

Appendix: Prediction interval

川田恵介

2025-06-18

1 Predictive interval: get started

1.1 予測問題まとめ

- 本講義の対象: 関心となる母集団からランダムサンプリングされているデータ $\{X, Y\}$ から、母集団における Y の平均事情誤差を最小化する予測モデル $g(X)$ を推定する
 - ▶ 本講義の推奨: 複数のアルゴリズムから生成された予測値の集計 (Stacking) を使用

1.2 おすすめ学習法

- “使いたい内容”の利点/欠点/射程を理解するために、“少し発展的”な論点まで学ぶ
 - ▶ 本スライドでは、Conformal prediction (Angelopoulos and Bates, 2021; Angelopoulos, Barber and Bates, 2024) を紹介
 - Hot issue 実務での活用も有望?
 - “個人効果の推論”にも応用される (Lei and Candès, 2021)

1.3 Residual score 法

1. データをランダムに 2 分割 (Training/Test)
 2. Training データを用いて、予測モデル $g(X)$ を推定
 3. Test データを用いて、予測誤差の絶対値 $|y - g(x)|$ を計算
 4. $q = |y - g(x)|$ の上位 $\alpha\%$ 、を計算
 5. Prediction interval $[g(X) - q, g(X) + q]$ を算出
- $1 - \alpha\%$ の確率で当たる”予測範囲” (Prediction interval)

1.4 実例

- 賃金 を、ethnicity のみから予測するモデルを推定
 - ▶ 事例数は十分であるので、母平均 $E[Wage \mid ethnicity] \simeq$ データ上の平均
 - Confidence interval も容易に計算できる

- ▶ Residual score 法も容易に実装可能

1.5 実例: Prediction interval

```
library(tidyverse)

data("CPS1985", package = "AER")

group <- sample(1:2, nrow(CPS1985), replace = TRUE)

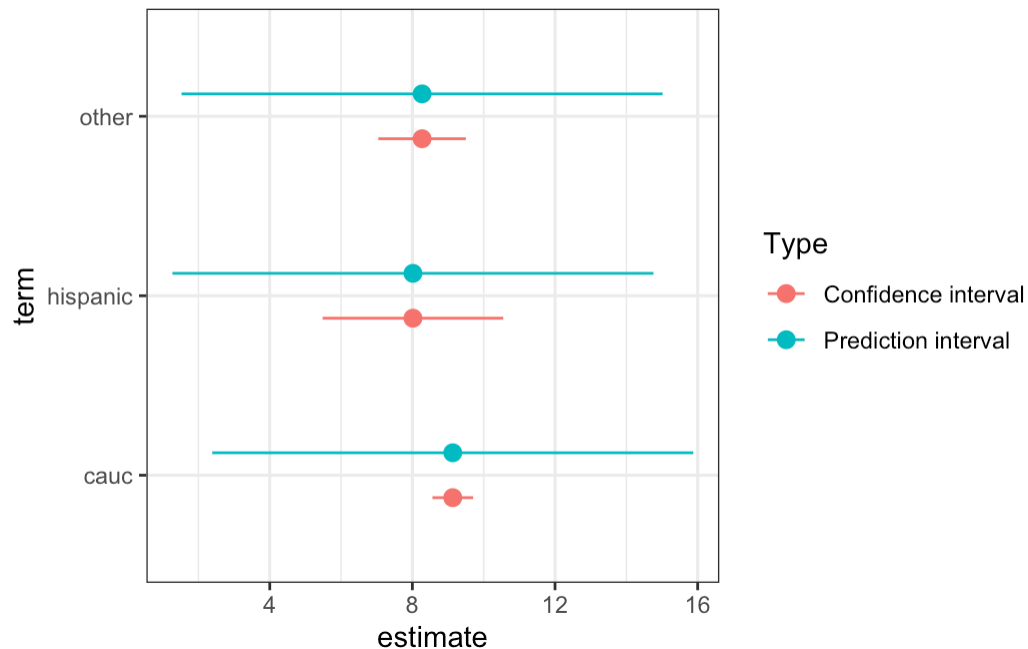
predict <- lm(wage ~ ethnicity,
  CPS1985,
  subset = group == 1) |>
  predict(CPS1985)

res <- abs(CPS1985$wage - predict)

Q <- quantile(res[group == 2], probs = 0.9)

Lower <- predict - Q
Upper <- predict + Q
```

1.6 実例: Confidence VS Prediction interval



1.7 練習問題

- なぜ Confidence interval と Prediction interval は、大きく異なるのか？

- ▶ ヒント: 捉えている不確実性が異なる

2 予測誤差 VS 推定誤差

2.1 予測モデルの推定

- 平均二乗誤差で予測性能を測定するのであれば、最善の予測モデルは母平均 $E[Y | X]$

$$Y - g(X) = \underbrace{Y - E[Y | X]}_{\text{予測誤差}} + \underbrace{E[Y | X] - g(X)}_{\text{Irreducible error} + \text{Estimation error}}$$

- “最善の”予測モデルの推定においては、Irreducible な部分は無視できる (せざる得ない)
 - ▶ 伝統的な計量経済学の教科書で紹介される”母平均の推定問題”に落としこめる

2.2 統計的推論

- Confidence interval: 母平均 $E[Y | X]$ を、概ね含む区間
 - ▶ Estimation error を評価
 - ▶ 少なくとも母平均のシンプルな要約については、方法が確立されている
- Prediction interval: 予測対象 Y を、概ね含む区間
 - ▶ Irreducible error も含めて評価する必要がある

2.3 平均的な予測誤差の限界

- 予測モデル の性能評価法として、テストデータにおける平均二乗誤差:

$$(Y - g_Y(X))^2 \text{ のテストデータにおける平均}$$

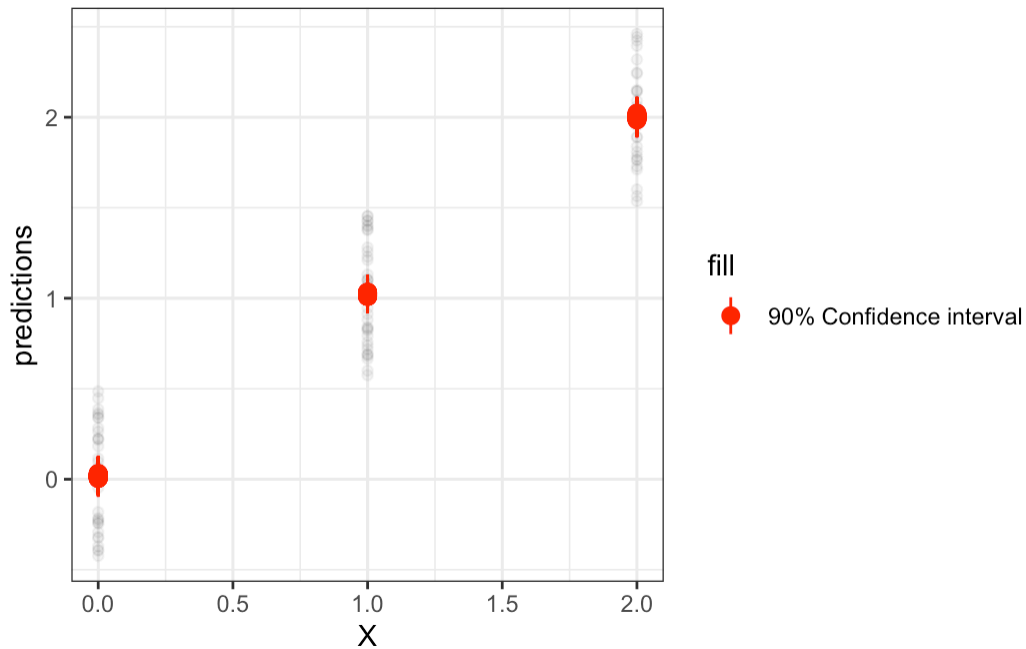
を紹介

- あくまでモデルの「平均的な予測性能」の評価
 - ▶ 「平均二乗誤差がほぼ”0”であれば」→「ほぼ当たる予測」
 - ▶ それ以外の場合はよくわからない

2.4 数値例

- $E[Y | X] = X$
 - ▶ $Y - E[Y | X] \sim \text{Uniform}(-0.5, 0.5)$
 - ▶ $X = \{0, 1, 2\}$

2.5 数値例



- Irreducible error が大きく、予測誤差は大きい
 - ▶ 90 % 以上の事例が、信頼区間の外部に存在

2.6 目標

- Y の母分布の一定割合 (例えば90%) を含む区間を計算したい
 - ▶ 多様な計算方法が提案
 - Residual score 法はその一つ
 - 他には Quantile regression を活用した方法など (Angelopoulos, Barber and Bates, 2024)

2.7 練習問題

- ランダムサンプリングデータであれば、事例数が無限大のデータで算出した Confidence interval の幅は 0
 - ▶ Prediction interval は?
 - なぜ?

2.8 Reference

Bibliography

Angelopoulos, A.N. and Bates, S. (2021) “A gentle introduction to conformal prediction and distribution-free uncertainty quantification,” arXiv preprint arXiv:2107.07511 [Preprint].

Angelopoulos, A.N., Barber, R.F. and Bates, S. (2024) Theoretical Foundations of Conformal Prediction. Available at: <https://arxiv.org/abs/2411.11824>.

Lei, L. and Candès, E.J. (2021) “Conformal inference of counterfactuals and individual treatment effects,” *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 83(5), pp. 911–938.