回帰分析

予測と発展的なモデル

村田 昇

講義概要

- 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

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

- **誤差項** を含む確率モデルで観測データを表現

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

問題設定

- 確率モデル

$$\boldsymbol{y} = X\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} \sim \text{確率分布}$$

- 式の評価 : **残差平方和** の最小化による推定

$$S(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{\beta})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y} - X\boldsymbol{\beta})$$

解とその一意性

- 解の条件 : **正規方程式**

$$X^{\mathsf{T}} X\boldsymbol{\beta} = X^{\mathsf{T}}\boldsymbol{y}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}\boldsymbol{y}$$

解析の事例

気温に影響を与える要因の分析

- データの概要

日付	気温	降雨	日射	降雪	風向	風速	気圧	湿度	雲量
2023-09-01	29.2	0.0	24.01	0	SSE	4.3	1012.1	71	2.0
2023-09-02	29.6	0.0	22.07	0	SSE	3.1	1010.3	72	8.0
2023-09-03	29.1	3.5	18.64	0	ENE	2.8	1010.6	74	9.3
2023-09-04	26.1	34.0	7.48	0	N	2.6	1007.5	96	10.0
2023-09-05	29.3	0.0	22.58	0	S	3.5	1005.2	77	3.5
2023-09-06	27.5	0.5	13.17	0	SSW	2.6	1003.6	79	10.0
2023-09-07	27.0	0.5	11.01	0	ENE	2.5	1007.9	72	10.0
2023-09-08	21.9	107.5	2.10	0	NW	3.4	1007.8	98	10.0
2023-09-09	24.8	1.0	8.81	0	S	2.2	1006.8	93	7.5
2023-09-10	27.8	0.0	17.57	0	S	3.1	1009.1	83	6.3
2023-09-11	28.1	0.0	17.19	0	SSE	3.1	1010.1	79	9.0
2023-09-12	27.7	0.0	20.02	0	SSE	2.8	1010.0	76	4.8
2023-09-13	28.0	0.0	22.00	0	SE	2.4	1010.9	74	4.5
2023-09-14	28.2	0.0	14.54	0	SSE	2.8	1009.9	80	7.0
2023-09-15	27.4	10.5	9.21	0	NE	2.0	1010.9	88	8.5
2023-09-16	27.9	0.0	11.78	0	SSE	2.0	1011.5	86	10.0
2023-09-17	28.7	0.0	14.84	0	S	3.2	1011.5	80	4.0
2023-09-18	28.9	0.0	19.59	0	S	4.2	1011.6	74	1.8
2023-09-19	29.0	0.0	19.93	0	S	3.3	1010.1	72	2.3
2023-09-20	27.2	6.0	10.65	0	N	1.9	1009.3	82	8.3
2023-09-21	26.7	2.0	6.65	0	S	4.1	1006.7	87	9.5
2023-09-22	24.8	59.5	6.83	0	ENE	2.5	1008.1	93	10.0
2023-09-23	22.1	4.0	4.48	0	NE	2.6	1012.5	89	10.0
2023-09-24	22.2	0.0	15.81	0	N	3.0	1017.2	67	7.0
2023-09-25	22.4	0.0	15.49	0	N	2.5	1017.1	69	6.5
2023-09-26	24.6	0.0	16.08	0	NNW	2.0	1012.7	71	6.0
2023-09-27	25.3	0.0	11.59	0	SSE	1.9	1008.1	81	9.0
2023-09-28	27.4	0.0	14.03	0	ESE	1.9	1004.7	79	5.8
2023-09-29	26.3	0.0	10.11	0	SSE	3.0	1009.0	75	8.5
2023-09-30	25.6	0.0	7.98	0	S	2.5	1007.5	77	7.0

- 気温を説明する 5 種類の線形回帰モデルを検討
  - モデル 1 : 気温 = F(気圧)
  - モデル 2 : 気温 = F(日射)
  - モデル 3 : 気温 = F(気圧, 日射)
  - モデル 4 : 気温 = F(気圧, 日射, 湿度)
  - モデル 5 : 気温 = F(気圧, 日射, 雲量)

分析の視覚化

- 関連するデータの散布図

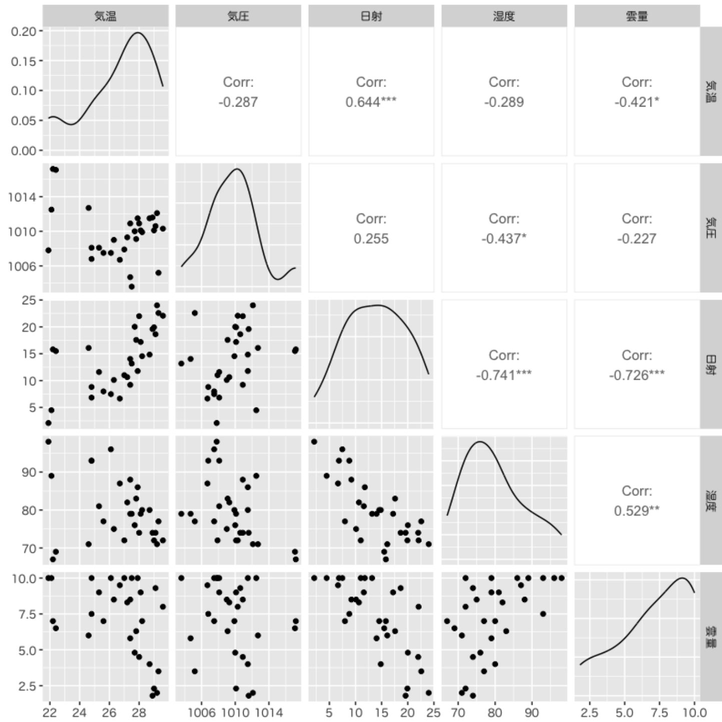

Figure 1: 散布図

- 観測値とあてはめ値の比較

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

モデルの評価

- 決定係数 (R^2・Adjusted R^2) によるモデルの比較

	モデル 1		モデル 2		モデル 3		モデル 4		モデル 5	
Characteristic	**Beta**	**95% CI**[1]	**Beta**	**95% CI**[1]	**Beta**	**95% CI**[1]	**Beta**	**95% CI**[1]	**Beta**	**95% CI**[1]
気圧	-0.21	-0.49, 0.06			-0.36	-0.55, -0.18	-0.32	-0.53, -0.12	-0.36	-0.55, -0.17
日射			0.25	0.14, 0.37	0.30	0.20, 0.40	0.35	0.21, 0.49	0.32	0.18, 0.46
湿度							0.05	-0.06, 0.16		
雲量									0.05	-0.26, 0.36
R^2	0.082		0.414		0.632		0.644		0.633	

Adjusted R^2	0.049	0.393	0.604	0.603	0.591

[1] CI = Confidence Interval

F 統計量による検定

- 説明変数のうち 1 つでも役に立つか否かを検定する
  - 帰無仮説 H_0: $\beta_1 = \cdots = \beta_p = 0$
  - 対立仮説 H_1: $\exists j\ \beta_j \neq 0$ (少なくとも 1 つは役に立つ)
- F 統計量: 決定係数 (または残差) を用いて計算

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

- p 値: 自由度 $p, n-p-1$ の F 分布で計算

モデルの評価

- F 統計量によるモデルの比較

	モデル 1		モデル 2		モデル 3		モデル 4		モデル 5	
Characteristic	**Beta**	**95% CI[1]**	**Beta**	**95% CI[1]**	**Beta**	**95% CI[1]**	**Beta**	**95% CI[1]**	**Beta**	**95% CI[1]**
気圧	-0.21	-0.49, 0.06			-0.36	-0.55, -0.18	-0.32	-0.53, -0.12	-0.36	-0.55, -0.17
日射			0.25	0.14, 0.37	0.30	0.20, 0.40	0.35	0.21, 0.49	0.32	0.18, 0.46
湿度							0.05	-0.06, 0.16		
雲量									0.05	-0.26, 0.36
Statistic	2.51		19.8		23.1		15.7		14.9	
p-value	0.12		<0.001		<0.001		<0.001		<0.001	

[1] CI = Confidence Interval

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する
  - 帰無仮説 H_0: $\beta_j = 0$
  - 対立仮説 H_1: $\beta_j \neq 0$ (β_j は役に立つ)
- t 統計量: 各係数ごと，ζ は $(X^\top X)^{-1}$ の対角成分

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

- p 値: 自由度 $n-p-1$ の t 分布を用いて計算

モデルの評価

- t 統計量によるモデルの比較

	モデル 1				モデル 2				モデル 3				
Characteristic	**Beta**	**SE[1]**	**Statistic**	**p-value**	**Beta**	**SE[1]**	**Statistic**	**p-value**	**Beta**	**SE[1]**	**Statistic**	**p-value**	**Beta**
(Intercept)	243	137	1.78	0.086	23	0.855	27.1	<0.001	386	91.0	4.25	<0.001	346
気圧	-0.21	0.135	-1.58	0.12					-0.36	0.090	-3.99	<0.001	-0.32

日射	0.25	0.057	4.45	<0.001	0.30	0.048	6.35	<0.001	0.35
湿度									0.05
雲量									

[1]SE = Standard Error

診断プロットによる評価

- モデル 4

- モデル 5

回帰モデルによる予測

予測

- 新しいデータ (説明変数) $\boldsymbol{x}$ に対する **予測値**

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

- 予測値は元データの目的変数の重み付け線形和

$$\hat{y} = \boldsymbol{w}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{y}, \qquad \boldsymbol{w}(\boldsymbol{x})^\top = (1, \boldsymbol{x}^\top)(X^\top X)^{-1} X^\top$$

  - 重みは元データと新規データの説明変数で決定

予測値の性質

- 推定量は以下の性質をもつ多変量正規分布

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

- この性質を利用して以下の 3 つの値の違いを評価

$$\begin{aligned} \hat{y} &= (1, \boldsymbol{x}^\top)\hat{\boldsymbol{\beta}} && \text{(回帰式による予測値)} \\ \tilde{y} &= (1, \boldsymbol{x}^\top)\boldsymbol{\beta} && \text{(最適な予測値)} \\ y &= (1, \boldsymbol{x}^\top)\boldsymbol{\beta} + \epsilon && \text{(観測値)} \end{aligned}$$

  - $\hat{y}$ と y は独立な正規分布に従うことに注意

信頼区間

最適な予測値との差

- 差の分布は以下の平均・分散をもつ正規分布に従う

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\tilde{y} - \hat{y}] &= (1, \boldsymbol{x}^\top)\boldsymbol{\beta} - (1, \boldsymbol{x}^\top)\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\beta}}] = 0 \\ \mathrm{Var}(\tilde{y} - \hat{y}) &= \underbrace{\sigma^2 (1, \boldsymbol{x}^\top)(X^\top X)^{-1}(1, \boldsymbol{x}^\top)^\top}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}\ \text{の推定誤差による分散}} = \sigma^2 \gamma_c(\boldsymbol{x})^2 \end{aligned}$$

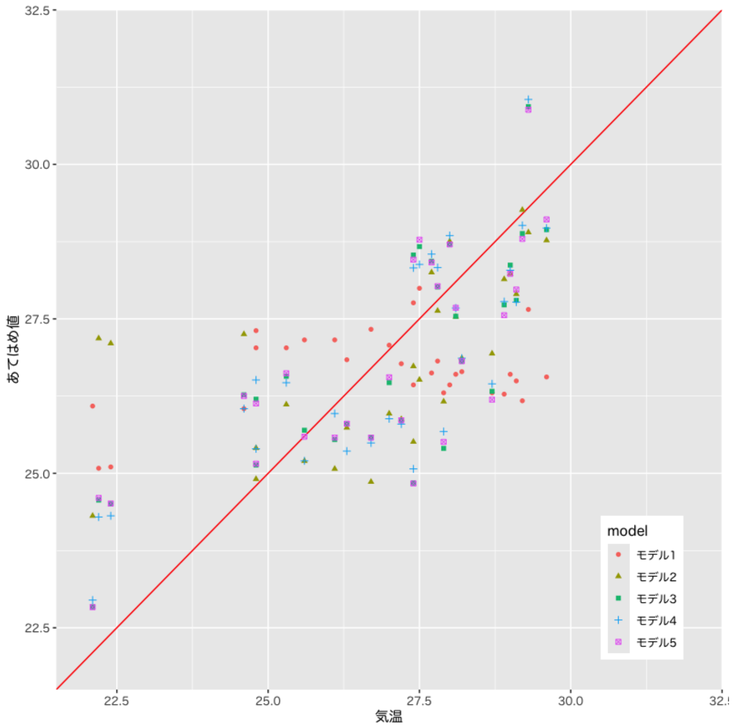

Figure 2: モデルの比較

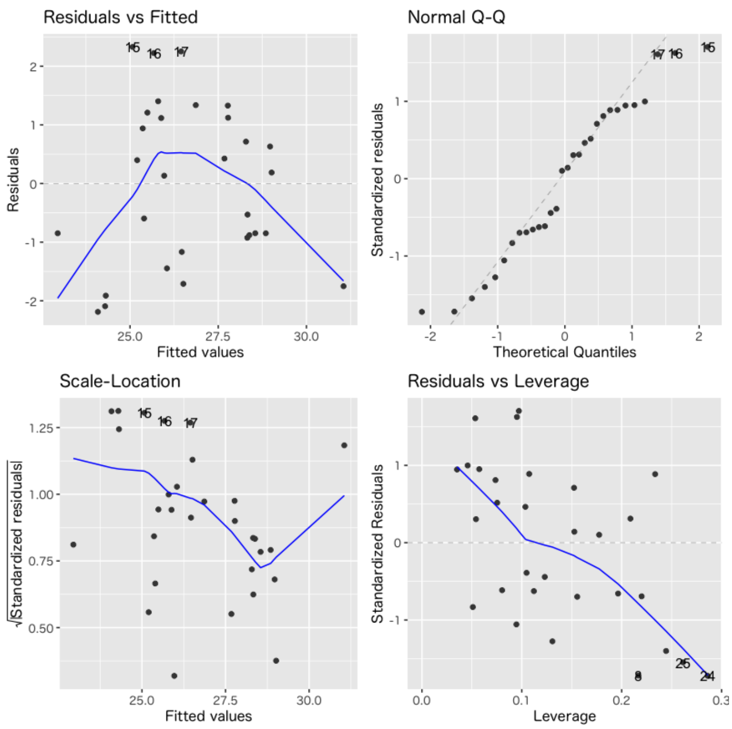

Figure 3: モデル 4 の診断

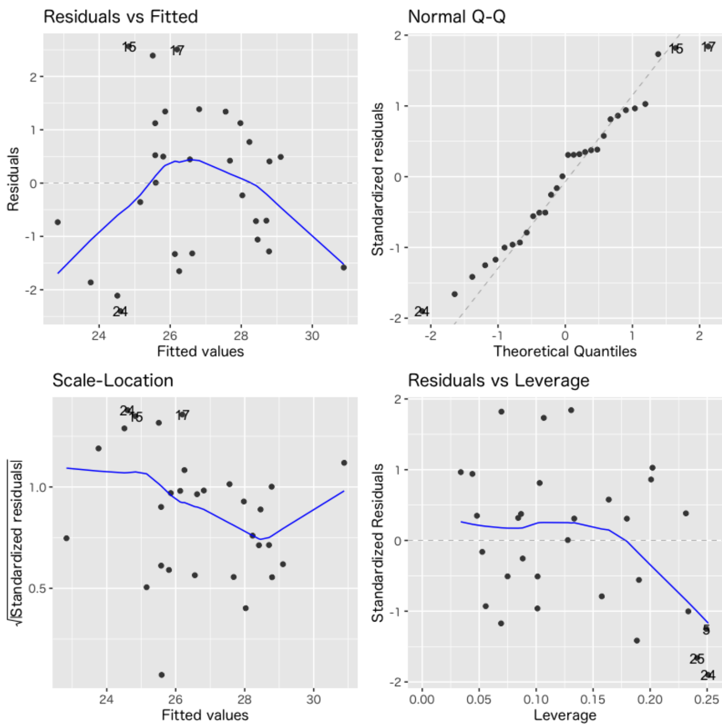

Figure 4: モデル 5 の診断

- 正規化による表現

$$\frac{\tilde{y} - \hat{y}}{\sigma\gamma_c(\boldsymbol{x})} \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

信頼区間

- 未知の分散を不偏分散で推定

$$Z = \frac{\tilde{y} - \hat{y}}{\hat{\sigma}\gamma_c(\boldsymbol{x})} \sim \mathcal{T}(n - p - 1) \quad (t \text{ 分布})$$

- 確率 α の信頼区間

$$I_\alpha^c = (\hat{y} - C_\alpha\hat{\sigma}\gamma_c(\boldsymbol{x}),\ \hat{y} + C_\alpha\hat{\sigma}\gamma_c(\boldsymbol{x}))$$

$$P(|Z| < C_\alpha | Z \sim \mathcal{T}(n - p - 1)) = \alpha$$

  - 最適な予測値 $\tilde{y}$ が入ることが期待される区間

予測区間

観測値との差

- 差の分布は以下の平均・分散をもつ正規分布に従う

$$\mathbb{E}[y-\hat{y}] = (1,\boldsymbol{x}^\top)\boldsymbol{\beta} + \mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon}] - (1,\boldsymbol{x}^\top)\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\beta}}] = 0$$

$$\mathrm{Var}(y-\hat{y}) = \underbrace{\sigma^2(1,\boldsymbol{x}^\top)(X^\top X)^{-1}(1,\boldsymbol{x}^\top)^\top}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}\text{ の推定誤差による分散}} + \underbrace{\sigma^2}_{\text{誤差の分散}} = \sigma^2\gamma_p(\boldsymbol{x})^2$$

- 正規化による表現

$$\frac{y-\hat{y}}{\sigma\gamma_p(\boldsymbol{x})} \sim \mathcal{N}(0,1)$$

予測区間

- 未知の分散を不偏分散で推定

$$Z = \frac{y-\hat{y}}{\hat{\sigma}\gamma_p(\boldsymbol{x})} \sim \mathcal{T}(n-p-1) \quad (t\text{ 分布})$$

- 確率 α の予測区間

$$\mathcal{I}^p_\alpha = \bigl(\hat{y} - C_\alpha\hat{\sigma}\gamma_p(\boldsymbol{x}),\ \hat{y} + C_\alpha\hat{\sigma}\gamma_p(\boldsymbol{x})\bigr)$$

$$P(|Z| < C_\alpha | Z \sim \mathcal{T}(n-p-1)) = \alpha$$

  - 観測値 y が入ることが期待される区間
  - $\gamma_p > \gamma_c$ なので信頼区間より広くなる

実習

R：予測値と区間推定

- 関数 stats::predict() を用いた予測

```
#' モデルの作成
toy_train <- tibble(x1 = ..., x2 = ..., y = ...)
toy_lm  <- lm(y ~ x1 + x2, data = toy_train)
toy_train_fitted  <- predict(toy_lm) # あてはめ値の計算
#' 新しいデータの予測
toy_test <- tibble(x1 = ..., x2 = ...) # 予測したいデータの説明変数
toy_test_fitted <- predict(toy_lm, # 予測値の計算
                           newdata = toy_test)
toy_test_conf <- predict(toy_lm, newdata = toy_test, # 信頼区間
                         interval = "confidence", level = 0.95)
toy_test_pred <- predict(toy_lm, newdata = toy_test, # 予測区間
                         interval = "prediction", level = 0.95)
#' 信頼区間，予測区間の水準の既定値は 0.95
```

- 関数 broom::augment() を用いた予測

```
#' モデルの作成
toy_train <- tibble(x1 = ..., x2 = ..., y = ...)
toy_lm  <- lm(y ~ x1 + x2, data = toy_train)
toy_train_fitted  <- augment(toy_lm) # あてはめ値の計算
#' 新しいデータの予測
toy_test <- tibble(x1 = ..., x2 = ...) # 予測したいデータの説明変数
```

```
toy_test_fitted <- augment(toy_lm, # 予測値の計算
                           newdata = toy_test)
toy_test_conf <- augment(toy_lm, newdata = toy_test, # 信頼区間
                         interval = "confidence", conf.level = 0.95)
toy_test_pred <- augment(toy_lm, newdata = toy_test, # 予測区間
                         interval = "prediction", conf.level = 0.95)
#' 信頼区間，予測区間の水準の既定値は 0.95
```

R：モデルからの予測

- 東京の気候データによる例

```
#' 9,10 月のデータでモデルを構築し，8,11 月のデータを予測
#' データの整理
tw_data <- read_csv("data/tokyo_weather.csv")
tw_train <- tw_data |> # モデル推定用データ
  filter(month %in% c(9,10)) # %in% は集合に含むかどうかを判定
tw_test  <- tw_data |> # 予測用データ
  filter(month %in% c(8,11))
#' モデルの構築
tw_model <- temp ~ solar + press # モデルの定義
tw_lm <- lm(tw_model, data = tw_train) # モデルの推定
tidy(tw_lm)    # 回帰係数の評価
glance(tw_lm) # モデルの評価
#' あてはめ値と予測値の計算
tw_train_fitted <- augment(tw_lm, newdata = tw_train) # あてはめ値
tw_test_fitted  <- augment(tw_lm, newdata = tw_test)  # 予測値
```

- グラフ表示の例

```
#' 予測結果を図示
bind_rows(tw_train_fitted, tw_test_fitted) |> # 2つのデータフレームを結合
  mutate(month = as_factor(month)) |> # 月を因子化して表示に利用
  ggplot(aes(x = .fitted, y = temp)) +
  geom_point(aes(colour = month, shape = month)) + # 月ごとに色と形を変える
  geom_abline(slope = 1, intercept = 0, # 予測が完全に正しい場合のガイド線
              colour = "gray") +
  labs(x = "fitted", y = "observed")
```

R：区間表示のための関数

- 関数 ggplot2::geom_errorbar()：区間の表示

```
geom_errorbar(
  mapping = NULL,
  data = NULL,
  stat = "identity",
  position = "identity",
  ...,
  na.rm = FALSE,
  orientation = NA,
  show.legend = NA,
  inherit.aes = TRUE
)
#' mapping: 区間を表すために xmin,xmax または ymin,ymax を与える
#' data: データフレーム
#' ...: その他の描画オプション
#' orientation: 特別な場合に指定 (一般に向きは mapping で自動的決定)
#' 詳細は '?ggplot2::geom_errorbar' を参照
```

  - 関数 broom::augment() の場合は '.lower/.upper' を用いる
  - 関数 stats::predict() の場合は 'lwr/upr' を用いる

練習問題

- 東京の気候データを用いて以下の実験を試みなさい
  - 8 月のデータで回帰式を推定する
  - 上記のモデルで 9 月のデータを予測する

```r
#' 特定の月のデータを取り出すには，例えば以下のようにすればよい
tw_data <- read_csv("data/tokyo_weather.csv")
tw_train <- tw_data |> filter(month == 8) # 単一の数字と比較
tw_test  <- tw_data |> filter(month %in% c(9,10)) # 集合と比較
```

発展的なモデル

非線形性を含むモデル

- 目的変数 y
- 説明変数 $x_1, \ldots, x_p$
- 説明変数の追加で対応可能
  - 交互作用 (交差項) : $x_i x_j$ のような説明変数の積
  - 非線形変換 : $\log(x_k)$ のような関数による変換

カテゴリカル変数を含むモデル

- 数値ではないデータ
  - 悪性良性
  - 血液型
- 適切な方法で数値に変換して対応:
  - 2 値の場合は 1,0 (真，偽) を割り当てる
    - 悪性 : 1
    - 良性 : 0
  - 3 値以上の場合は **ダミー変数** を利用する (カテゴリ数-1 個)
    - A 型 : (1,0,0)
    - B 型 : (0,1,0)
    - O 型 : (0,0,1)
    - AB 型 : (0,0,0)

実習

R：線形でないモデル式の書き方

- 交互作用を記述するためには特殊な記法がある
- 非線形変換はそのまま関数を記述すればよい
- 1 つの変数の多項式は関数 `I()` を用いる

```r
#' 目的変数 Y，説明変数 X1,X2,X3
#' 交互作用を含む式 (formula) の書き方
Y ~ X1 + X1:X2        # X1 + X1*X2
Y ~ X1 * X2           # X1 + X2 + X1*X2
Y ~ (X1 + X2 + X3)^2 # X1 + X2 + X3 + X1*X2 + X2*X3 + X3*X1
#' 非線形変換を含む式 (formula) の書き方
Y ~ f(X1)             # f(X1) (f は任意の関数)
```

```r
Y ~ X1 + I(X2^2)      # X1 + X2^2
```

R：カテゴリカル変数の取り扱い

- 何も宣言しなくても通常は適切に対応してくれる
- 陽に扱う場合は関数 factor() を利用する

```r
#' factor 属性の与え方
X <- c("A", "S", "A", "B", "D")
Y <- c(85, 100, 80, 70, 30)
toy_data1 <- tibble(X, Y)
toy_data2 <- toy_data1 |> # 因子化
  mutate(X2 = factor(X))  # 関数 as_factor() を用いてもよい
glimpse(toy_data2) # 作成したデータフレームの素性を見る (pillar::glimpse())
toy_data3 <- toy_data2 |> # 順序付き (levels) の因子化
  mutate(X3 = factor(X, levels=c("S","A","B","C","D")))
glimpse(toy_data3) # toy_data2 とは factor の順序が異なる
toy_data4 <- toy_data2 |>
  mutate(Y2 = factor(Y > 60)) # 条件による因子化
glimpse(toy_data4) # 条件の真偽で 2 値に類別される
```

練習問題

- 東京の気候データ (9-11 月) を用いて気温を回帰する以下のモデルを検討しなさい
  - 日射量，気圧，湿度の線形回帰モデル
  - 湿度の対数を考えた線形回帰モデル
  - 最初のモデルにそれぞれの交互作用を加えたモデル
- 東京の気候データ (1 年分) を用いて気温を回帰する以下のモデルを検討しなさい
  - 降水の有無を表すカテゴリカル変数を用いたモデル
    (雨が降ると気温が変化することを検証する)
  - 上記に月をカテゴリカル変数として加えたモデル
    (月毎の気温の差を考慮する)

補足

R：モデルの探索

- 変数が増えるとモデルの比較が困難
- 関数 stats::step() で自動化することができる

```r
#' モデルの探索
adv_data <- read_csv('https://www.statlearning.com/s/Advertising.csv')
summary(lm(sales ~ radio, data = adv_data))
summary(lm(sales ~ TV + radio, data = adv_data))
summary(lm(sales ~ TV + radio + newspaper, data = adv_data))
summary(adv_init <- lm(sales ~ TV * radio * newspaper, data = adv_data))
adv_opt <- step(adv_init) # 最大のモデルから削減増加による探索
summary(adv_opt) # 探索された (準) 最適なモデルの確認
```

  - 全探索ではないので最適とは限らないことに注意は必要

R：package::car

- 回帰モデルの評価
  - 与えられたデータの再現
  - 新しいデータの予測
- モデルの再構築のための視覚化
  - **residual plots**: 説明変数・予測値と残差の関係
  - **marginal-model plots**: 説明変数と目的変数・モデルの関係
  - **added-variable plots**: 説明変数・目的変数をその他の変数で回帰したときの残差の関係
  - **component+residual plots**: 説明変数とそれ以外の説明変数による残差の関係

  などが用意されている

例題

- これまでに用いたデータでモデルを更新して評価してみよう
  - 変数間の線形回帰の関係について仮説を立てる
  - モデルのあてはめを行い評価する
    - 説明力があるのか? (F 統計量，t 統計量，決定係数)
    - 残差に偏りはないか? (様々な診断プロット)
    - 変数間の線形関係は妥当か? (様々な診断プロット)
  - 検討結果を踏まえてモデルを更新する (評価の繰り返し)

次回の予定

- **第 1 回: 主成分分析の考え方**
- 第 2 回: 分析の評価と視覚化