高校生のための現代数学講座
「確率の考え方」
講義(2) 吉田 朋広

東京大学
玉原国際セミナーハウス
2005年10月22日

# 統計のはなし：データから情報を取り出す

## 1 データから未知のパラメータの値を計算する

2つの数 $A, B$ を入力すると数

$$Y = A\alpha + B\beta$$

を出力する機械がある．$\alpha, \beta$ はこの機械（ブラックボックス）を特徴付ける数であるが，我々はその値を知らない．$\alpha, \beta$ を**パラメータ**と呼ぶ．また，入出力を並べて $(A, B, Y)$ で表し，**データ**と呼ぼう．

$$(A, B) \quad \rightarrow \quad \boxed{\phantom{xx}} \quad \rightarrow \quad Y$$

2つのデータ $(A_1, B_1, Y_1)$, $(A_2, B_2, Y_2)$ が与えられたとき，

$$\begin{cases} A_1\alpha + B_1\beta &= Y_1 \\ A_2\alpha + B_2\beta &= Y_2 \end{cases} \tag{1}$$

が成り立つ．(1) を $\alpha, \beta$ に関する連立方程式と見なして，未知の値 $\alpha, \beta$ を求めることができる．[1]

[1] ただし，解が唯一つに決まるのは $A_1B_2 - B_1A_2 \neq 0$ のとき．

**例 1** データ

$$(A, B, Y) = (1, 3, 3.2),\ (-6, 2, 0.8)$$

に対して，(1) は

$$\begin{cases} \alpha + 3\beta &= 3.2 \\ -6\alpha + 2\beta &= 0.8 \end{cases} \tag{2}$$

となり，この連立方程式を解いて

$$\alpha = 0.2,\quad \beta = 1$$

を得る．

**例 2** データ

$$(A, B, Y) = (1, 3, 3),\ (-6, 2, 2)$$

に対して，(1) は

$$\begin{cases} \alpha + 3\beta &= 3 \\ -6\alpha + 2\beta &= 2 \end{cases} \tag{3}$$

となり，この連立方程式を解いて

$$\alpha = 0,\quad \beta = 1$$

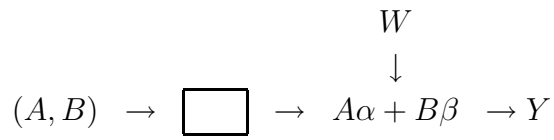
を得る．この機械では入力 $A$ は出力に影響しない（$A$ の入力端子の具合が悪いのかもしれない）．

## 2　ノイズで汚染されたデータ

入力 $A, B$ に対して機械は $A\alpha + B\beta$ を出力するが，今度はそれにノイズ $W$ が加わった値を観測するものとする:

$$Y = A\alpha + B\beta + W.$$

ただし，我々が観測できるのは $(A, B, Y)$ のみであって，$W$ の値は知ることはできない.




次の表はある $\alpha, \beta$ の値に対して，いろいろな入力 $A, B$ と対応する観測 $Y$ を与えている (入力ごとにノイズの値は異なる).

| A | B | Y |
|---|---|---|
| 2.62 | 3.99 | 10.29 |
| 3.22 | 4.75 | 15.25 |
| 2.37 | 3.24 | 7.67 |
| 3.32 | 4.54 | 11.2 |
| 3.36 | 4.13 | 8.71 |
| 3.05 | 4.71 | 12.98 |
| 3.17 | 5.93 | 20.24 |
| 2.82 | 4.72 | 17.16 |
| 3.04 | 3.64 | 10.91 |
| 2.76 | 3.14 | 4.29 |

| A | B | Y |
|---|---|---|
| 2.98 | 5.52 | 18.79 |
| 2.79 | 5.17 | 17.29 |
| 3.12 | 3.37 | 5.18 |
| 3.14 | 4.22 | 11.87 |
| 2.75 | 3.51 | 7.21 |
| 3.48 | 4.04 | 11.3 |
| 2.79 | 2.25 | 1.59 |
| 2.31 | 4.68 | 15.78 |
| 3.04 | 5.67 | 16.77 |
| 2.61 | 4.85 | 15.52 |

表のデータに左上から順に番号を付け，$i$ 番目のデータを $(A_i, B_i, Y_i)$ で表し，対応するノイズを $W_i$ で表す．つまり，

$$A_i\,\alpha + B_i\,\beta + W_i = Y_i \quad (i = 1, 2, ..., 20). \tag{4}$$

我々は $W_i$ が平均的に 0 であることを想定しているが，個々の $W_i$ が 0 であるわけではない．したがって，$W_i$ があるために，(1) のような連立方程式を書くことができない（$A_i\,\alpha + B_i\,\beta = Y_i - W_i$ としても我々は $W_i$ の値を知らない）．

## 3　パラメータ $\alpha, \beta$ の推定

データ $(A_i, B_i, Y_i)$ $(i = 1, 2, ..., n)$ を用いて，値が未知のパラメータ $\alpha, \beta$ の推定をしたい．

**最小二乗法**.

$$\sum_{i=1}^{n} \{Y_i - (A_i\,\alpha + B_i\,\beta)\}^2$$

を最小にする $\alpha$, $\beta$ の値をそれぞれのパラメータの推定値とする．

$Y_i$ と $A_i\alpha + B_i\beta$ の相違

$$|Y_i - (A_i\,\alpha + B_i\,\beta)\,| \tag{5}$$

が小さいとき，出力 $Y_i$ が入力 $A_i, B_i$ でよく説明できたといえるが，この説明誤差は $i$ 毎に異なるので，誤差の総体

$$\sum_{i=1}^{n} \{Y_i - (A_i\,\alpha + B_i\,\beta)\}^2$$

を最小にするようにパラメータ $\alpha, \beta$ を調整するのである．[2]

[2] 2 乗するのは，一つには扱いが容易であるからである．たとえば (5) をそのまま加えるこ

$R, S, T$ を

$$R = \sum_{i=1}^{n} A_i^2, \quad S = \sum_{i=1}^{n} A_i B_i, \quad T = \sum_{i=1}^{n} B_i^2$$

とおく．さらに，

$$C = \sum_{i=1}^{n} A_i Y_i, \quad D = \sum_{i=1}^{n} B_i Y_i$$

とおく．

$\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}$ が次の連立一次方程式の解であるとする：

$$\begin{cases} R\,\widehat{\alpha} + S\,\widehat{\beta} &= C \\ S\,\widehat{\alpha} + T\,\widehat{\beta} &= D \end{cases} \tag{6}$$

このとき，

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} \{Y_i - (A_i\,\alpha + B_i\,\beta)\}^2 &= \sum_{i=1}^{n} \left\{ Y_i - \left( A_i\,\widehat{\alpha} + B_i\,\widehat{\beta} \right) \right\}^2 \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n} \left\{ A_i\,(\widehat{\alpha} - \alpha) + B_i\,(\widehat{\beta} - \beta) \right\}^2 \end{aligned} \tag{7}$$

が成り立つ．証明はセクション 4 を見よ．(7) から

$$\alpha = \widehat{\alpha}, \quad \beta = \widehat{\beta}$$

とするとき

$$\sum_{i=1}^{n} \{Y_i - (A_i\,\alpha + B_i\,\beta)\}^2$$

が最小となることがわかる．すなわち，$\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}$ が $\alpha, \beta$ の最小二乗推定値である．まとめると，

最小二乗推定値 $\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}$ の求め方：連立一次方程式 (6) を解く．

---

とも可能であるが，推定値は最小二乗法によるものとは違ったものになる．状況によってはその方が良い推定を与えることもある．

**例 3** セクション 2 で与えられたデータセットに対して最小二乗推定を実行しよう．まず，

$$R = 174.43, \quad S = 253.9176, \quad T = 387.0279,$$
$$C = 707.0342, \quad D = 1119.9059$$

となることが計算からわかる（懸命に手計算するか計算機を使う）．したがって，連立一次方程式 (6) は

$$\begin{cases} 174.43\,\widehat{\alpha} + 253.9176\,\widehat{\beta} &= 707.0342 \\ 253.9176\,\widehat{\alpha} + 387.0279\,\widehat{\beta} &= 1119.9059 \end{cases}$$

となる．これを解いて，

$$\widehat{\alpha} = -3.53258681067067, \quad \widehat{\beta} = 5.21123119226586$$

をパラメータの推定値として得る．[3]

セクション 2 のデータは，モデル (4) に基づいて計算機で人工的に作ったものである．それに用いたパラメータの真の値は

$$\alpha = -3.6, \quad \beta = 5.4$$

である．上記の推定値はこの真の値をかなり良く当てているといえよう．

ちなみに，同じやり方でデータを 1000 個発生させて，それに基づいてパラメータ推定を行い，

$$\widehat{\alpha} = -3.53642419921925, \quad \widehat{\beta} = 5.35083152858422 \quad (1000\text{ 個})$$

なる結果を得た．推定の精度はすこし改善がみられる．

データ数が少ないときは，良い推定精度は期待できない．たとえばはじめの 10 個のデータだけを使って推定すると，

$$\widehat{\alpha} = -4.51509026059096, \quad \widehat{\beta} = 5.91950723733901 \quad (10\text{ 個})$$

となり，推定誤差は大きい．

[3]実際のデータ処理においては観測値の記述の誤差がもともとあるから，推定値は適当な桁の数とすべきであろう．

# 4　式 (7) の証明

まず,

$$\sum_{i=1}^{n}\{Y_i-(A_i\,\alpha+B_i\,\beta)\}^2 \;=\; \sum_{i=1}^{n}\Big\{[Y_i-(A_i\,\widehat{\alpha}+B_i\,\widehat{\beta}\,)]+[A_i\,(\widehat{\alpha}-\alpha)+B_i\,(\widehat{\beta}-\beta)]\Big\}^2 \tag{8}$$

として，右辺を展開することを考える．クロスタームは

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{n}[Y_i-(A_i\,\widehat{\alpha}+B_i\,\widehat{\beta}\,)][A_i\,(\widehat{\alpha}-\alpha)+B_i\,(\widehat{\beta}-\beta)]\\
=\;&\sum_{i=1}^{n}[Y_i-(A_i\,\widehat{\alpha}+B_i\,\widehat{\beta}\,)]A_i\,(\widehat{\alpha}-\alpha)+\sum_{i=1}^{n}[Y_i-(A_i\,\widehat{\alpha}+B_i\,\widehat{\beta}\,)]B_i\,(\widehat{\beta}-\beta)\\
=\;&(\widehat{\alpha}-\alpha)\Big[\sum_{i=1}^{n}A_iY_i-\sum_{i=1}^{n}A_i^2\,\widehat{\alpha}-\sum_{i=1}^{n}A_iB_i\,\widehat{\beta}\Big]+(\widehat{\beta}-\beta)\Big[\sum_{i=1}^{n}B_iY_i-\sum_{i=1}^{n}A_iB_i\,\widehat{\alpha}-\sum_{i=1}^{n}B_i^2\,\widehat{\beta}\Big]\\
=\;&(\widehat{\alpha}-\alpha)\Big[C-R\,\widehat{\alpha}-S\,\widehat{\beta}\Big]+(\widehat{\beta}-\beta)\Big[D-S\,\widehat{\alpha}-T\,\widehat{\beta}\Big]\\
=\;&0.
\end{aligned}$$

ここで，(6) を用いた．したがって,

$$\sum_{i=1}^{n}\{Y_i-(A_i\,\alpha+B_i\,\beta)\}^2 \;=\; \sum_{i=1}^{n}[Y_i-(A_i\,\widehat{\alpha}+B_i\,\widehat{\beta}\,)]^2+\sum_{i=1}^{n}[A_i\,(\widehat{\alpha}-\alpha)+B_i\,(\widehat{\beta}-\beta)]^2$$

となる．これが (7) であった．□

# 5 DO-IT-YOURSELF!

| A | B | Y | $A^2$ | $AB$ | $B^2$ | $AY$ | $BY$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1.62 | .13 | .76 | | | | | |
| 2.22 | .89 | 1.3 | | | | | |
| | | | | | | | |
| 1.37 | -.62 | 1.05 | | | | | |
| 2.32 | .68 | 1.05 | | | | | |
| 2.36 | .27 | 1.26 | | | | | |
| | | | | | | | |
| 2.05 | .85 | .76 | | | | | |
| 2.17 | 2.07 | .42 | | | | | |
| 1.82 | .86 | 1.14 | | | | | |
| 2.04 | -.22 | 1.9 | | | | | |
| 1.76 | -.72 | 1.13 | | | | | |
| | | | | | | | |
| 1.98 | 1.66 | .5 | | | | | |
| 1.79 | 1.31 | .5 | | | | | |
| 2.12 | -.49 | 1.43 | | | | | |
| 2.14 | .36 | 1.38 | | | | | |
| 1.75 | -.35 | 1.09 | | | | | |
| 2.48 | .18 | 1.98 | | | | | |
| 1.79 | -1.61 | 1.97 | | | | | |
| 1.31 | .82 | .31 | | | | | |
| 2.04 | 1.81 | .04 | | | | | |
| 1.61 | .99 | .41 | | | | | |
| | | | | | | | |

**問題 1** 上の表のデータの，はじめの $n = 2, 5, 10, 20$ 個を用いて，それぞれの場合にパラメータの推定値 $\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}$ を求めよう．$n$ の増加とともに $\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}$ が変化することを観察しよう．

# 6　問題1の答え

実はこのデータは計算機で人工的に発生させたものなので，パラメータの真の値がはじめからわかっている：真値は $\alpha = 0.7$, $\beta = -0.5$ である．以下，データ数 $n$ のときの推定値である．

$$n = 2, \quad \widehat{\alpha} = .439993062781824, \quad \widehat{\beta} = .363163371488033$$

$$n = 5, \quad \widehat{\alpha} = .577546802926555, \quad \widehat{\beta} = -.226951312914061,$$

$$n = 10, \quad \widehat{\alpha} = .631057769015935, \quad \widehat{\beta} = -.392576192424761,$$

$$n = 20, \quad \widehat{\alpha} = .646200209711328, \quad \widehat{\beta} = -.49090207836115,$$

ちなみに，もっとデータを集めて推定すると次のようになった．

$$n = 100, \quad \widehat{\alpha} = .669072660308115, \quad \widehat{\beta} = -.513454554131925,$$

$$n = 1000, \quad \widehat{\alpha} = .697981340950558, \quad \widehat{\beta} = -.506901806862601,$$

データ数が多くなると推定値はパラメータの真の値に非常に近いことがわかる．

..... MEMO .....