データ解析

Rによる多変量解析入門

(6) 回帰分析(III)

lec20021114 下平英寿 shimo@is.titech.ac.jp

信頼領域

回帰係数の推定量と残差の分布

- モデル(p)

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} \sim N_n(\boldsymbol{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I}_n)$$

$$\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \ldots, \beta_p]'$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}, \quad \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}, \quad \boldsymbol{e} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}$$

- 以下の二つの確率変数は互いに独立

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}}{\sigma} \sim N_{p+1}(\boldsymbol{0}, (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}), \quad \frac{\|\boldsymbol{e}\|^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

回帰係数の線形変換の分布

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim N_{p+1}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1})$$

任意の $a \times (p+1)$ **行列** A **を使って**

$$\hat{\boldsymbol{w}} = \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

の平均と分散は

$$E(\hat{\boldsymbol{w}}) = E(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{A}E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\beta}$$

$$V(\hat{\boldsymbol{w}}) = E\left\{(\hat{\boldsymbol{w}} - E(\hat{\boldsymbol{w}}))(\hat{\boldsymbol{w}} - E(\hat{\boldsymbol{w}}))'\right\}$$

$$= E\left\{\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{A}'\right\} = \sigma^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{A}'$$

とくに $X = QR$ **とQR分解して** $A = R$**,** $\gamma = R\beta$ **とおくと**

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{R}')^{-1}\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{I}_{p+1}$$

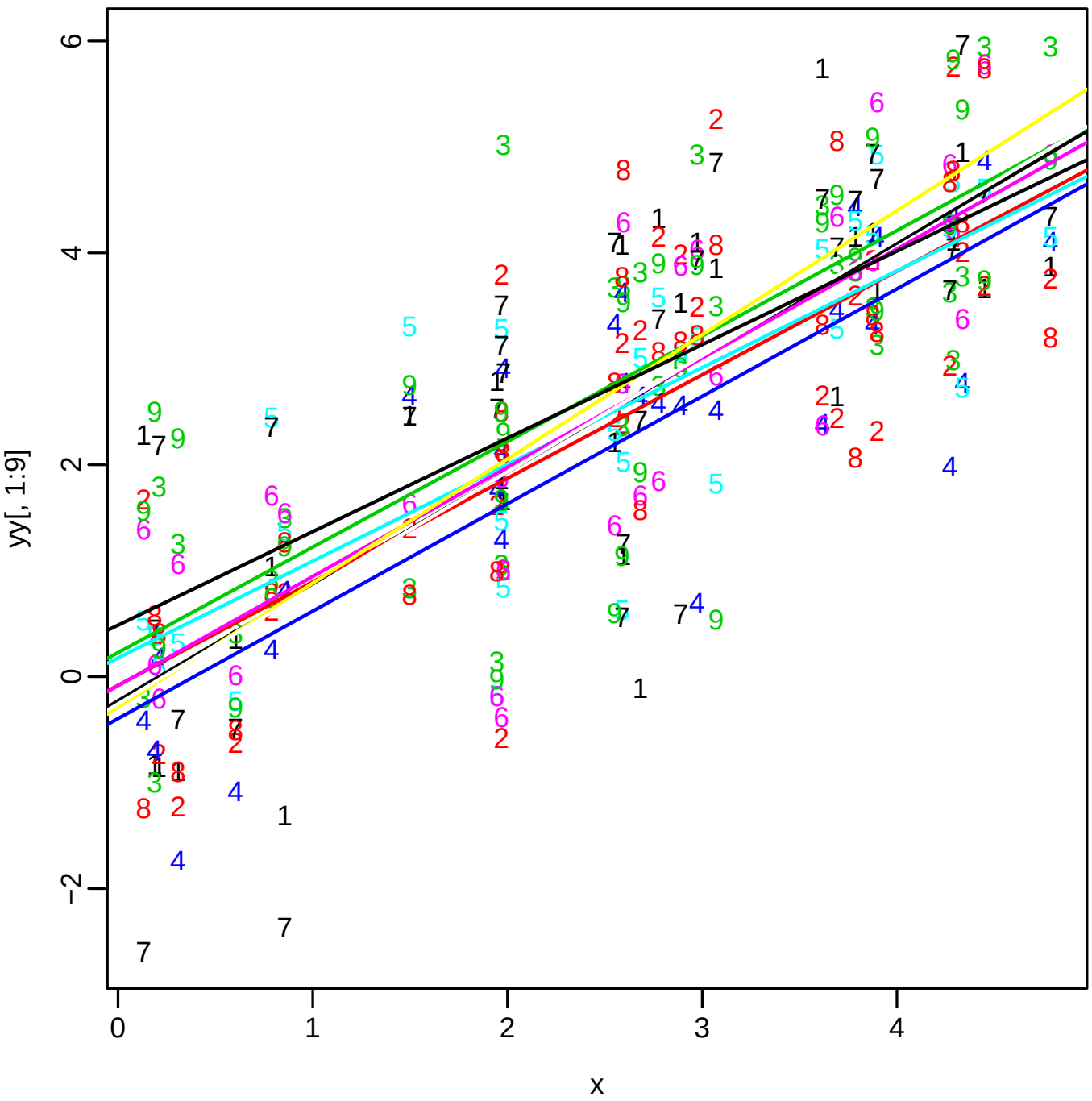
$$\frac{\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}}{\sigma} = \frac{\boldsymbol{R}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})}{\sigma} \sim N_{p+1}(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_{p+1})$$

数値例

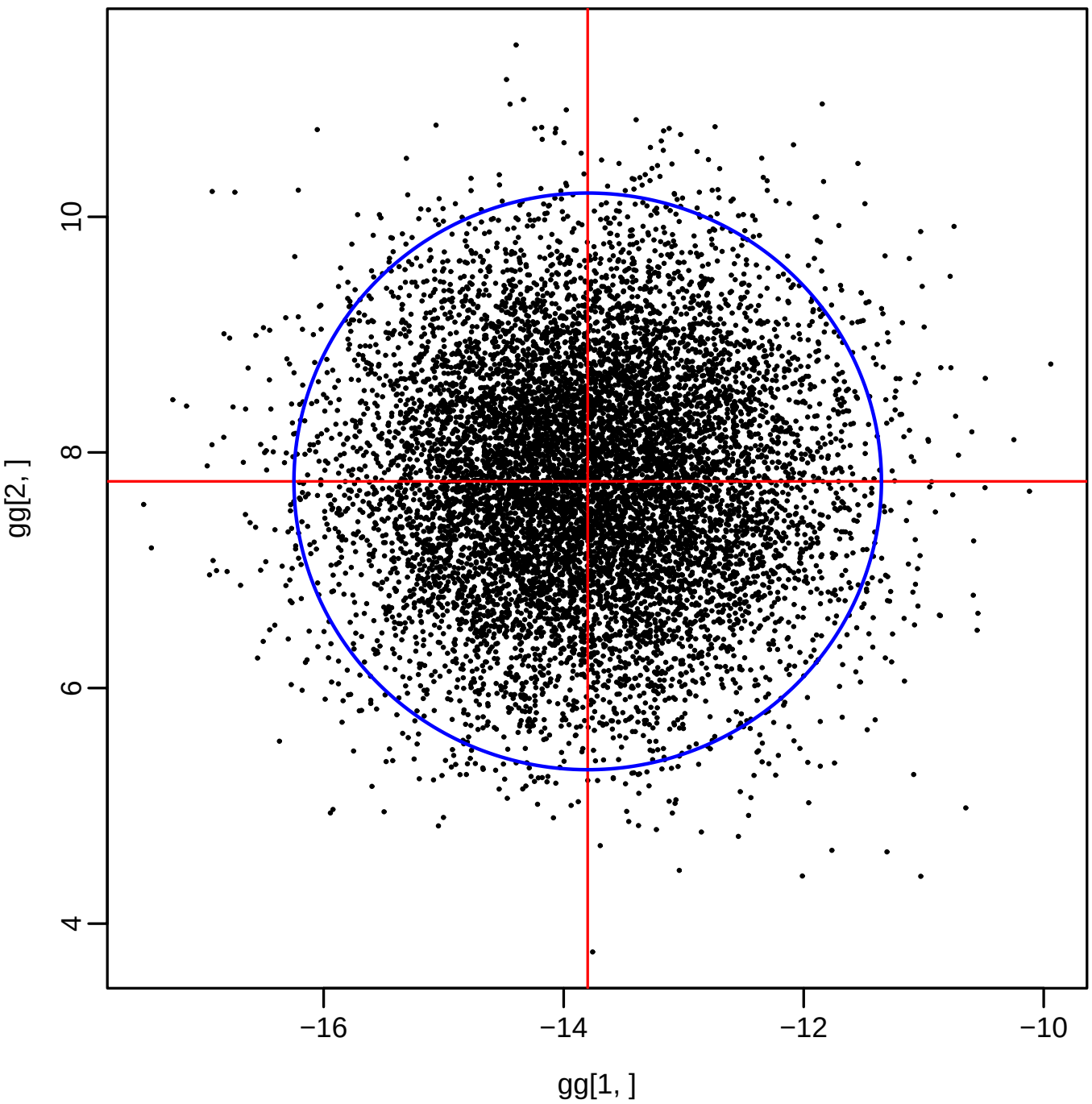
```
> ## シミュレーションデータの準備
> n <- 30  # データ数 n = 30
> B <- 10000 # シミュレーション数 B = 10000
> x <- runif(n,min=0,max=5)  # x ~ U(0,5)をn個生成
> y <- x # 理論式を y = x とする
> sd0 <- 1
> ee <- matrix(rnorm(n*B,mean=0,sd=sd0),n) # 誤差をN(0,1)とする.
> yy <- y + ee  # y = x + e
> ## QR分解
> x1 <- cbind(1,x) # データ行列
> q1 <- qr(x1)
> Q1 <- qr.Q(q1) # Q行列
> R1 <- qr.R(q1) # R行列
> IR1 <- solve(R1) # Rの逆行列
> ## 真の係数
> b0 <- c(0,1) # 真の回帰係数
> g0 <- R1 %*% b0 # 真の直交化した回帰係数
> ## 回帰係数の推定
```

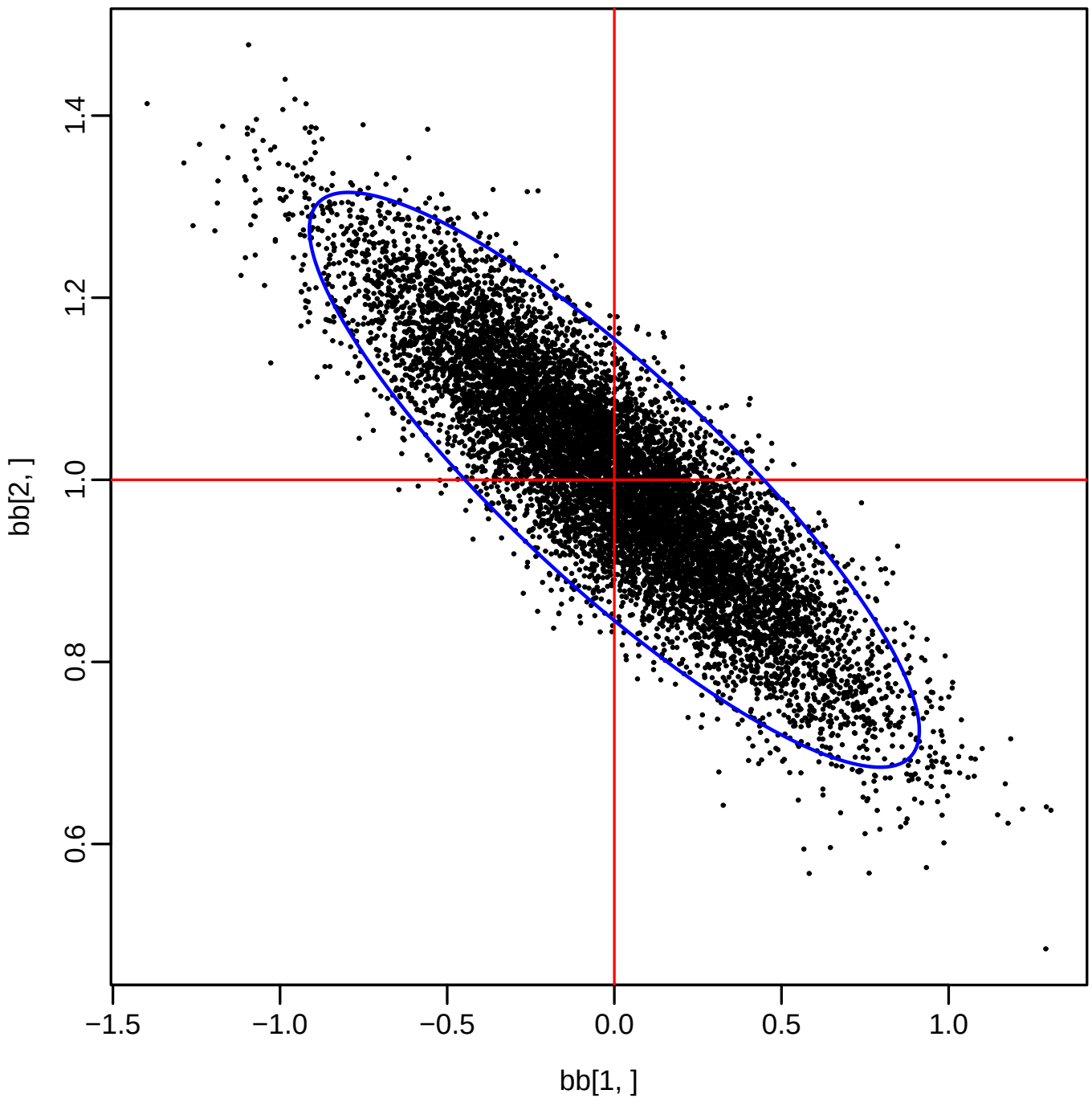
```
> gg <- t(Q1) %*% yy # 直交化した係数γの推定
> bb <- IR1 %*% gg # 回帰係数βの推定
> ## 最初のデータセット
> round(rbind(x,yy[,1]),2)
  [,1] [,2]  [,3]  [,4] [,5]  [,6] [,7] [,8] [,9] [,10] [,11] [,12] [,13] [,1
x 1.98 0.13  0.86  0.31 4.45  0.19 2.89 2.60 2.97  4.34  3.62  4.79  3.07  4.
  1.67 2.28 -1.31 -0.89 3.66 -0.83 3.53 1.15 4.10  4.95  5.75  3.87  3.86  4.
  [,15] [,16] [,17] [,18] [,19] [,20] [,21] [,22] [,23] [,24] [,25] [,26] [,2
x  2.78  4.27  1.97  3.90  2.55  0.21  1.95  3.79  3.69  2.68  0.60  1.50  1.
   4.33  4.29  1.80  3.65  2.21 -0.85  2.79  4.15  2.65 -0.10  0.35  2.47  1.
  [,28] [,29] [,30]
x  2.59  0.79  3.88
   4.07  1.04  4.19
> bb[,1]
                     x
-0.2268940  1.0802004
> ## ２番目のデータセット
> round(rbind(x,yy[,2]),2)
  [,1] [,2] [,3]  [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10] [,11] [,12] [,13] [,14]
```

```
x 1.98 0.13 0.86  0.31 4.45 0.19 2.89 2.60 2.97  4.34  3.62  4.79  3.07  4.29
  1.01 1.68 0.79 -1.23 3.69 0.40 3.98 2.39 3.50  4.01  2.65  3.76  5.27  5.76
  [,15] [,16] [,17] [,18] [,19] [,20] [,21] [,22] [,23] [,24] [,25] [,26] [,2
x  2.78  4.27  1.97  3.90  2.55  0.21  1.95  3.79  3.69  2.68  0.60   1.5  1.
   4.15  2.93  3.80  2.32  2.45 -0.73  1.62  3.60  2.45  3.27 -0.62   1.4 -0.
  [,28] [,29] [,30]
x  2.59  0.79  3.88
   3.15  0.63  3.93
> bb[,2]
                          x
-0.08195452  0.97730787
> ## 最初の９個のデータセットの散布図
> matplot(x,yy[,1:9])
> for(k in 1:9) abline(bb[,k],col=k,lwd=2)
```


yy[, 1:9]
x
6
4
2
0
−2
0
1
2
3
4

```
> ## 散布図1
> plot(gg[1,],gg[2,])
> abline(v=g0[1],col=2)
> abline(h=g0[2],col=2)
> r <- sd0*sqrt(qchisq(0.95,length(b0)))  # 誤差のsd=1に注意
> r
[1] 2.447747
> i <- seq(0,2*pi,length=300)
> lines(cbind(g0[1]+r*cos(i),g0[2]+r*sin(i)),col=4,lwd=2)
> ## 確率
> rr <- apply(gg,2,function(v) sqrt(sum((v-g0)^2)))
> sum(rr<=r)
[1] 9520
> ## 散布図2
> plot(bb[1,],bb[2,])
> abline(v=b0[1],col=2)
> abline(h=b0[2],col=2)
> lines(cbind(g0[1]+r*cos(i),g0[2]+r*sin(i)) %*% t(IR1),col=4,lwd=2)
```


gg[2,]
10
8
6
4
−16
−14
−12
−10
gg[1,]


bb[2,]
1.4
1.2
1.0
0.8
0.6
−1.5
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
bb[1,]

直交化した回帰係数からつくるF統計量

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\gamma}}-\boldsymbol{\gamma}}{\sigma} \sim N_{p+1}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I}_{p+1}), \qquad \frac{\|\hat{\boldsymbol{\gamma}}-\boldsymbol{\gamma}\|^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{p+1}$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\|\boldsymbol{e}\|^2}{n-p-1}, \qquad \frac{\|\boldsymbol{e}\|^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

$$\frac{\|\hat{\boldsymbol{\gamma}}-\boldsymbol{\gamma}\|^2}{(p+1)\hat{\sigma}^2} \sim F_{p+1,n-p-1}$$

$$\Pr\left\{\frac{\|\hat{\boldsymbol{\gamma}}-\boldsymbol{\gamma}\|^2}{(p+1)\hat{\sigma}^2} \leq F^{\alpha}_{p+1,n-p-1}\right\} = 1-\alpha$$

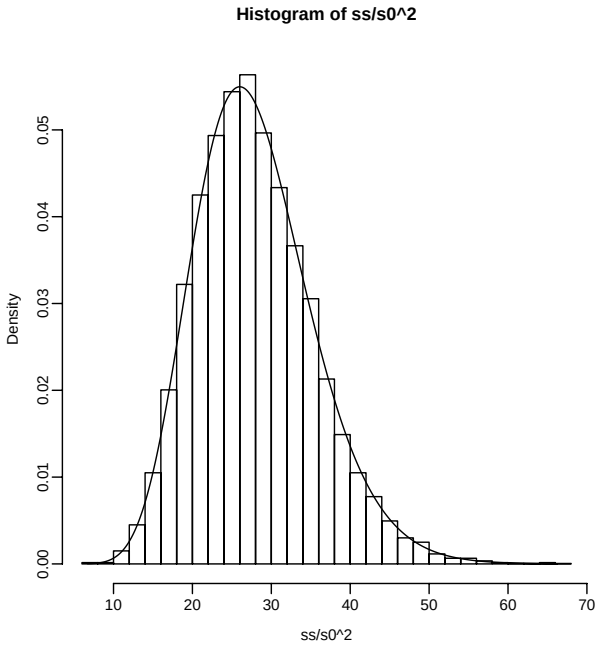
ただし$F^{\alpha}_{p+1,n-p-1}$は自由度$(p+1, n-p-1)$のF分布の上側α点

$$\Pr\left\{Y > F^{\alpha}_{p+1,n-p-1}\right\} = \alpha, \qquad 0 < \alpha < 1$$

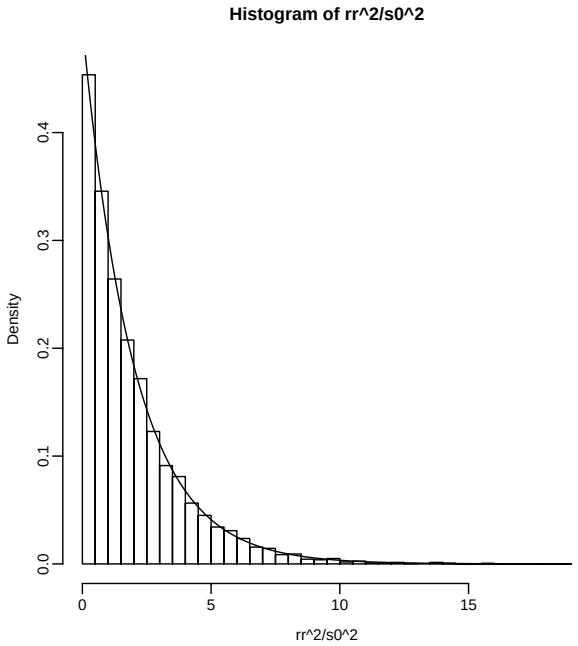
数値例

```
> ## 残差平方和の分布
> zz <- yy - x1 %*% bb # 残差
> ss <- apply(zz,2,function(v) sum(v*v)) # 残差平方和
> hist(ss/s0^2,breaks=30,prob=T)
> j1 <- seq(min(ss/s0^2),max(ss/s0^2),length=300)
> lines(j1,dchisq(j1,n-length(b0)))
> ## 係数の中心からの二乗和の分布
> hist(rr^2/s0^2,breaks=30,prob=T)
> j2 <- seq(min(rr^2/s0^2),max(rr^2/s0^2),length=300)
> lines(j2,dchisq(j2,length(b0)))
> ## F統計量の分布
> ff <- (rr^2/length(b0))/(ss/(n-length(b0)))
> hist(ff,breaks=30,prob=T)
> j3 <- seq(min(ff),max(ff),length=300)
> lines(j3,df(j3,length(b0),n-length(b0)))
> f0 <- qf(0.95,length(b0),n-length(b0))
> f0
[1] 3.340386
```

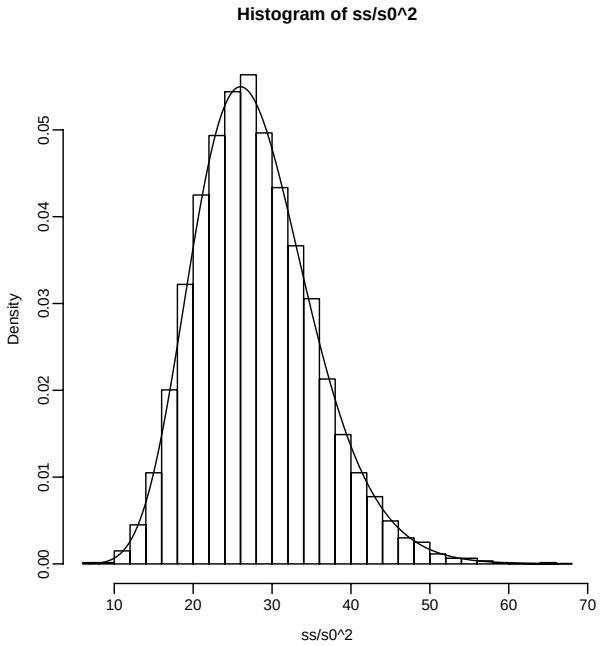
```
> sum(ff>f0)
[1] 487
```



χ^2_{28}



χ^2_2



$F_{2,28}$

回帰係数の信頼領域

$$C_{\boldsymbol{\gamma}}^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\gamma}}, \hat{\sigma}^2) = \left\{ \boldsymbol{\gamma} : \|\boldsymbol{\gamma} - \hat{\boldsymbol{\gamma}}\| \leq \hat{\sigma} \sqrt{(p+1) F_{p+1,n-p-1}^{\alpha}} \right\}$$

$$\Pr\left\{ \boldsymbol{\gamma} \in C_{\boldsymbol{\gamma}}^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\gamma}}, \hat{\sigma}^2) \right\} = 1 - \alpha$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta}$$

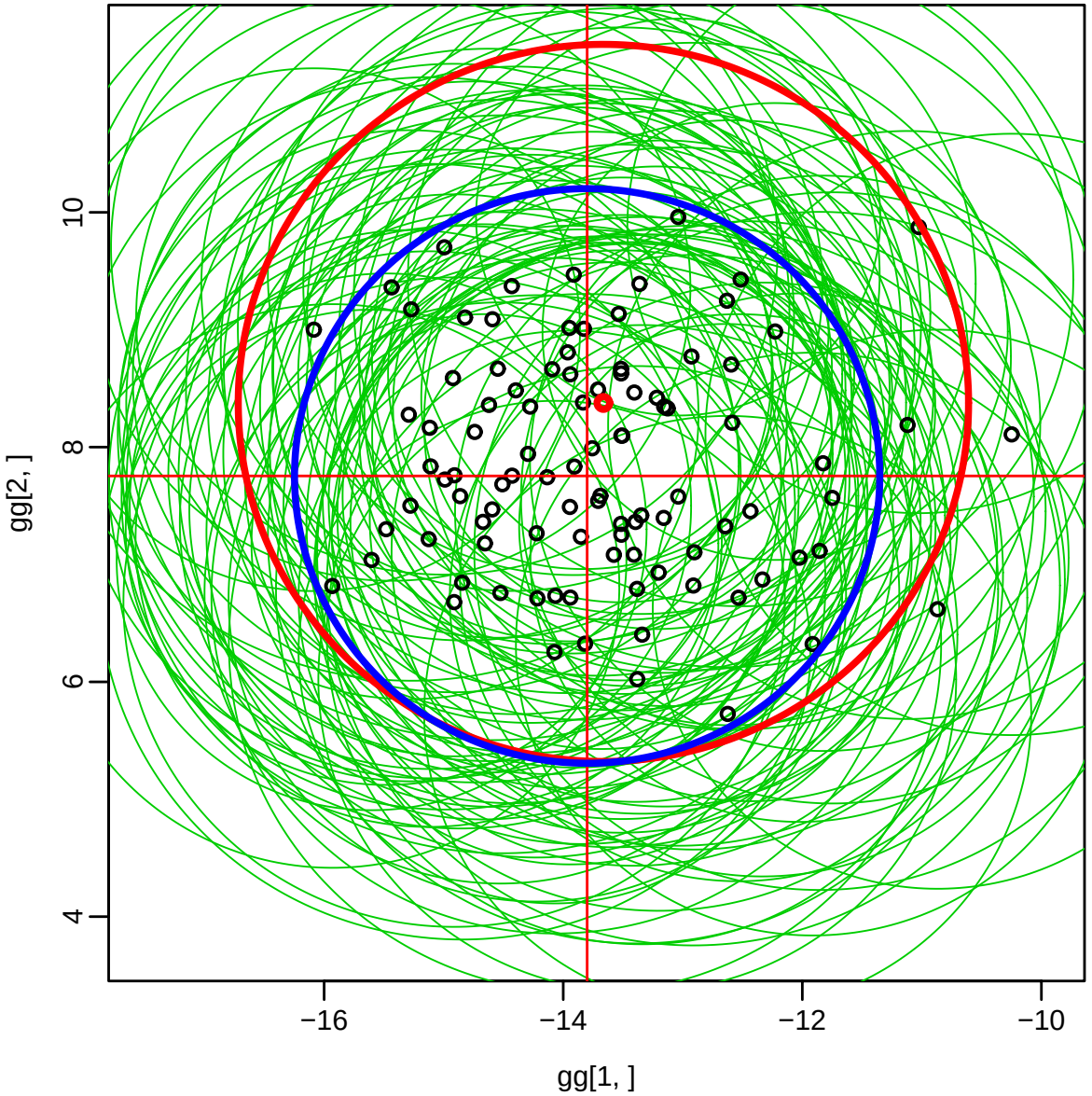
$$C_{\boldsymbol{\beta}}^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) = \left\{ \boldsymbol{\beta} : \frac{(\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})(\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})}{\hat{\sigma}^2} \leq (p+1) F_{p+1,n-p-1}^{\alpha} \right\}$$

$$\Pr\left\{ \boldsymbol{\beta} \in C_{\boldsymbol{\beta}}^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) \right\} = 1 - \alpha$$

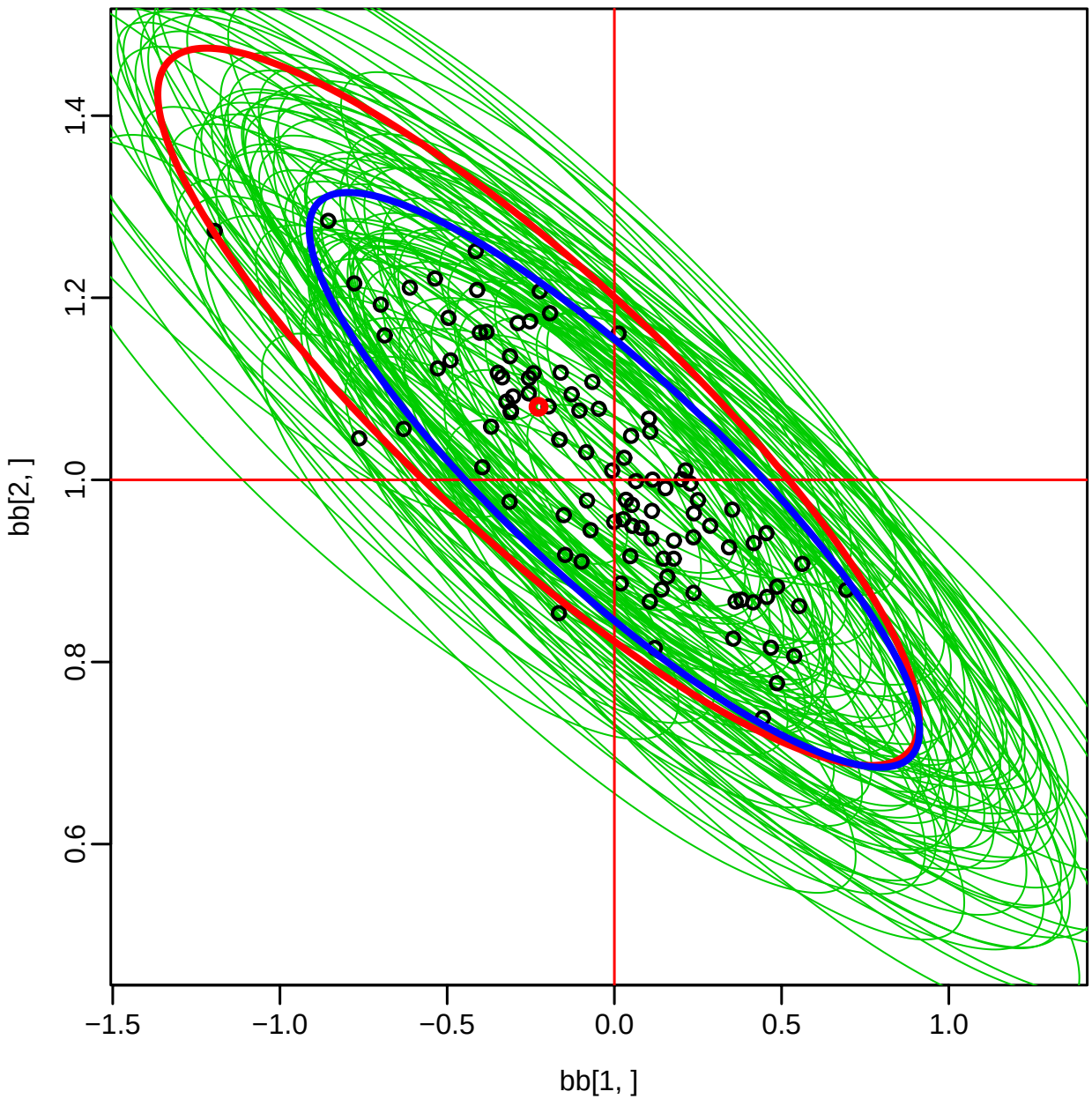
数値例

```
> ## 散布図３
> f0 <- qf(0.95,length(b0),n-length(b0)) # F分布の上側5%点
> rr0 <- sqrt(length(b0)*f0*(ss/(n-length(b0)))) # 信頼区間の半径
> sum(rr <= rr0)
[1] 9513
> sum(rr > rr0)
[1] 487
> a <- 1:100 # 最初の100点だけプロット
> sum(rr[a] > rr0[a])
[1] 7
> sum(rr[a] > r)
[1] 5
> plot(gg[1,],gg[2,],type="n") # まず座標軸だけ書く
> for(k in a) lines(cbind(gg[1,k]+rr0[k]*cos(i),gg[2,k]+rr0[k]*sin(i)),col=3,
> points(gg[1,a],gg[2,a],lwd=2)
> points(gg[1,1],gg[2,1],col=2,lwd=4) # 最初の１点だけ太く
> lines(cbind(gg[1,1]+rr0[1]*cos(i),gg[2,1]+rr0[1]*sin(i)),col=2,lwd=4)
> abline(v=g0[1],col=2) # 真のパラメタ値にクロスを書きそのまわりにサークル
```

```
> abline(h=g0[2],col=2)
> lines(cbind(g0[1]+r*cos(i),g0[2]+r*sin(i)),col=4,lwd=4)
```



```
> ## 散布図４
> plot(bb[1,],bb[2,],type="n") # まず座標軸だけ書く
> for(k in a) lines(cbind(gg[1,k]+rr0[k]*cos(i),
+  gg[2,k]+rr0[k]*sin(i)) %*% t(IR1),col=3,lwd=1)
> points(bb[1,a],bb[2,a],lwd=2)
> points(bb[1,1],bb[2,1],col=2,lwd=4) # 最初の１点だけ太く
> lines(cbind(gg[1,1]+rr0[1]*cos(i),gg[2,1]+rr0[1]*sin(i)) %*% t(IR1),
+   col=2,lwd=4)
> abline(v=b0[1],col=2) # 真のパラメタ値にクロスを書きそのまわりにサークル
> abline(h=b0[2],col=2)
> lines(cbind(g0[1]+r*cos(i),g0[2]+r*sin(i)) %*% t(IR1),col=4,lwd=4)
```


bb[2,]
1.4
1.2
1.0
0.8
0.6
−1.5
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
bb[1,]

回帰係数の線形変換の同時信頼区間

$$w = \boldsymbol{a}'\boldsymbol{\beta}$$

$$C_w^{*1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) = \left\{ w : w = \boldsymbol{a}'\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta} \in C_{\boldsymbol{\beta}}^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) \right\}$$

$$\Pr\left\{ w \in C_w^{*1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) \right\} \geq 1 - \alpha$$

$$w = \boldsymbol{a}'\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{b}'\boldsymbol{\gamma}$$

シュバルツ(Schwarz)の不等式

$$|w - \hat{w}| = |\boldsymbol{b}'(\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma})| \leq \|\boldsymbol{b}\| \cdot \|\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}\|$$

で等号はbと$\hat{\gamma} - \gamma$が平行のときのみ． $\|b\| = \sqrt{\boldsymbol{a}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{a}}$

$$C_w^{*1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) = \left\{ w : |w - \hat{w}| \leq \|\boldsymbol{b}\| \hat{\sigma} \sqrt{(p+1) F_{p+1,n-p-1}^{\alpha}} \right\}$$

回帰係数の線形結合の信頼区間

$$w = \boldsymbol{a}'\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{b}'\boldsymbol{\gamma}$$

$$\widehat{w} = \boldsymbol{a}'\hat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{b}'\hat{\boldsymbol{\gamma}} \sim N(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\|\boldsymbol{b}\|^2)$$

$$\frac{\|\widehat{w} - w\|^2}{\widehat{\sigma}^2\|\boldsymbol{b}\|^2} \sim F_{1,n-p-1}, \qquad \frac{\widehat{w} - w}{\widehat{\sigma}\|\boldsymbol{b}\|} \sim t_{n-p-1}$$

$$C_w^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \widehat{\sigma}^2) = \left\{ w : |w - \widehat{w}| \leq \|\boldsymbol{b}\|\widehat{\sigma}\sqrt{F_{1,n-p-1}^{\alpha}} \right\}$$

$$\mathsf{Pr}\left\{ w \in C_w^{1-\alpha}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \widehat{\sigma}^2) \right\} = 1 - \alpha$$

回帰直線(曲面)の信頼領域

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}$$

$$s^2 = \hat{\sigma}^2 \boldsymbol{x}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{x}$$

$$C^{*1-\alpha}_{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) = \left\{ \boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta} : |\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{x}'\hat{\boldsymbol{\beta}}| \leq s\sqrt{(p+1)F^{\alpha}_{p+1,n-p-1}} \right\}$$

$$C^{1-\alpha}_{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) = \left\{ \boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta} : |\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{x}'\hat{\boldsymbol{\beta}}| \leq s\sqrt{F^{\alpha}_{1,n-p-1}} \right\}$$

$$C^{1-\alpha}_{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) \subset C^{*1-\alpha}_{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2)$$

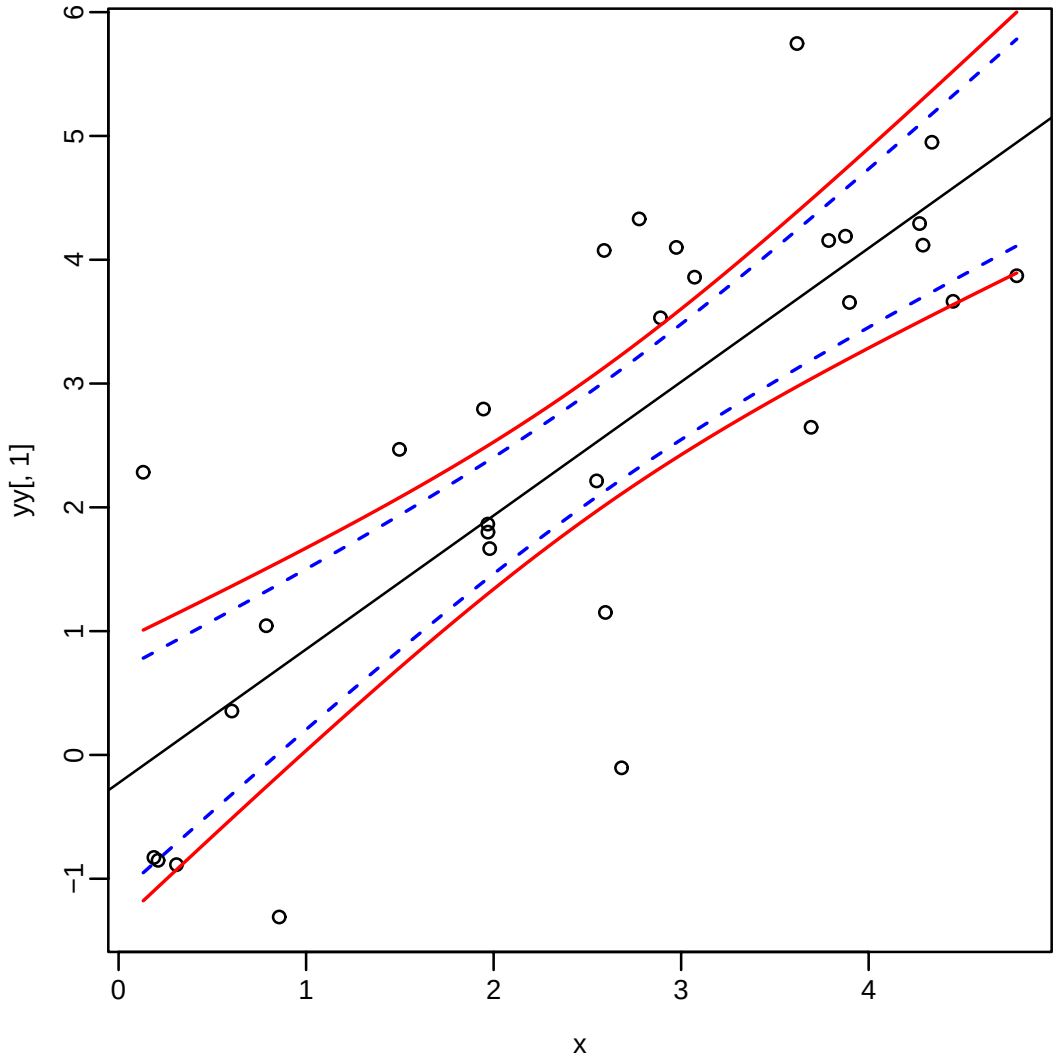
$$\mathrm{Pr}\left\{ \boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta} \in C^{*1-\alpha}_{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2), \forall \boldsymbol{x} \right\} = 1 - \alpha$$

$$\mathrm{Pr}\left\{ \boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta} \in C^{1-\alpha}_{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma}^2) \right\} = 1 - \alpha, \quad \forall \boldsymbol{x}$$

数値例

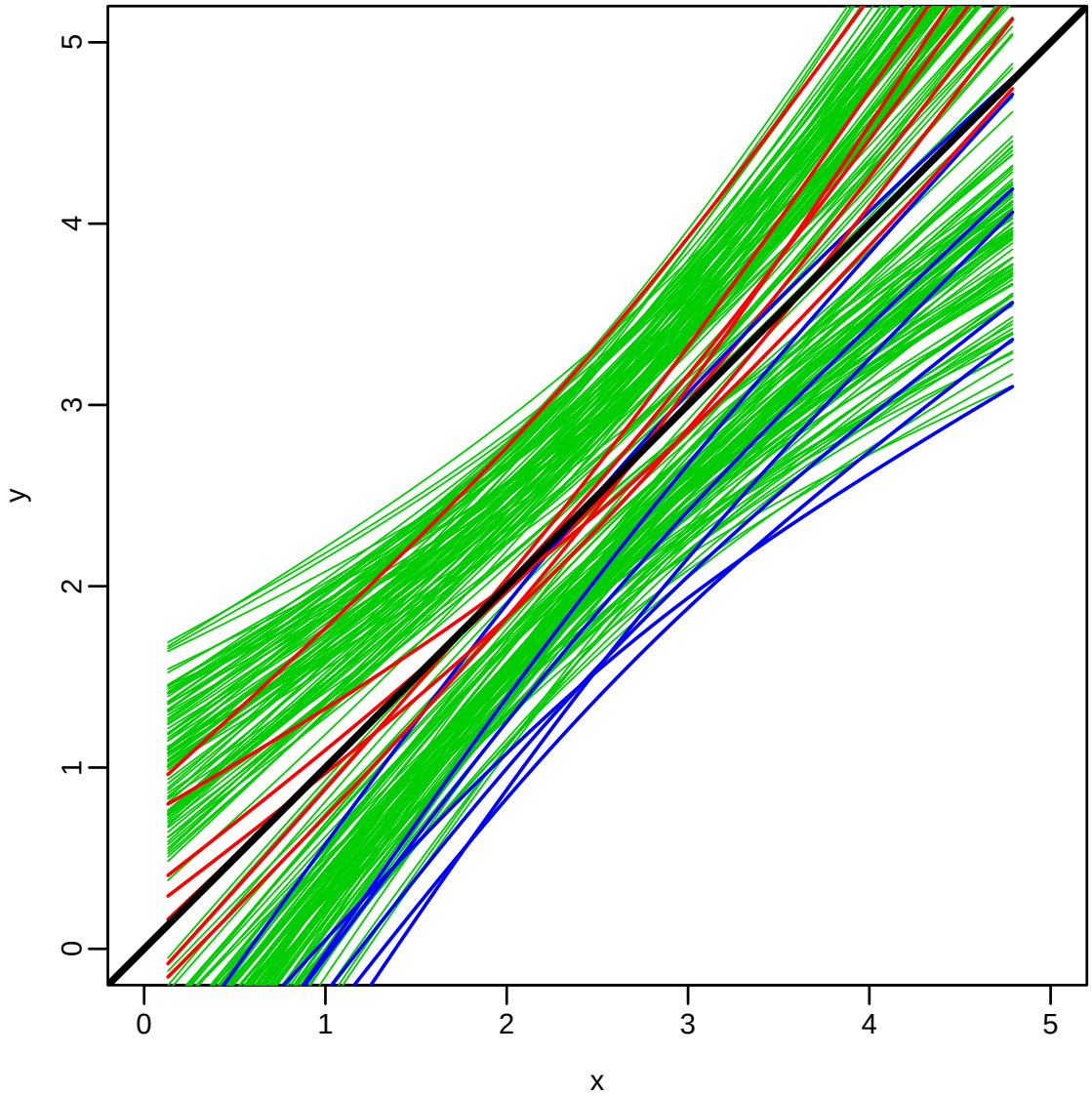
```
> ## 回帰直線の信頼領域（最初のデータセット）
> ss[1]/(n-length(b0)) # 誤差分散の推定
[1] 1.396646
> jx <- seq(min(x),max(x),length=300) # xの範囲を等分割
> jx1 <- cbind(1,jx)
> jy <- jx1 %*% bb[,1] # 回帰直線のyの計算
> jss <- apply(jx1 %*% IR1,1,function(v)sum(v*v))
> js <- sqrt(jss*ss[1]/(n-length(b0))) # yの標準誤差
> a1 <- sqrt(length(b0)*qf(0.95,length(b0),n-length(b0))) # 同時信頼区間
> a1
[1] 2.584719
> a2 <- sqrt(qf(0.95,1,n-length(b0))) # 信頼区間
> a2
[1] 2.048407
> ## 散布図に回帰直線と信頼区間を書く
> plot(x,yy[,1]) # データ
> abline(bb[,1]) # 回帰直線
> lines(jx,jy+js*a1,col=2,lwd=2) #  95%同時信頼区間(上側)
```

```
> lines(jx,jy-js*a1,col=2,lwd=2) #  95%同時信頼区間(下側)
> lines(jx,jy+js*a2,col=4,lty=2,lwd=2) # 95%信頼区間（上側）
> lines(jx,jy-js*a2,col=4,lty=2,lwd=2) # 95%信頼区間（下側）
```



```
> ## 同時信頼区間と普通の信頼区間の違い
> jyy <- jx1 %*% bb # 回帰直線のyの計算をxの３００点について計算
> dim(jyy)
[1]   300 10000
> jdd <- abs(jyy - jx) # 真の回帰直線との差の絶対値
> jsss <- sqrt(jss %*% t(ss)/(n-length(b0))) # yの標準誤差
> dim(jsss)
[1]   300 10000
> sum(apply(jdd <= jsss*a1,2,all))/10000 # 同時信頼区間はすべてのxで同時
[1] 0.955
> sum(apply(jdd <= jsss*a2,2,all))/10000 # 普通の信頼区間は同時ではない
[1] 0.8688
> sum(jdd <= jsss*a1)/(300*10000) # 同時信頼区間は各xを個別に見ると保守的
[1] 0.9849633
> sum(jdd <= jsss*a2)/(300*10000) # 普通の信頼区間は各xを個別に見るとＯＫ
[1] 0.9509127
```

```
> ## 散布図５
> a <- (1:100)[apply(jdd[,1:100] > jsss[,1:100]*a1,2,any)]
> a
[1] 29 42 43 53 55 61 81
> plot(0,0,xlim=c(0,5),ylim=c(0,5),type="n",xlab="x",ylab="y")
> for(k in 1:100) { # 最初の１００データセット
+ lines(jx,jyy[,k]+jsss[,k]*a1,col=3,lwd=1) #  95%同時信頼区間(上側)
+ lines(jx,jyy[,k]-jsss[,k]*a1,col=3,lwd=1) #  95%同時信頼区間(下側)
+ }
> for(k in a) { #  同時信頼区間が真の回帰直線を含まないもの
+ lines(jx,jyy[,k]+jsss[,k]*a1,col=2,lwd=2)
+ lines(jx,jyy[,k]-jsss[,k]*a1,col=4,lwd=2)
+ }
> abline(b0,lwd=4) # 真の回帰直線
```


y
x
0
1
2
3
4
5

第６回 課題

１．信頼領域の計算で用いた

$$r_1(p) = \sqrt{(p+1)F^{\alpha}_{p+1,n-p-1}}, \qquad r_2(p) = \sqrt{F^{\alpha}_{1,n-p-1}}$$

について $n = 30, \alpha = 0.05$ **とおき，** $r_1(p)$ **と** $r_2(p)$ **を** $p = 0, 1, \ldots, 10$ **の範囲で計算せよ．** $r_1(p)$ **と** $r_2(p)$ **の比較をして違いを述べよ．それは回帰直線(曲面)の信頼領域についてどのような結果をもたらすか?**

２．雪日数(B02304)をx，最高気温(B02102)をyとする多項式回帰分析を次数 $p = 1, 2, 3$ **について行え．それぞれの次数についてx,yの散布図上に推定した回帰直線（曲線）とその95%同時信頼区間および95%信頼区間を重ねて描け．**