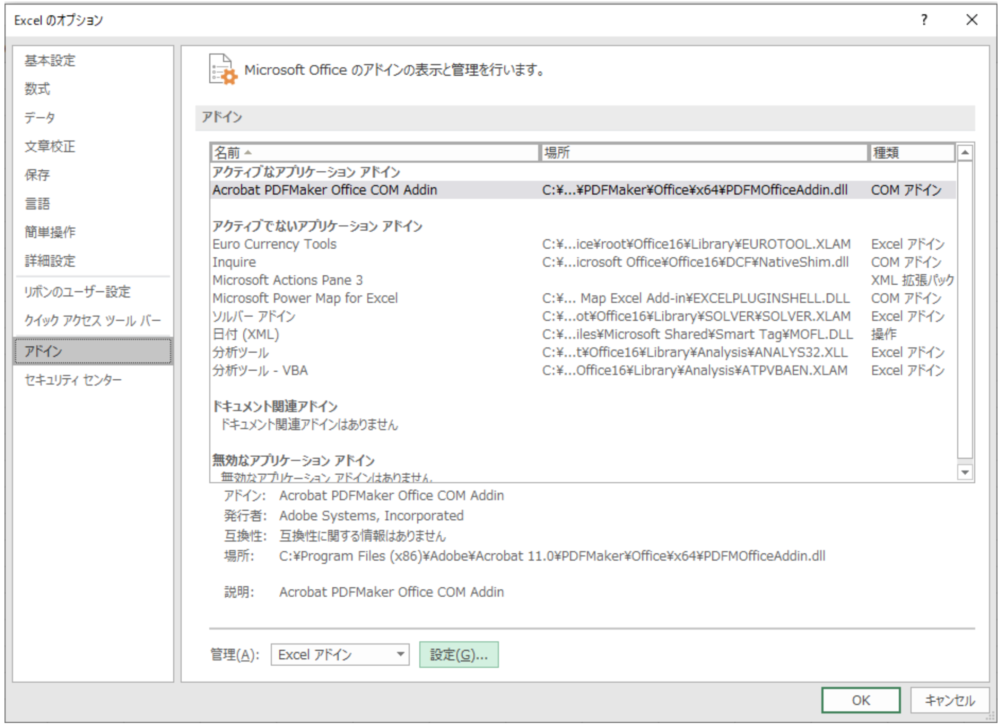
選択肢は何もない状態。

次に，「ファイル」タブをマウスでクリックすると下記の画面が現れる。

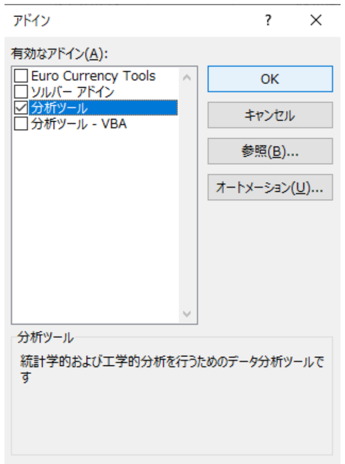
一番左下の「オプション」を選択して，下記の画面が出てくる。



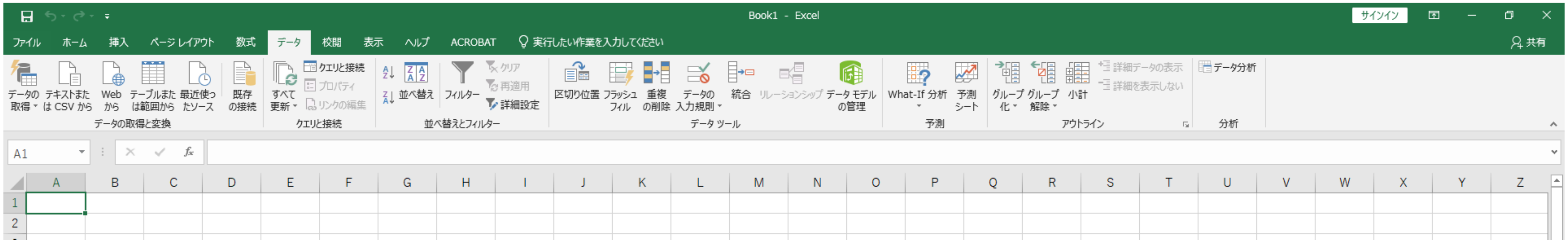
左の下から２番目の「アドイン」を選択して，下記の画面が出てくる。



「設定(G)」ボタンをクリックして，下記の画面が現れる。



「分析ツール」にチェックを入れて，「OK」ボタンをクリックすると，下記の「データ」タブの画面に戻る。



一番右に「データ分析」のタブが追加される。

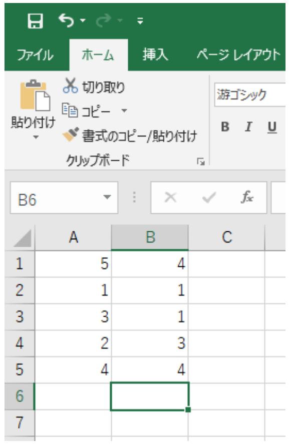
これは一度だけ行えばよい。

次回からは自動的に「データ分析」のタブは追加されたままになる。

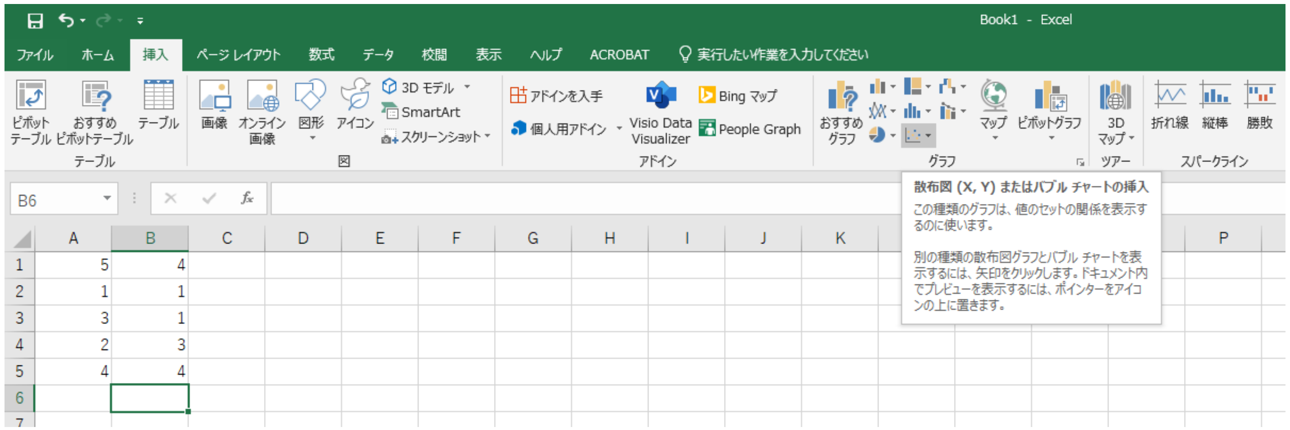
3.4.1　散布図による回帰分析（単回帰の場合）

今までの数値例で散布図を作成する。

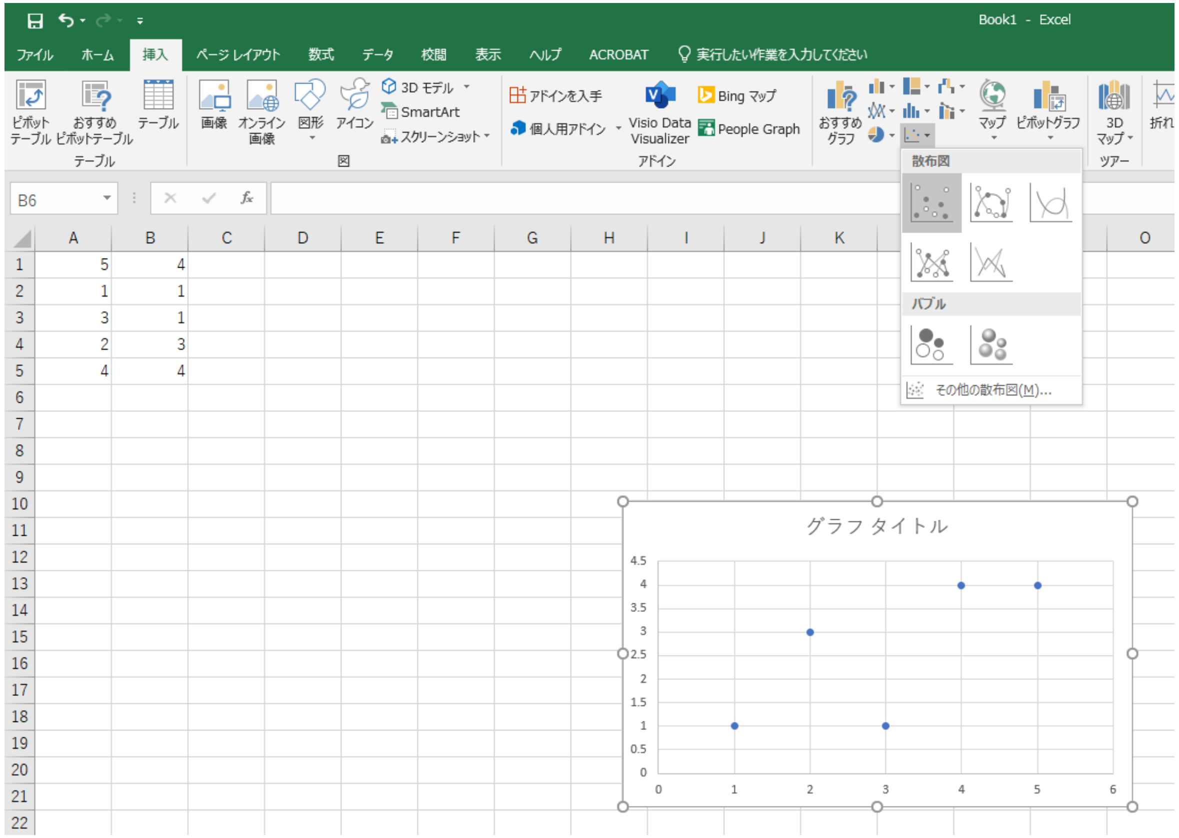
下記のようにデータを入力する。A 列に X データ（説明変数），B 列に Y データ（被説明変数）。



「挿入」タブを選ぶ。

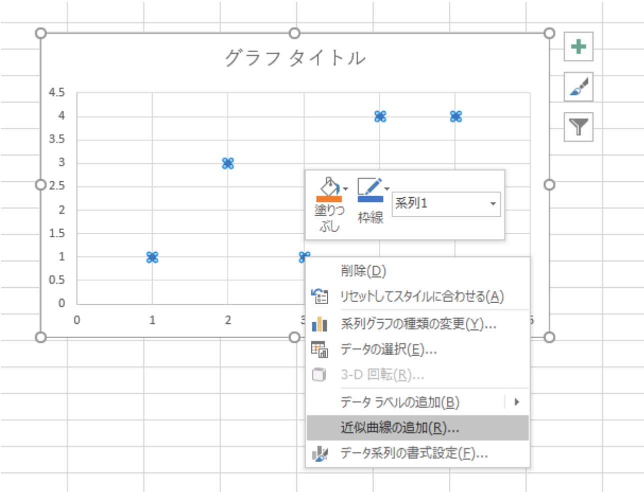


散布図を選び，さらに，左上の散布図を選ぶと，下記の画面が出る。

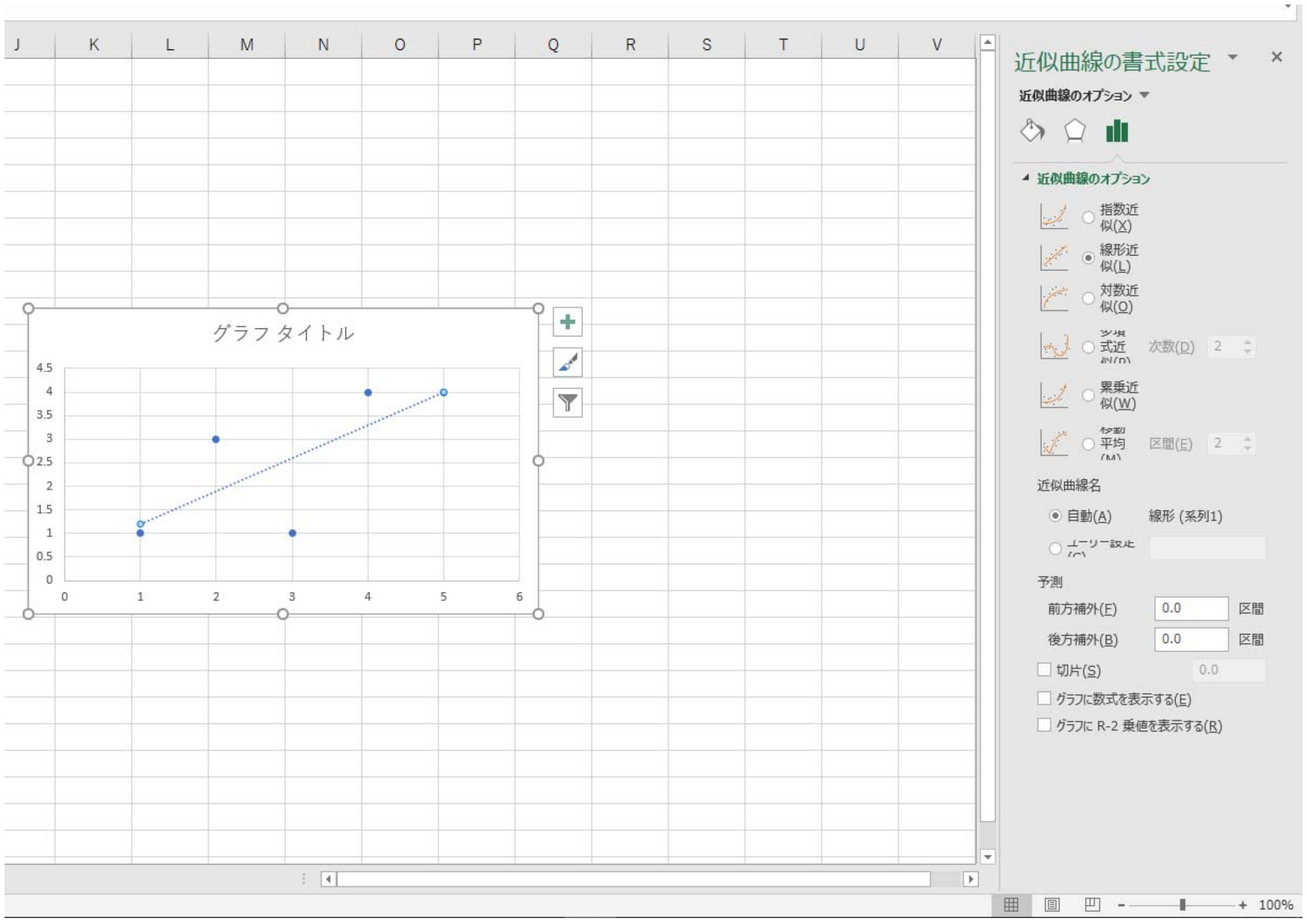


このように，横軸にＡ列，縦軸にＢ列の散布図が完成する。

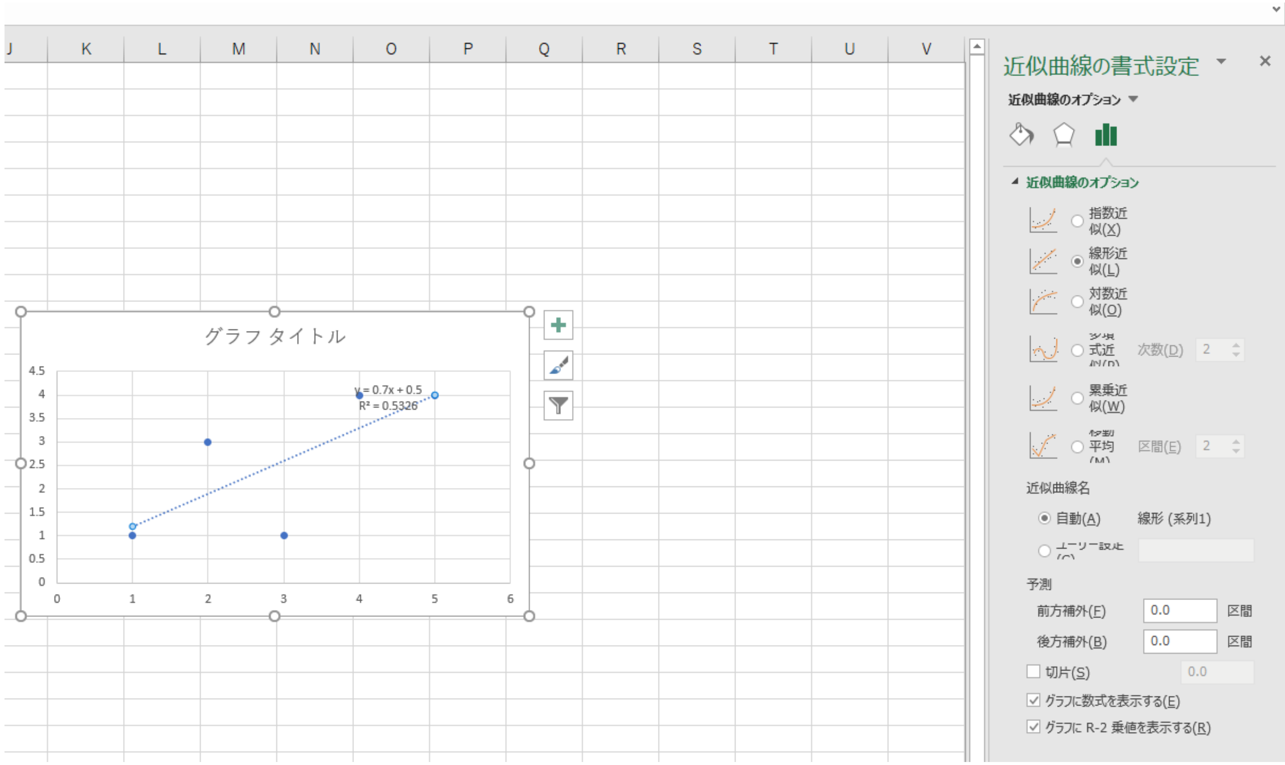
グラフ内の６点のうちどれか一つをマウスで選び，マウスの右ボタンを押すと，下記の画面になる。



下から２つ目の「近似曲線の追加(R)」を選択して，下記の画面になる。



直線の方程式をグラフ内に表示させるには，右側の近似曲線の書式設定の一番下の「グラフに数式を表示する（E)」にチェックを入れる。決定係数を表示させるには「グラフに R-2 乗値を表示する（R)」にチェックを入れる。下の画面になる。



直線の式は $Y=0.7X+0.5$，決定係数 $R^2=0.5326$ と追加される。