

回帰分析

モデルの評価

村田 昇

講義の内容

- 第1回: 回帰モデルの考え方と推定
- 第2回: モデルの評価
- 第3回: モデルによる予測と発展的なモデル

回帰分析の復習

線形回帰モデル

- 目的変数を説明変数で説明する関係式を構成:
 - 説明変数: x_1, \dots, x_p (p 次元)
 - 目的変数: y (1 次元)
- 回帰係数 $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ を用いた一次式:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p$$

- 誤差項を含む確率モデルで観測データを表現:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i \quad (i = 1, \dots, n)$$

簡潔な表現のための行列

- デザイン行列 (説明変数):

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

簡潔な表現のためのベクトル

- ベクトル (目的変数・誤差・回帰係数):

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

問題の記述

- 確率モデル:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

- 回帰式の推定: **残差平方和** の最小化

$$S(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

解の表現

- 解の条件: **正規方程式**

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

- 解の一意性: **Gram 行列** $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ が正則

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

最小二乗推定量の性質

- **あてはめ値** $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は \mathbf{X} の列ベクトルの線形結合
- **残差** $\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}$ はあてはめ値 $\hat{\mathbf{y}}$ と直交

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^\top \hat{\mathbf{y}} = 0$$

- 回帰式は説明変数と目的変数の **標本平均** を通過

$$\bar{y} = (1, \bar{\mathbf{x}}^\top) \hat{\boldsymbol{\beta}}, \quad \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i,$$

寄与率

- **決定係数** (R-squared):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \hat{\epsilon}_i^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

- **自由度調整済み決定係数** (adjusted R-squared):

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{\frac{1}{n-p-1} \sum_{i=1}^n \hat{\epsilon}_i^2}{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

- 不偏分散で補正

実データによる例

- 気象庁より取得した東京の気候データ

	month	day	day_of_week	temp	rain	solar	snow	wdir	wind	press	humid	cloud
214	8	1	Sat	26.1	0.5	19.79	0	NE	2.6	1009.3	77	7.8
215	8	2	Sun	26.3	0.0	19.53	0	SSE	2.4	1011.0	75	5.5
216	8	3	Mon	27.2	0.0	24.73	0	SSE	2.4	1011.0	74	3.8
217	8	4	Tue	28.3	0.0	24.49	0	SSE	2.9	1012.2	77	4.3
218	8	5	Wed	29.1	0.0	24.93	0	S	2.9	1013.4	76	3.3
219	8	6	Thu	28.5	0.0	24.02	0	SSE	3.9	1010.5	79	7.8
220	8	7	Fri	29.5	0.0	22.58	0	S	3.4	1005.0	71	7.5
221	8	8	Sat	28.1	0.0	15.49	0	SE	2.7	1006.1	79	8.3
222	8	9	Sun	28.7	0.0	19.96	0	SSE	2.4	1006.9	77	9.5
223	8	10	Mon	30.5	0.0	20.26	0	SE	2.4	1010.3	73	10.0
224	8	11	Tue	31.7	0.0	25.50	0	S	4.0	1009.7	67	2.8
225	8	12	Wed	30.0	0.5	18.24	0	SSE	2.5	1009.0	79	6.8
226	8	13	Thu	29.4	21.5	19.01	0	N	2.2	1006.4	82	5.0
227	8	14	Fri	29.4	0.0	19.85	0	SE	2.8	1005.5	78	2.0

- 気温を説明する4つの線形回帰モデルを検討する
 - モデル1: 気温 = F(気圧)
 - モデル2: 気温 = F(気圧, 日射)
 - モデル3: 気温 = F(気圧, 日射, 湿度)
 - モデル4: 気温 = F(気圧, 日射, 雲量)
- 関連するデータの散布図

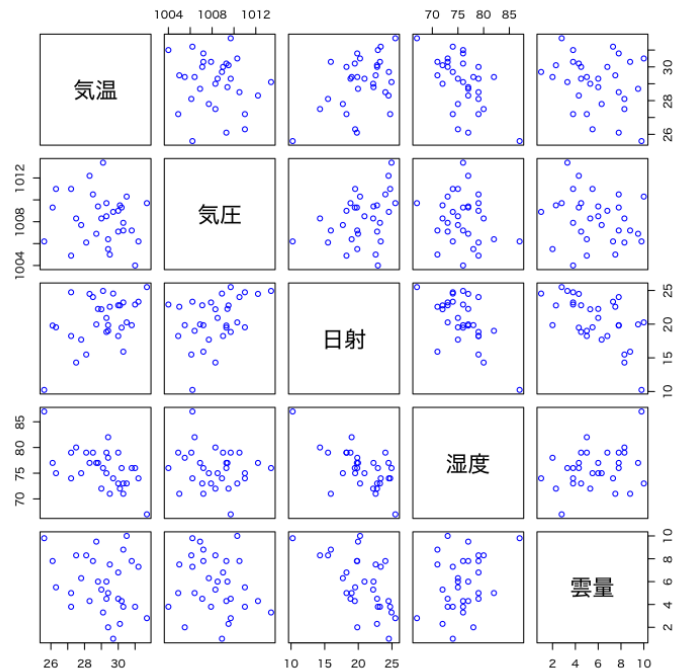


図 1: 散布図

- 観測値とあてはめ値の比較

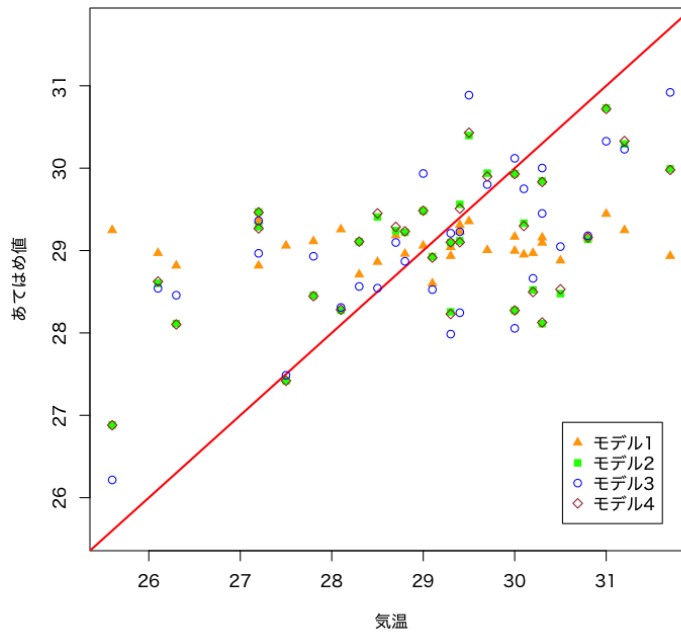


図 2: モデルの比較

- 決定係数・自由度調整済み決定係数の比較
 - モデル 1: 気温 = F(気圧)
 - [1] "R2: 0.0169 ; adj. R2: -0.017"
 - モデル 2: 気温 = F(気圧, 日射)
 - [1] "R2: 0.32 ; adj. R2: 0.271"
 - モデル 3: 気温 = F(気圧, 日射, 湿度)
 - [1] "R2: 0.422 ; adj. R2: 0.358"
 - モデル 4: 気温 = F(気圧, 日射, 雲量)
 - [1] "R2: 0.32 ; adj. R2: 0.245"

残差の性質

あてはめ値

- さまざまな表現:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} \\ (\hat{\boldsymbol{\beta}} &= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} \text{ を代入}) \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}\end{aligned}\tag{A}$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{y} &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \text{ を代入}) \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\epsilon} \\ &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\epsilon}\end{aligned}\tag{B}$$

- (A) あてはめ値は **観測値の重み付けの和** で表される
- (B) あてはめ値と観測値は **誤差項** の寄与のみ異なる

あてはめ値と誤差

- 残差と誤差の関係:

$$\begin{aligned}\hat{\epsilon} &= y - \hat{y} \\ &= \epsilon - X(X^T X)^{-1} X^T \epsilon \\ &= (I - X(X^T X)^{-1} X^T) \epsilon\end{aligned}\tag{C}$$

- (C) 残差は **誤差の重み付けの和** で表される

ハット行列

- 定義:

$$H = X(X^T X)^{-1} X^T$$

- ハット行列 H による表現:

$$\begin{aligned}\hat{y} &= Hy \\ \hat{\epsilon} &= (I - H)\epsilon\end{aligned}$$

- あてはめ値や残差は H を用いて簡潔に表現される

ハット行列の性質

- 観測データ (デザイン行列) のみで計算される
- 観測データと説明変数の関係を表す
- 対角成分 (**テコ比**; leverage) は観測データが自身の予測に及ぼす影響の度合を表す

$$\hat{y}_j = (H)_{jj} y_j + (\text{それ以外のデータの寄与})$$

- $(A)_{ij}$ は行列 A の (i, j) 成分
- テコ比が小さい: 他のデータでも予測が可能
- テコ比が大きい: 他のデータでは予測が困難

演習

問題

- ハット行列 H について以下を示しなさい
 - H は対称行列である
 - H は冪等である

$$H^2 = H, \quad (I - H)^2 = I - H$$

- 以下の等式が成り立つ

$$HX = X, \quad X^T H = X^T$$

ヒント

- いずれも H の定義にもとづいて計算すればよい

$$\begin{aligned}H^T &= (X(X^T X)^{-1} X^T)^T \\H^2 &= (X(X^T X)^{-1} X^T)(X(X^T X)^{-1} X^T) \\(I - H)^2 &= I - 2H + H^2 \\HX &= (X(X^T X)^{-1} X^T)X \\X^T H &= (HX)^T\end{aligned}$$

推定量の統計的性質

最小二乗推定量の性質

- 推定量と誤差の関係:

$$\begin{aligned}\hat{\beta} &= (X^T X)^{-1} X^T y \\&= (X^T X)^{-1} X^T (X\beta + \epsilon) \\&= (X^T X)^{-1} X^T X\beta + (X^T X)^{-1} X^T \epsilon \\&= \beta + (X^T X)^{-1} X^T \epsilon\end{aligned}$$

- 正規分布の重要な性質:

正規分布に従う独立な確率変数の和は正規分布に従う

推定量の分布

- 誤差の仮定: 独立, 平均 0 分散 σ^2 の正規分布
- 推定量は以下の多変量正規分布に従う

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\hat{\beta}] &= \beta \\Cov(\hat{\beta}) &= \sigma^2 (X^T X)^{-1} \\\hat{\beta} &\sim N(\beta, \sigma^2 (X^T X)^{-1})\end{aligned}$$

演習

問題

- 誤差が独立で, 平均 0 分散 σ^2 の正規分布に従うとき, 最小二乗推定量 $\hat{\beta}$ について以下を示しなさい
 - 平均は β (真の母数) となる
 - 共分散行列は $\sigma^2 (X^T X)^{-1}$ となる

解答例

- 定義にもとづいて計算する

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\hat{\beta}] &= \mathbb{E}[\beta + (X^T X)^{-1} X^T \epsilon] \\&= \beta + (X^T X)^{-1} X^T \mathbb{E}[\epsilon] \\&= \beta\end{aligned}$$

- 定義にもとづいて計算する

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(\hat{\beta}) &= \mathbb{E}[(\hat{\beta} - \beta)(\hat{\beta} - \beta)^{\top}] \\
&= \mathbb{E}[(X^{\top}X)^{-1}X^{\top}\epsilon\epsilon^{\top}X(X^{\top}X)^{-1}] \\
&= (X^{\top}X)^{-1}X^{\top}\mathbb{E}[\epsilon\epsilon^{\top}]X(X^{\top}X)^{-1} \\
&= (X^{\top}X)^{-1}X^{\top}(\sigma^2 I)X(X^{\top}X)^{-1} \\
&= \sigma^2(X^{\top}X)^{-1}
\end{aligned}$$

誤差の評価

各係数の推定量の分布

- 推定された回帰係数の精度を評価:
 - 誤差の分布は平均 0 分散 σ^2 の正規分布
 - $\hat{\beta}$ の分布:

$$\hat{\beta} \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2(X^{\top}X)^{-1})$$

* $p+1$ 変量正規分布

- $\hat{\beta}_j$ の分布:

$$\hat{\beta}_j \sim \mathcal{N}(\beta_j, \sigma^2((X^{\top}X)^{-1})_{jj}) = \mathcal{N}(\beta_j, \sigma^2\zeta_j^2)$$

* $(A)_{jj}$ は行列 A の (j, j) (対角) 成分

標準誤差

- 標準誤差 (standard error): $\hat{\beta}_j$ の標準偏差の推定量

$$\hat{\sigma}\zeta_j = \sqrt{\frac{1}{n-p-1} \sum_{i=1}^n \hat{\epsilon}_i^2} \cdot \sqrt{((X^{\top}X)^{-1})_{jj}}$$

- 未知母数 σ^2 は不偏分散 $\hat{\sigma}^2$ で推定
- $\hat{\beta}_j$ の精度の評価指標

演習

問題

- 以下を示しなさい
 - 不偏分散 $\hat{\sigma}^2$ が母数 σ^2 の不偏な推定量となる
 以下が成り立つことを示せばよい

$$\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^n \hat{\epsilon}_i^2\right] = (n-p-1)\sigma^2$$

解答例

- ハット行列 H を用いた表現を利用する

$$\begin{aligned}\hat{\epsilon} &= (I_n - H)\epsilon \\ \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^n \hat{\epsilon}_i^2 \right] &= \mathbb{E}[\hat{\epsilon}^T \hat{\epsilon}] \\ &= \mathbb{E}[\text{tr}(\hat{\epsilon} \hat{\epsilon}^T)] \\ &= \mathbb{E}[\text{tr}(I_n - H) \epsilon \epsilon^T (I_n - H)] \\ &= \text{tr}(I_n - H) \mathbb{E}[\epsilon \epsilon^T] (I_n - H) \\ &= \text{tr}(I_n - H) (\sigma^2 I_n) (I_n - H) \\ &= \sigma^2 \text{tr}(I_n - H)\end{aligned}$$

– I_n は $n \times n$ 単位行列

- さらに以下が成立する

$$\begin{aligned}\text{tr} H &= \text{tr} X (X^T X)^{-1} X^T \\ &= \text{tr} (X^T X)^{-1} X^T X \\ &= \text{tr} I_{p+1} \\ &= p + 1\end{aligned}$$

– 行列のサイズに注意

係数の評価

t -統計量

- 回帰係数の分布 に関する定理:

t -統計量

$$t = \frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\hat{\sigma} \zeta_j}$$

は自由度 $n-p-1$ の t 分布に従う

- 証明には以下の性質を用いる
 - $\hat{\sigma}^2$ と $\hat{\beta}$ は独立となる
 - $(\hat{\beta}_j - \beta_j)/(\sigma \zeta_j)$ は標準正規分布に従う
 - $(n-p-1)\hat{\sigma}^2/\sigma^2 = S(\hat{\beta})/\sigma^2$ は自由度 $n-p-1$ の χ^2 -分布に従う

t -統計量による検定

- 回帰係数 β_j が回帰式に寄与するか否かを検定:
 - 帰無仮説 $H_0: \beta_j = 0$ (t -統計量が計算できる)
 - 対立仮説 $H_1: \beta_j \neq 0$
- p -値: 確率変数の絶対値が $|t|$ を超える確率

$$(p\text{-値}) = 2 \int_{|t|}^{\infty} f(x) dx \quad (\text{両側検定})$$

– $f(x)$ は自由度 $n-p-1$ の t 分布の確率密度関数

- 帰無仮説 H_0 が正しければ p -値は小さくならない

モデルの評価

F-統計量

- ばらつきの比に関する定理:

$\beta_1 = \dots = \beta_p = 0$ ならば F-統計量

$$F = \frac{\frac{1}{p} S_r}{\frac{1}{n-p-1} S} = \frac{n-p-1}{p} \frac{R^2}{1-R^2}$$

は自由度 $p, n-p-1$ の F-分布に従う

- 証明には以下の性質を用いる
 - S_r と S は独立となる
 - S_r/σ^2 は自由度 p の χ^2 -分布に従う
 - S/σ^2 は自由度 $n-p-1$ の χ^2 -分布に従う

F-統計量を用いた検定

- 説明変数のうち 1 つでも役に立つか否かを検定:
 - 帰無仮説 $H_0: \beta_1 = \dots = \beta_p = 0$ (S_r が χ^2 分布になる)
 - 対立仮説 $H_1: \exists j \beta_j \neq 0$
- p-値: 確率変数の値が F を超える確率

$$(p\text{-値}) = \int_F^\infty f(x) dx \quad (\text{片側検定})$$

- $f(x)$ は自由度 $p, n-p-1$ の F-分布の確率密度関数
- 帰無仮説 H_0 が正しければ p-値は小さくならない

解析の事例

データについて

- 気象庁より取得した東京の気候データ
 - 気象庁 <https://www.data.jma.go.jp/gmd/risk/obsdl/index.php>
 - データ https://noboru-murata.github.io/multivariate-analysis/data/tokyo_weather.csv

東京の8月の気候の分析

- 気候 (気温, 降雨, 日射, 降雪, 風速, 気圧, 湿度, 雲量)
に関するデータ (の一部)

	month	day	day_of_week	temp	rain	solar	snow	wdir	wind	press	humid	cloud
214	8	1	Sat	26.1	0.5	19.79	0	NE	2.6	1009.3	77	7.8
215	8	2	Sun	26.3	0.0	19.53	0	SSE	2.4	1011.0	75	5.5
216	8	3	Mon	27.2	0.0	24.73	0	SSE	2.4	1011.0	74	3.8
217	8	4	Tue	28.3	0.0	24.49	0	SSE	2.9	1012.2	77	4.3
218	8	5	Wed	29.1	0.0	24.93	0	S	2.9	1013.4	76	3.3
219	8	6	Thu	28.5	0.0	24.02	0	SSE	3.9	1010.5	79	7.8

220	8	7	Fri	29.5	0.0	22.58	0	S	3.4	1005.0	71	7.5
221	8	8	Sat	28.1	0.0	15.49	0	SE	2.7	1006.1	79	8.3
222	8	9	Sun	28.7	0.0	19.96	0	SSE	2.4	1006.9	77	9.5
223	8	10	Mon	30.5	0.0	20.26	0	SE	2.4	1010.3	73	10.0
224	8	11	Tue	31.7	0.0	25.50	0	S	4.0	1009.7	67	2.8
225	8	12	Wed	30.0	0.5	18.24	0	SSE	2.5	1009.0	79	6.8
226	8	13	Thu	29.4	21.5	19.01	0	N	2.2	1006.4	82	5.0
227	8	14	Fri	29.4	0.0	19.85	0	SE	2.8	1005.5	78	2.0

- 作成した線形回帰モデルを検討する
 - モデル 1: 気温 = F(気圧)
 - モデル 2: 気温 = F(気圧, 日射)
 - モデル 3: 気温 = F(気圧, 日射, 湿度)
 - モデル 4: 気温 = F(気圧, 日射, 雲量)
- 観測値とあてはめ値の比較

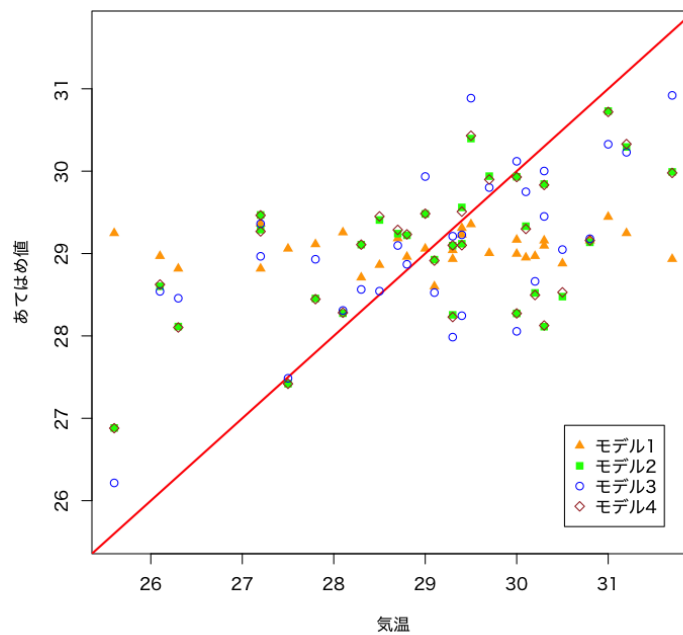


図 3: モデルの比較

- モデル 1: 係数とモデルの評価

```
Call:
lm(formula = TW.model1, data = TW.subset, y = TRUE)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-3.6478 -0.8208  0.1702  1.1452  2.7664

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 119.56133  128.23971    0.932    0.359
```

```
press          -0.08976    0.12719  -0.706    0.486
```

```
Residual standard error: 1.539 on 29 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.01688, Adjusted R-squared:  -0.01702
F-statistic: 0.498 on 1 and 29 DF,  p-value: 0.486
```

- モデル 2: 係数とモデルの評価

Call:

```
lm(formula = TW.model2, data = TW.subset, y = TRUE)
```

Residuals:

	Min	1Q	Median	3Q	Max
	-2.50259	-0.73147	0.06766	0.83716	2.18776

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	273.68079	117.00384	2.339	0.02670 *
press	-0.24793	0.11661	-2.126	0.04245 *
solar	0.26057	0.07379	3.531	0.00145 **

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```
Residual standard error: 1.303 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.3198, Adjusted R-squared:  0.2712
F-statistic: 6.582 on 2 and 28 DF,  p-value: 0.00454
```

- モデル 3: 係数とモデルの評価

Call:

```
lm(formula = TW.model3, data = TW.subset, y = TRUE)
```

Residuals:

	Min	1Q	Median	3Q	Max
	-2.44058	-0.50661	0.01425	0.81490	1.94439

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	262.65623	109.96118	2.389	0.0242 *
press	-0.22210	0.11012	-2.017	0.0537 .
solar	0.14203	0.08801	1.614	0.1182
humid	-0.16572	0.07589	-2.184	0.0379 *

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```
Residual standard error: 1.223 on 27 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.4219, Adjusted R-squared:  0.3577
F-statistic: 6.568 on 3 and 27 DF,  p-value: 0.001772
```

- モデル 4: 係数とモデルの評価

Call:

```
lm(formula = TW.model4, data = TW.subset, y = TRUE)
```

Residuals:

	Min	1Q	Median	3Q	Max
	-2.52396	-0.72721	0.07162	0.83623	2.17339

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	274.00410	119.16813	2.299	0.02945 *
press	-0.24843	0.11883	-2.091	0.04610 *
solar	0.26598	0.09155	2.905	0.00723 **
cloud	0.01295	0.12509	0.104	0.91829

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.327 on 27 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.3201, Adjusted R-squared: 0.2445

F-statistic: 4.236 on 3 and 27 DF, p-value: 0.0141

- 決定係数と F -統計量
 - モデル 1: 気温 = F (気圧)
[1] "R2: 0.0169 ; adj. R2: -0.017 ; F-statistic: 0.498"
 - モデル 2: 気温 = F (気圧, 日射)
[1] "R2: 0.32 ; adj. R2: 0.271 ; F-statistic: 6.58"
 - モデル 3: 気温 = F (気圧, 日射, 湿度)
[1] "R2: 0.422 ; adj. R2: 0.358 ; F-statistic: 6.57"
 - モデル 4: 気温 = F (気圧, 日射, 雲量)
[1] "R2: 0.32 ; adj. R2: 0.245 ; F-statistic: 4.24"

次週の予定

- 第 1 回: 回帰モデルの考え方と推定
- 第 2 回: モデルの評価
- 第 3 回: モデルによる予測と発展的なモデル