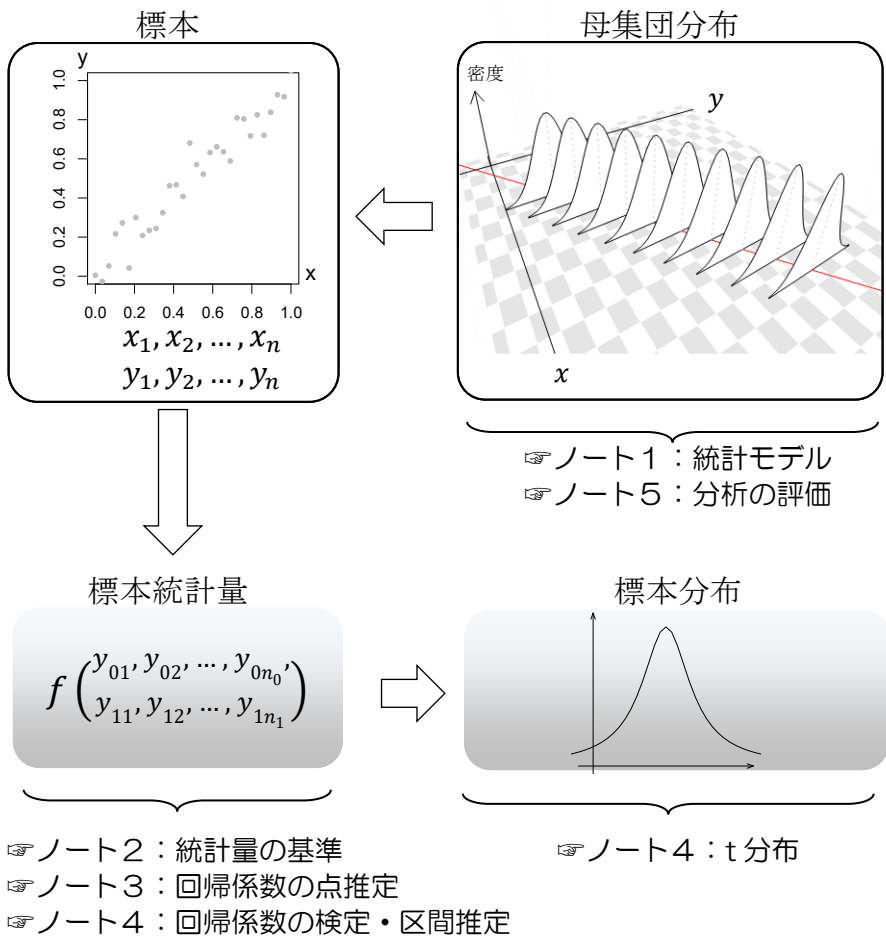


学習の目標

- 回帰モデルにおいて独立変数の数が複数含まれるものを重回帰モデルということが分かる。
- 回帰モデルを数式や図によって表現することができる。
- 研究者の興味や仮説に応じて母集団において柔軟なモデルを立てる意義ややり方についての基礎が理解できる。
- ある独立変数が別の変数を経由して従属変数に間接効果を持つとき仲介をなす変数を媒介変数ということが分かる。
- 複数の要因が連動して変化するためどちらに影響したか判断できない状況を交絡と呼ぶことが分かる。
- 調整変数の存在によって独立変数単体の主効果では説明できない交互作用効果が生じることがあることが分かる。
- 独立性の仮定を乱すクラスターを持つデータ構造に対して階層モデルを想定する必要性が理解できる。
- 重回帰モデルの各独立変数にかかる係数を偏回帰係数と呼び、その解釈の仕方を理解することができる。
- 独立変数にかかる係数の大きさを比較する手段として標準偏回帰係数を用いることの意義が分かる。
- 推定した回帰モデルのデータへの適合度を測る基準として重相関係数と決定係数を用いることができる。
- 重回帰式の検定および各偏回帰係数の検定、そして、信頼区間や予測区間についても理解をし、使用できる。
- 過学習、解釈可能性、多重共線性などの問題が懸念される際に、独立変数を選択しモデルの改良を行うことができる。
- 罰則を設けた最小二乗推定について理解することができ、ラッソ回帰を用いたモデル縮約を行うことができる。
- モデル比較の必要性を理解し、情報量基準やクロスバリデーションを用いてモデルを選択することができる。
- 多重共線性に解決の一つの対策として、主成分分析を援用し独立変数間の相関をゼロにしたモデルを提案できる。

見取り図



データの形式

ID	予測変数	応答変数
1	0.3	2.1
2	0.1	3.2
⋮	⋮	⋮
n	1.2	1.5

(1) 目的 (リサーチクエスチョン)

標本が採られてきていると想定される二種類の母集団の母平均 (期待値) に差があるかの否か、判断を下す。

(2) 考え方

標本の平均値の差の大きさが、標準誤差何個分なのかを計算して、平均値差の大きさを判断したいのだが、それは標本をものすごくたくさんとってヒストグラムを作らないと無理。

そこで、今回一回きりの標本から標準誤差の推定値を作り、「標本の平均値の差の大きさが、推定された標準誤差何個分なのか」を計算し、それを t 値と呼ぶ。「二つの母集団平均は完全に同じだ」という仮説が正しい時 t 値が従う標本分布が t 分布である。

t 値がこの t 分布のどこに位置しているのかを調べ、もし端の方に位置しているのなら「ありえないこと」が起きたと考え先の仮説を棄却する。

④ 点 | 線 | 面 と 平均

(1) 統計モデル

母集団に対する統計モデルを少しずつ複雑なものにしていくことで、細やかなモデルを提案することができる。

例1：二群の差の検定 (対応なしの t 検定)

↑
数式の上では
全く同じ構造
↓

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

← ガミ-変数

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

線

例2：単回帰分析

← この線を生む

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$



面

例3：重回帰分析

← この線と面を3つ!

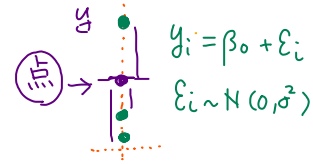
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

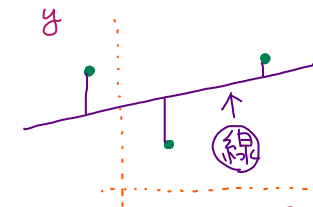
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{3i} + \dots + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

(1) 平均 (第二講)

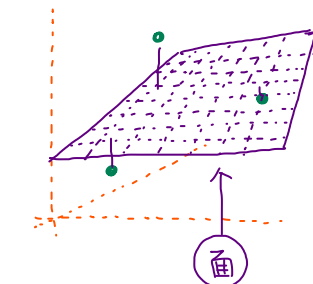


(2) 単回帰 (第四講)



(対応なし t 検定 第三講)

(3) 重回帰 (第五講)



④ 最小二乗基準

上の (1) ~ (3) は全て、
データとの「二乗距離」を
最小化に見つける
点 | 線 | 平面なのだ!

④ 添え字

独立変数を区別
するために、添え字を
用いる。

x_{1i} : 第1独立変数の
i番目の値

x_{26} : 第2独立変数の
6番目の値。

① パスモデルの練習

- (1) 変数
- 独立変数
 - 従属変数
 - 誤差変数
- : 観測変数
○ : 潜在変数

- (2) パス (Path)
- 左辺の変数 (予測される側)
↑
右辺の変数 (予測する側)

- (3) 分散
- その変数の分散
共分散
この独立変数の共分散

② 分散共分散行列

	x_1	x_2	x_3
x_1	$S_{x_1}^2$	$S_{x_1x_2}$	$S_{x_1x_3}$
x_2	$S_{x_1x_2}$	$S_{x_2}^2$	$S_{x_2x_3}$
x_3	$S_{x_1x_3}$	$S_{x_2x_3}$	$S_{x_3}^2$

→ 代わりに相関係数
 $r_{x_1x_2}$ などを用いると、
相関係数行列とち。

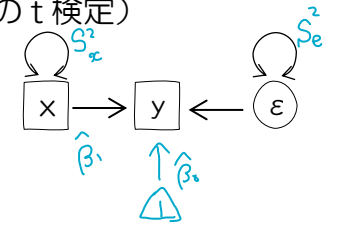
(2) 図による表現1: パスモデルとパス解析

これは、変数の関係を中心に発想する視覚的表現。

例1: 二群の差の検定 (対応なしの t 検定)

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

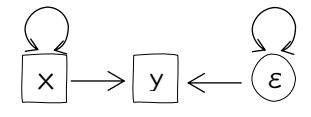
$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$



例2: 単回帰分析

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

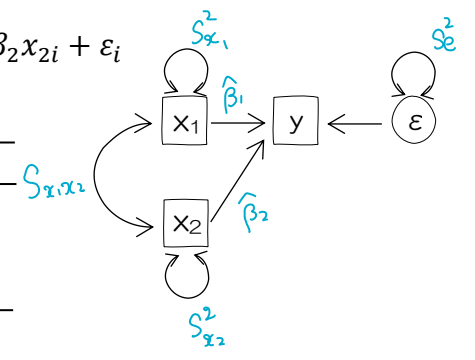


例3: 重回帰分析

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

	x_1	x_2
x_1	r_{11}	r_{12}
x_2	r_{21}	r_{22}

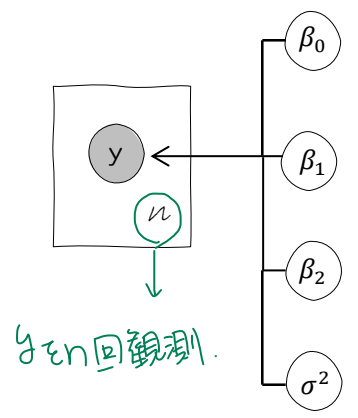


(3) 図による表現2: グラフィカルモデリング

これは、パラメータの関係を中心に発想する視覚的表現。

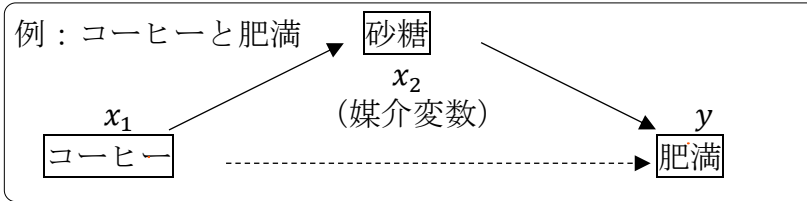
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$



📖 ノート2 母集団に対する仮定：発展的なモデル

(1) 媒介モデル Mediation Model



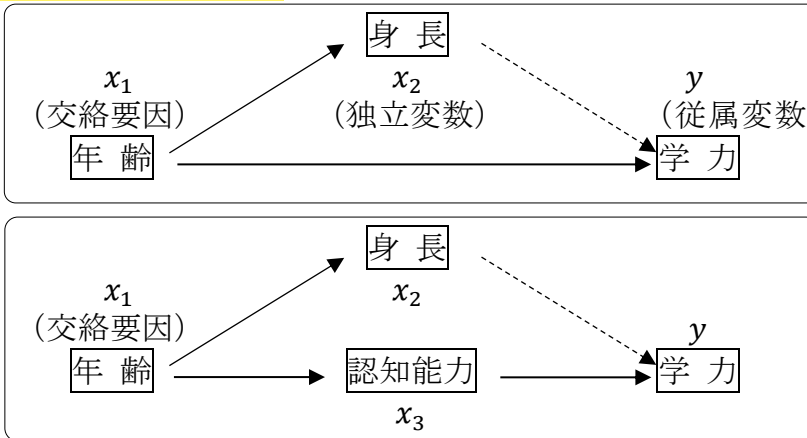
- ① 直接効果 Direct effects
独立変数から従属変数への直接的な影響の指標。
- ② 間接効果 Indirect effects
ある独立変数から別の変数(媒介変数/中間変数)を経由して従属変数に伝わる影響のこと。

(パート1) $y_i = \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$ ← 重回帰モデル

(パート2) $x_{2i} = \gamma_1 x_{1i} + u_i$ ← 媒介

↑
x2がx1の影響を受けてる

(2) 交絡要因/共通因子を持つモデル (多重共線性)



- ① 交絡 Confounding
二つ以上の要因が連動して変化するため、そのうちどれが結果に影響したかが判断できない状態になること。
- ② 交絡変数 Confounding variables
独立変数 x_2 の上流側にある、独立変数 x_2 と目的変数 y の両者に影響をもたらす要因のこと。

④ 媒介モデル

(モデル1) 単回帰モデル

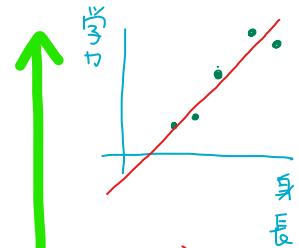


(モデル2) 媒介モデル

- ① コーヒー自体は肥満に無関係
- ② 砂糖の効果が

④ 交絡要因

(モデル1) 単回帰



身長が高いと学力が高くなる。

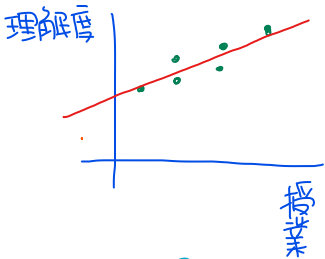
(モデル2) 交絡要因あり

- ① 年齢が上がるほど学力は高くなる。
- ② 年齢を考慮に入ると、身長の影響はなし

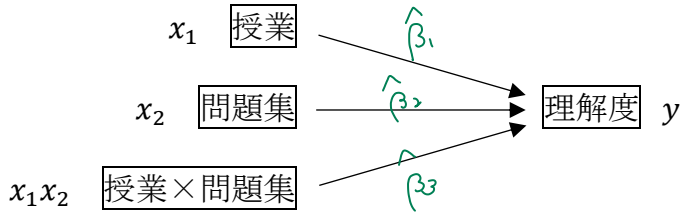
④ 交互作用モデル

(3) 交互作用モデル Interaction Model

(モデル1) 単回帰



例：授業と理解度（問題集が調整変数）



① 調整（抑制）変数 moderator (suppressor) variable
 x_1 と y の関係が第三の変数 x_2 の値によって変化するとき、この x_1 と交互作用を持つ x_2 を調整変数という。

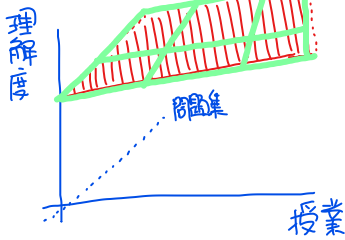
② 交互作用 Interaction
 二つ以上の変数が組み合わさって生まれるもとの変数単体の効果（主効果）では説明できない効果のこと。

(p-1) $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$ ← 重回帰

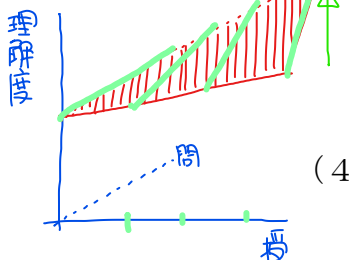
+ (p+2) β_2 が x_1 の値で変化 → $\beta_2 = \gamma_0 + \gamma_1 x_{1i}$ ← 交互作用

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \gamma_0 x_{2i} + \gamma_1 x_{1i} x_{2i} + \varepsilon_i$$

(モデル2) 重回帰

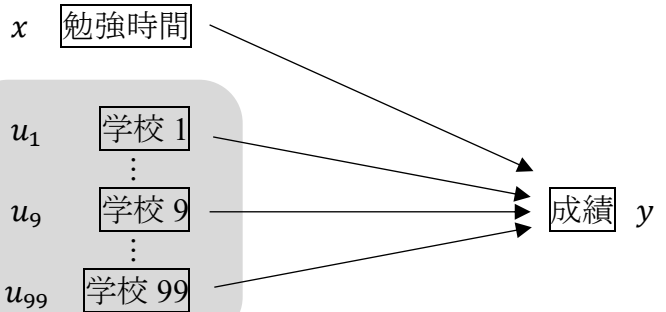


(モデル3) 交互作用あり



(4) 階層モデル Hierarchical Model

例：学校というグループ要因を考察する事例



(p-1) $y_{ij} = \beta_{0j} + \beta_1 x_{ij} + e_i$ ← 重回帰

(p+2) $\beta_{0j} = \gamma_0 + u_j$ ← グループの独自性

学校ごとの独自性
 (i番目の学校の効果)
 全2の学校の平均

④ 交互作用がかけ算のワケ

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{1i} x_{2i} + \varepsilon_i$$

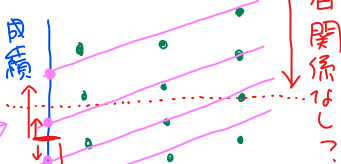
$$= \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{1i} x_{2i} + \varepsilon_i$$

$$= \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{1i} x_{2i} + \varepsilon_i$$

↑
かけ算

④ 階層モデル

(モデル1) 単回帰



両者関係は？

(モデル2) 階層モデル

学校ごとに切片が違い！
 ⇒ 勉強時間と成績の関係が異なる！

ノート3 統計量：偏回帰係数の解釈

(解釈のコツ1) 係数の比較 (標準偏回帰係数の利用)
 (解釈のコツ2) 点推定された偏回帰係数の意味

(1) 解釈のコツ1：単位の影響を除く！

データ1 非標準化データ				データ2 標準化データ			
X1	X2	X3	Y	X1	X2	X3	Y
18.77	37	244	1.62	-1.21	-1.18	-1.67	1.62
17.13	38	257	1.68	-1.49	-1.12	-1.59	1.68
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
23.38	41	304	1.46	-0.42	-0.94	-1.29	1.46

標準化

kg km g kg

① 非標準偏回帰係数 (データ1を分析)

生データの単位をそのまま利用した回帰分析の結果。

	推定値	標準誤差	t 値	p 値	
$\hat{\beta}_0$	0.565	0.233	2.428	0.017	*
$\hat{\beta}_1$	0.044	0.012	3.781	0.000	***
$\hat{\beta}_2$	-0.004	0.004	-0.894	0.374	
$\hat{\beta}_3$	0.002	0.000	5.899	0.000	***

② 標準偏回帰係数 (データ2を分析)

データを標準化したうえで行った回帰分析の結果。

※ 標準偏差の比が1となり、相関係数のみに基づく。

	推定値	標準誤差	t 値	p 値	
$\hat{\beta}_0$	2.709	0.05	54.15	2e-16	***
$\hat{\beta}_1$	0.259	0.07	3.78	0.000	***
$\hat{\beta}_2$	-0.064	0.07	-0.89	0.374	
$\hat{\beta}_3$	0.385	0.07	5.90	5.23e-08	***

④ 偏回帰係数

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$$

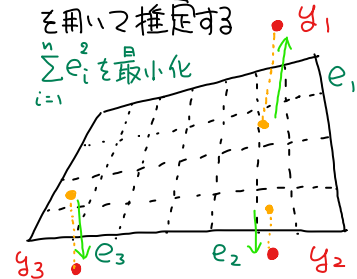
切片 傾き
 (偏回帰係数)

重回帰モデルの回帰係数を偏回帰係数と呼ぶ。

→ 単回帰の回帰係数と比べて扱いに少し注意が必要。

④ 偏回帰係数の推定

単回帰分析同様最小乗法を用いて推定する
 $\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2$ を最小化



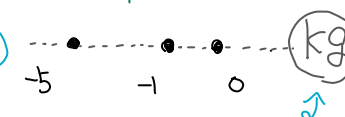
なぜ 0.002 の $\hat{\beta}_3$ は有意で 0.004 の $\hat{\beta}_2$ は有意にならないう？

$$\hat{\beta}_3 \times x_{3i} = 0.002 \times 304 = 0.608$$

$$\hat{\beta}_2 \times x_{2i} = -0.004 \times 41 = -0.164$$

④ 標準化

① 非標準化データ



もともとの単位に依存

② 標準化データ



平均から標準偏差何個分かを表わし直したデータ

① 論文を読むときのコツ

(2) 解釈のコツ2：偏回帰係数はモデル相対的！

論文を読んでいて、

「『湿度』の偏回帰係数は
0.9で、有意だった。よって、
『湿度』は『背丈』に影響する」

のような記述に出会ったとき、

WAIT!

「結果に影響を与えそうな
変数は、すべてモデルに含まれ
ていないのか？」

と問いつつ冷静に判断。

① 解釈上の注意点

同じデータを用いても、ある条件を満たさない限り、重回帰の回帰係数は、単回帰の回帰係数とは一致しない

単回帰分析 $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + e_i$

背丈 β_1 湿度

重回帰分析 $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + e_i$

背丈 β_1 湿度 湿度

② 理由

同じモデルに含まれているそのほかの要因(変数)に相対的に値が決まるため。

③ 解釈

例えば、「湿度」という影響を一定化し、
考えなくしてよくなったとき、「湿度」が持つ効果
他の独立変数の影響が取り除かれた時、その独立変数
が一単位増加すると従属変数がどの程度変化するのか。

④ 例外

独立変数同士に、関連性がない(無相関である)場合は、単回帰分析の結果と一致する。

※ただし、検定や信頼区間の結果は異なる。



例1：現地調査 研究者の人為的介入なし

ID	背丈 y	気温 x1	湿度 x2
1	10	20	40
2	11	18	50
3	11	19	50
4	12	22	65
5	13	26	60
6	15	28	70
7	14	27	80
8	20	35	85

独立変数の
組み合わせは
雑然!

① 単回帰分析 $y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + e_i$

	推定値	標準誤差	t値	p値
beta0	0.181	1.564	0.116	0.912
beta1	0.536	0.062	8.554	0.000 ***

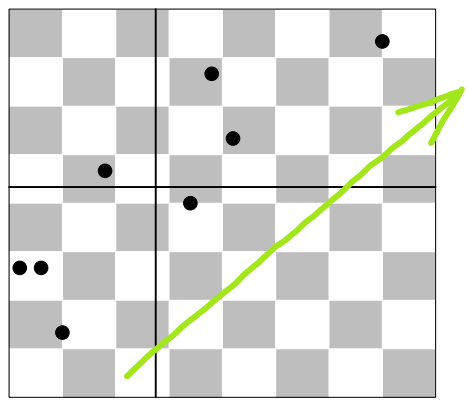
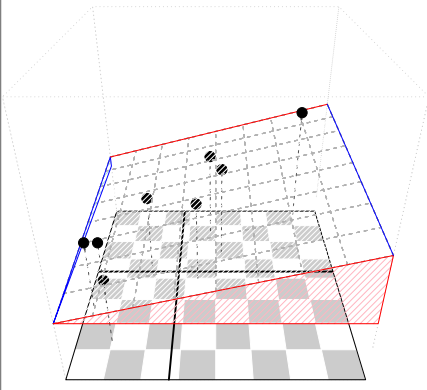
② 単回帰分析 $y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_2 x_{2i} + e_i$

	推定値	標準誤差	t値	p値
beta0	2.037	2.603	0.782	0.464
beta2	0.179	0.041	4.423	0.005 **

③ 重回帰分析 $y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + \hat{\beta}_2 x_{2i} + e_i$

	推定値	標準誤差	t値	p値
beta0	0.053	1.676	0.031	0.976
beta1	0.467	0.138	3.390	0.020 *
beta2	0.029	0.050	0.571	0.593

不一致



独立変数同士に相関あり!



例2：温室での調査 研究者が独立変数を調整可!

ID	背丈 y	気温 x1	湿度 x2
1	10	20	40
2	11	20	80
3	11	25	40
4	12	25	80
5	13	30	40
6	15	30	80
7	14	35	40
8	20	35	80

独立変数の
組み合わせが
整然

① 単回帰分析 $y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + e_i$

	推定値	標準誤差	t値	p値
beta0	1.150	3.482	0.330	0.753
beta1	0.440	0.124	3.546	0.012 *

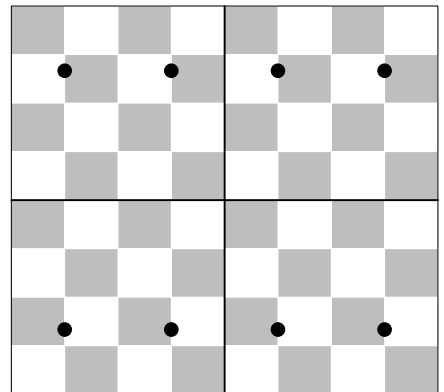
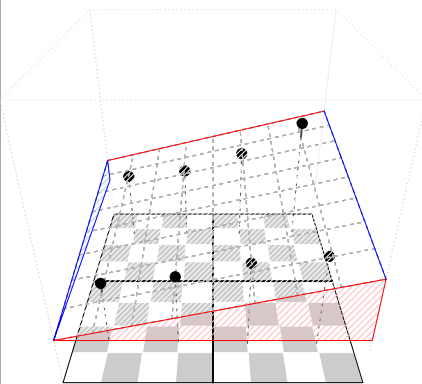
② 単回帰分析 $y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_2 x_{2i} + e_i$

	推定値	標準誤差	t値	p値
beta0	9.500	3.506	2.710	0.035 *
beta2	0.063	0.055	1.127	0.303

③ 重回帰分析 $y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{1i} + \hat{\beta}_2 x_{2i} + e_i$

	推定値	標準誤差	t値	p値
beta0	-2.600	3.010	-0.864	0.427
beta1	0.440	0.092	4.778	0.005 **
beta2	0.063	0.026	2.428	0.060 .

致



独立変数たちが無相関

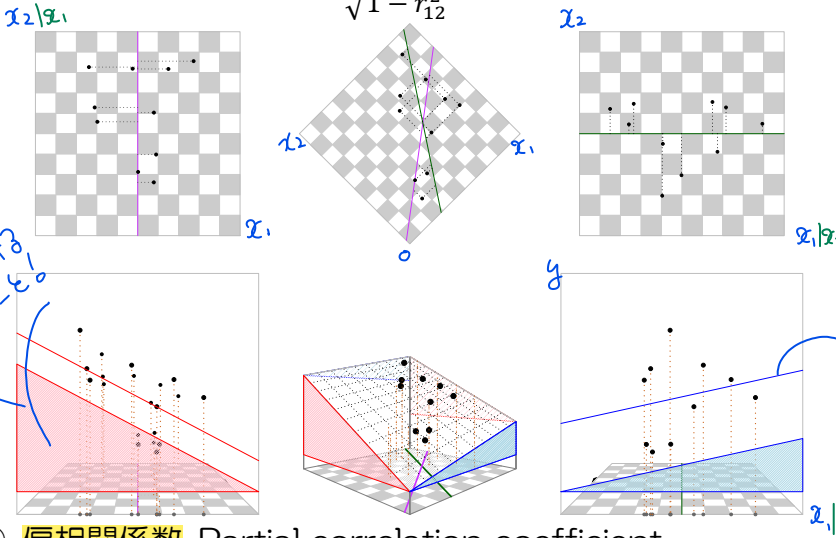
ノート3 統計量：部分/偏相関係数と偏回帰係数

- 👉 (解釈のコツ1) 点推定された偏回帰係数の意味
- (解釈のコツ2) 係数の比較 (標準偏回帰係数の利用)

(1) 解釈のコツ1：それぞれの係数の意味を知る

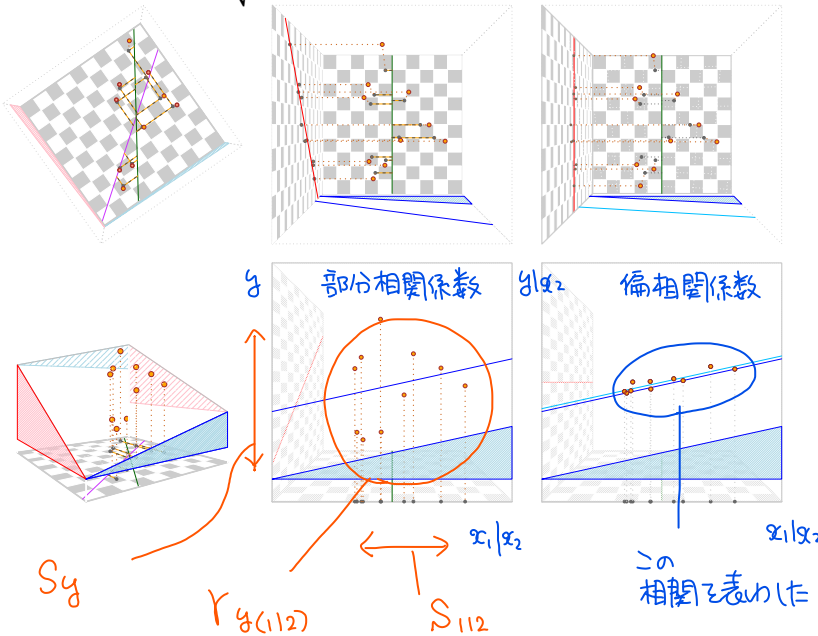
- ① **部分相関係数** Part correlation coefficient
 一つの変数から第三の変数の影響を除いた後で、二つの変数の相関を求めたもの。

$$r_{y(2|1)} = \frac{r_{y2} - r_{y1}r_{12}}{\sqrt{1 - r_{12}^2}}$$



- ② **偏相関係数** Partial correlation coefficient
 二つの変数それぞれから第三の変数の影響を除いた後で、それら二つの変数の相関を求めたもの。

$$r_{y2|1} = \frac{1}{\sqrt{1 - r_{y1}^2}} \times \frac{r_{y2} - r_{y1}r_{12}}{\sqrt{1 - r_{12}^2}}$$



④ 偏回帰係数

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \varepsilon_i$$

切片

傾き

(偏回帰係数)

重回帰モデルは回帰係数を偏回帰係数と平べ。

⇒ 単回帰の回帰係数と比べ2倍いゝ注意が必要!

④ 偏回帰係数

「他の独立変数の影響をとりぬいたときに」

その独立変数がもつ効果の大きさを表わす。

④ 記法: $x_1 | x_2$

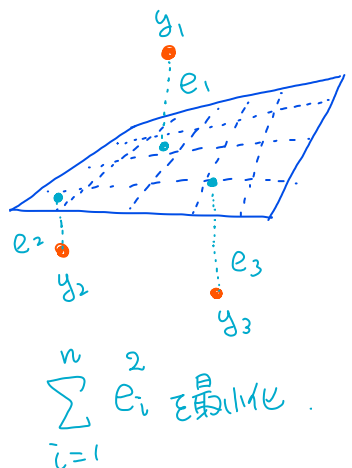
「 x_2 の影響が取り除かれた x_1 」を

$x_1 | x_2$

とりのぞかれた変数

より純粋なものになる。

① 重回帰における最小乗法



② 単回帰の係数

$\hat{\beta}_1 = r_{yx} \frac{S_y}{S_x}$

③ 記法: $r_{y(1|2)}$

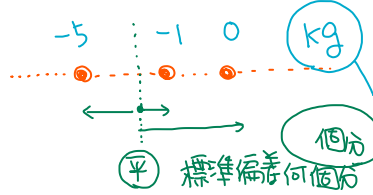
$r_{y(x_1|x_2)}$
 $= r_{y(1|2)}$
 単に4つありやとを優先して、
 “2”を省略して表現した対。

問) なぜ、0.002の $\hat{\beta}_3$ は有意で、0.004の $\hat{\beta}_2$ は有意ではないの?

⇒ データの値の大きさが

$\hat{\beta}_3 \times x_{3i} = 0.608$ (持ち持ち)
 $\hat{\beta}_2 \times x_{2i} = -0.164$

④ 標準化



③ 偏回帰係数 Partial regression coefficient

ある独立変数からそれ以外の独立変数の影響を除いた残差変数によって従属変数を予測するときの回帰係数。

$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \varepsilon_i$

↑ x_1 の影響をとり除いた x_2 が、
 よに持ち持ちも影響

点推定値

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}_1 - \hat{\beta}_2 \bar{x}_2$$

$$\hat{\beta}_1 = r_{y(1|2)} \times \frac{S_y}{S_{1|2}} \quad S_{1|2} = S_1 \sqrt{1 - r_{21}^2}$$

$$\hat{\beta}_2 = r_{y(2|1)} \times \frac{S_y}{S_{2|1}} \quad S_{2|1} = S_2 \sqrt{1 - r_{12}^2}$$

※ 偏回帰係数と部分/偏相関係数の関係

縦軸と横軸の (i) 相関係数 $r_{y(1|2)}$ と (ii) 標準偏差の比 $S_y/S_{1|2}$ から構成されている (参照: 第4講)

(2) 解釈のコツ2: 単位の影響を除く!

データ 1				標準化	データ 2 (標準化データ)			
X1	X2	X3	Y		X1	X2	X3	Y
18.77	37	244	1.62		-1.21	-1.18	-1.67	1.62
17.13	38	257	1.68		-1.49	-1.12	-1.59	1.68
⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮	⋮
23.38	41	304	1.46		-0.42	-0.94	-1.29	1.46

① 非標準偏回帰係数 (データ 1 を分析)

生データの単位をそのまま利用した回帰分析の結果。

	推定値	標準誤差	t 値	p 値	
$\hat{\beta}_0$	0.565	0.233	2.428	0.017	*
$\hat{\beta}_1$	0.044	0.012	3.781	0.000	***
$\hat{\beta}_2$	-0.004	0.004	-0.894	0.374	
$\hat{\beta}_3$	0.002	0.000	5.899	0.000	***

② 標準偏回帰係数 (データ 2 を分析)

データを標準化したうえで行った回帰分析の結果。

※ 標準偏差の比が 1 となり、相関係数のみに基づく。

	推定値	標準誤差	t 値	p 値	
$\hat{\beta}_0$	2.709	0.05	54.15	2e-16	***
$\hat{\beta}_1$	0.259	0.07	3.78	0.000	***
$\hat{\beta}_2$	-0.064	0.07	-0.89	0.374	
$\hat{\beta}_3$	0.385	0.07	5.90	5.23e-08	***

もともとの単位に依存するデータ (非標準化データ)

平均から標準偏差何個分を以て表わした (標準化データ)

📖 ノート4 分析の評価1：作った統計モデルの正確さを評価
(参照：第4講ノート5)

①復習：分散の分解

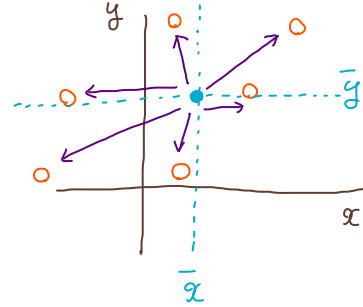
$$S_{A+B}^2 = S_A^2 + 2S_{AB} + S_B^2$$

∴ $2S_{AB} = 0$
無相関の時

$$S_{y}^2 = S_{\hat{y}}^2 + S_e^2$$

②復習：平方和と分散

(1) 共分散



$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

(2) 分散



$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = S_x^2$$

(3) 平方和

$$\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = SS_x$$

分散と平方和の差

$$S_x^2 = \frac{1}{n} SS_x$$

③平方和の分解のイミ

∴ $B = C + D$

$$B = C + D$$

を表現する。



データへの適合度

独立変数を複数取り入れたことで、従属変数の予測はどれくらい正確になったの？

(1) 平方和/分散の直交分解

予測値 \hat{y} と残差 e は互いに無相関であるので、その和である $y = \hat{y} + e$ の分散を次のように分解することができる。

① 分散の直交分解

$$s_y^2 = s_{\hat{y}}^2 + s_e^2$$

② 平方和の直交分解

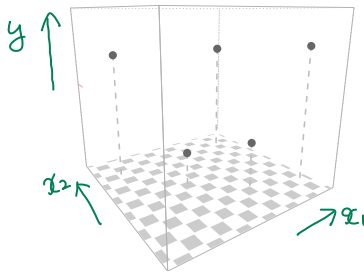
$$\frac{1}{n} SS_y = \frac{1}{n} SS_{\hat{y}} + \frac{1}{n} SS_e$$

両辺を $\frac{1}{n}$ が割る

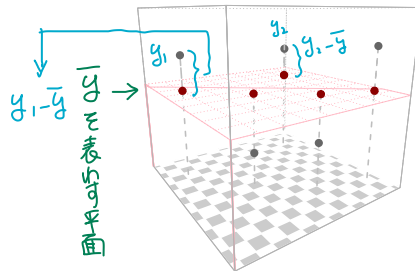
$$SS_y = SS_{\hat{y}} + SS_e$$

観測値の平方和 = 予測値の平方和 + 残差の平方和

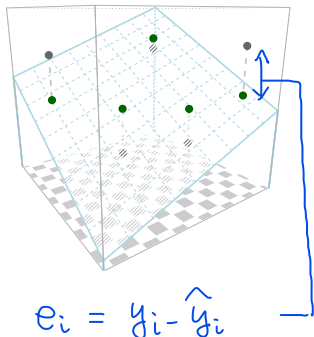
A 観測値の分布



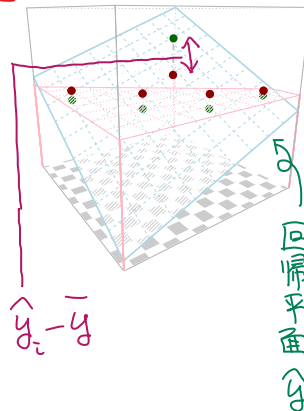
B 観測値 y の分散



C 残差 e の分散



D 予測値 y-hat の分散



① 重相関係数の考え方

(2) **重相関係数 R** Multiple correlation coefficient

これは、実測値 y と 予測値 \hat{y} の相関係数であり、 R と表す。

(K-21) 予測値と観測値が近い

予測が上手くいよ！

$r_{y\hat{y}} = \text{高い}$

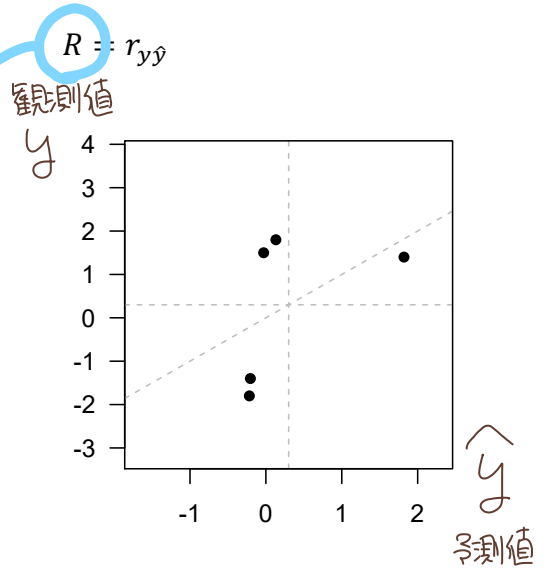
(K-22) 予測値と観測値が遠い

予測がうまくいっていない！

= 回帰平直が
デ-タにフィットしていない！

$r_{y\hat{y}} = \text{低い}$

二乗する
↓
決定係数
 R^2



⇒ $r_{y\hat{y}}$ 、 $r_{y\hat{y}}$ と回帰平直
がどのくらいフィットしているか
の指標に $r_{y\hat{y}}$ を用いる。

(3) **決定係数** Coefficient of determination

これは独立変数がどれだけ従属変数の値を決定するかを示す指標。別名：分散説明率 Proportion of variance accounted for

① 復習：決定係数

① 分散の直交分解

$S_y^2 = S_g^2 + S_e^2$

二つある S_g^2 は
よいと S_e^2 が小さい
割合を示すの？

② 決定係数

$1 = \frac{S_g^2}{S_y^2} + \frac{S_e^2}{S_y^2}$

$\frac{S_g^2}{S_y^2} = 1 - \frac{S_e^2}{S_y^2}$

$R^2 = 1 - \frac{S_e^2}{S_y^2}$

(4) **決定係数の性質**

独立変数を増やすと追加した独立変数が従属変数の予測に寄与しているかに関係なく決定係数は単調に増加する。

Model 1 $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \epsilon_i = R^2_{\text{Fit1}}$

Model 2 $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \epsilon_i = R^2_{\text{Fit2}}$

Model 3 $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 x_{3i} + \epsilon_i = R^2_{\text{Fit3}}$

$R^2_{\text{Fit1}} \leq R^2_{\text{Fit2}} \leq R^2_{\text{Fit3}}$

決定係数は増加！

① モデル比較

決定係数で
モデル比較はできる！

ステップ1 重回帰式「全体」の検定

データから何らかの統計量を計算し、その標本分布を用いて「 $\beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_p = 0$ (係数が全部 0)」という帰無仮説を検証したい。

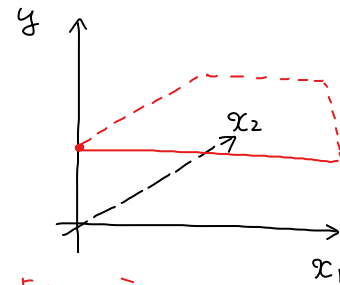
ステップ2 「個別」の回帰係数の検定

データから何らかの統計量を計算し、その標本分布を用いて「 i 番目の偏回帰係数について $\beta_i = 0$ だ」という帰無仮説を検証したい。

ステップ3 重回帰式・偏回帰係数の区間推定

重回帰式やそれぞれの偏回帰係数について、信頼区間や予測区間を計算し、幅を持った推定を行う。

(帰無仮説)



「 x_2 の方向において
傾きは 0 (= 水平だ)」

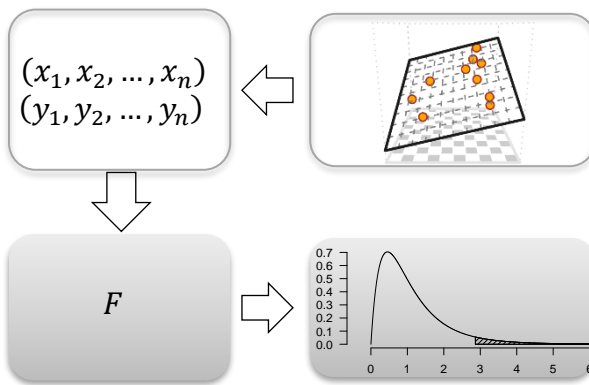
(対立仮説)

「 x_2 の方向において
傾きが 0 だ」という訳
ではない

⇔ 傾きが 0 ではない
方向が存在する

(1) 検定1：重回帰式「全体」の検定

ステップ1



① 帰無仮説と対立仮説

H_0 : 「 $\beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_p = 0$ (すべての係数が 0)」

H_1 : 「 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ の少なくとも一つはゼロではない」

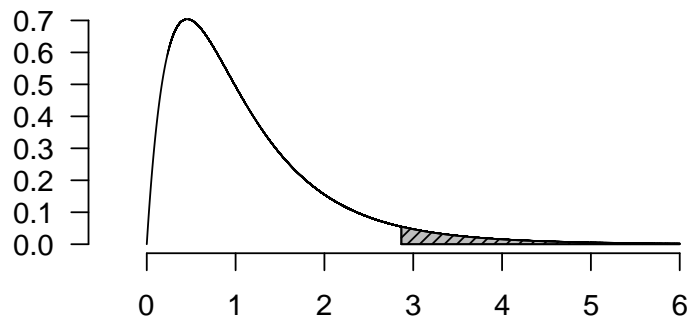
② 検定統計量 F (重回帰式の検定における検定統計量)

$$F = \frac{ss_{\hat{y}}/p \quad \text{「}\hat{y}_i\text{の全体平均からのばらつき」}}{ss_e/(n-p-1) \quad \text{「}y_i\text{の}\hat{y}_i\text{からのばらつき」}}$$

(※ p は独立変数の数)

③ F 分布

H_0 が真なら F 値は自由度 $p, n-p-1$ の F 分布に従う。



当然出てくるであろう疑問

疑問1 : F 分布ってどこから登場したの?

⇒ $N(0,1)$ からカイ二乗分布を経由して登場

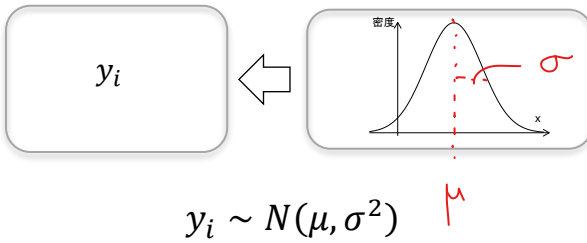
疑問2 : 自由度ってなにものなの?

⇒ カイ二乗分布の再生性に起因して登場

※ カイ二乗分布と F 分布

① 正規分布

これは、ランダムな誤差が積み重なって登場する分布。



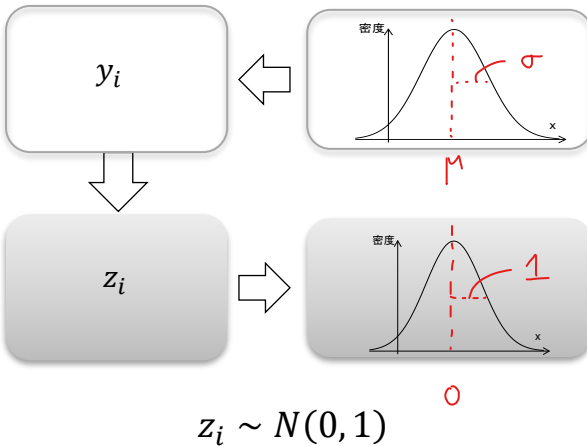
$$y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$$

② 標準正規分布

これは、平均が 0、分散が 1 の正規分布 $N(0, 1)$ 。正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ に従う変数 y_i を標準化した z_i が従う分布。

④ 標準化

$$y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$$



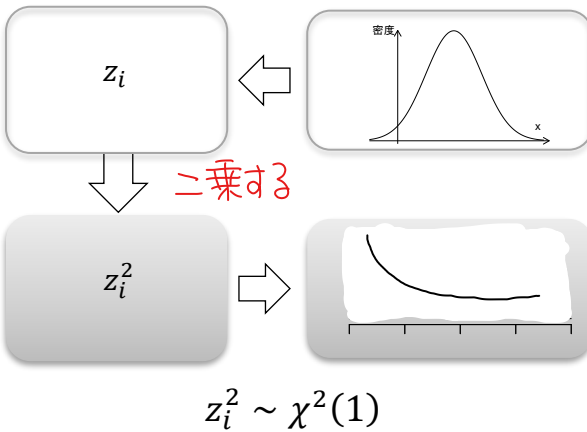
$$\frac{y_i - \mu}{\sigma} \sim N(0, 1)$$

$$= z_i$$

$$z_i \sim N(0, 1)$$

③ カイ二乗分布

これは $N(0,1)$ に従う変数を二乗した統計量が従う分布。



$$z_i^2 \sim \chi^2(1)$$

自由度 1 の χ^2 分布

④ 自由度

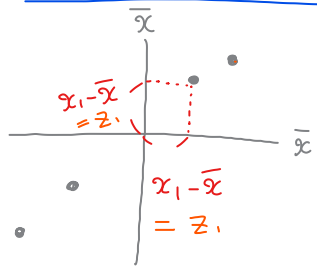
これは、何個 χ^2 分布
にしたかの度数を
足し合わせたものを
表す可。

$$z_1^2 \sim \chi^2(1)$$

$$z_1^2 + z_2^2 \sim \chi^2(2)$$

⋮

④ $\chi^2(n)$ を考える訳



$$\frac{1}{n} (z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 + z_4^2)$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_i^2$$

= 分散

再生性 (正規分布)

$y_1 \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$ 英語の点

$y_2 \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$ 数学の点

⋮

$y_n \sim N(\mu_n, \sigma_n^2)$ 古文の点

$y_1 + y_2 + \dots + y_n$ 総合得点

$\sim N(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_n^2)$

再生性 (カイ二乗分布)

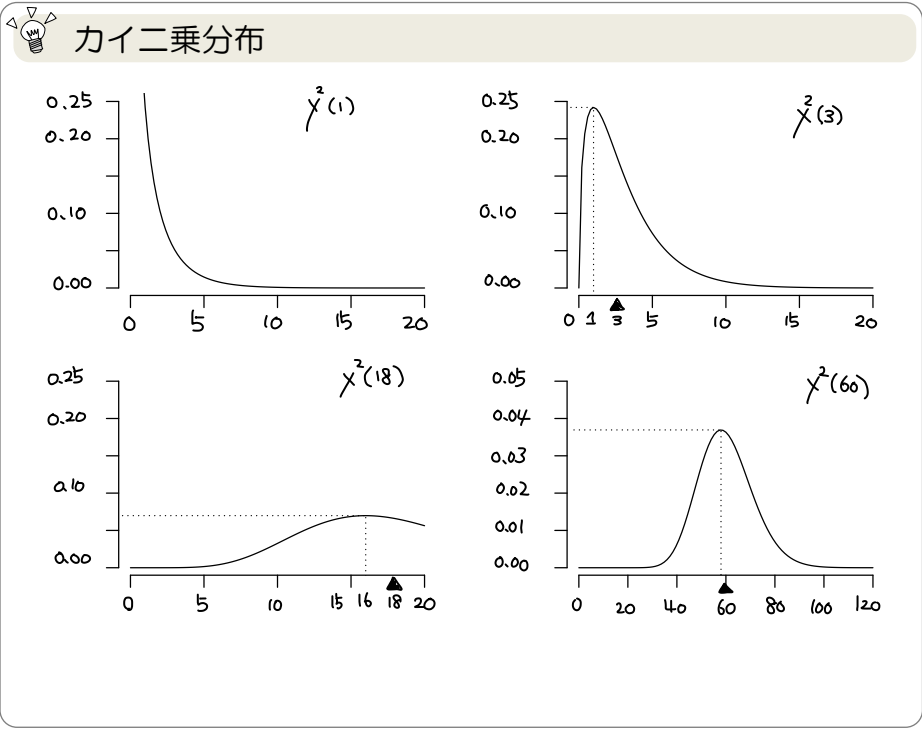
$z_1^2 \sim \chi^2(1)$

$z_2^2 \sim \chi^2(1)$

⋮

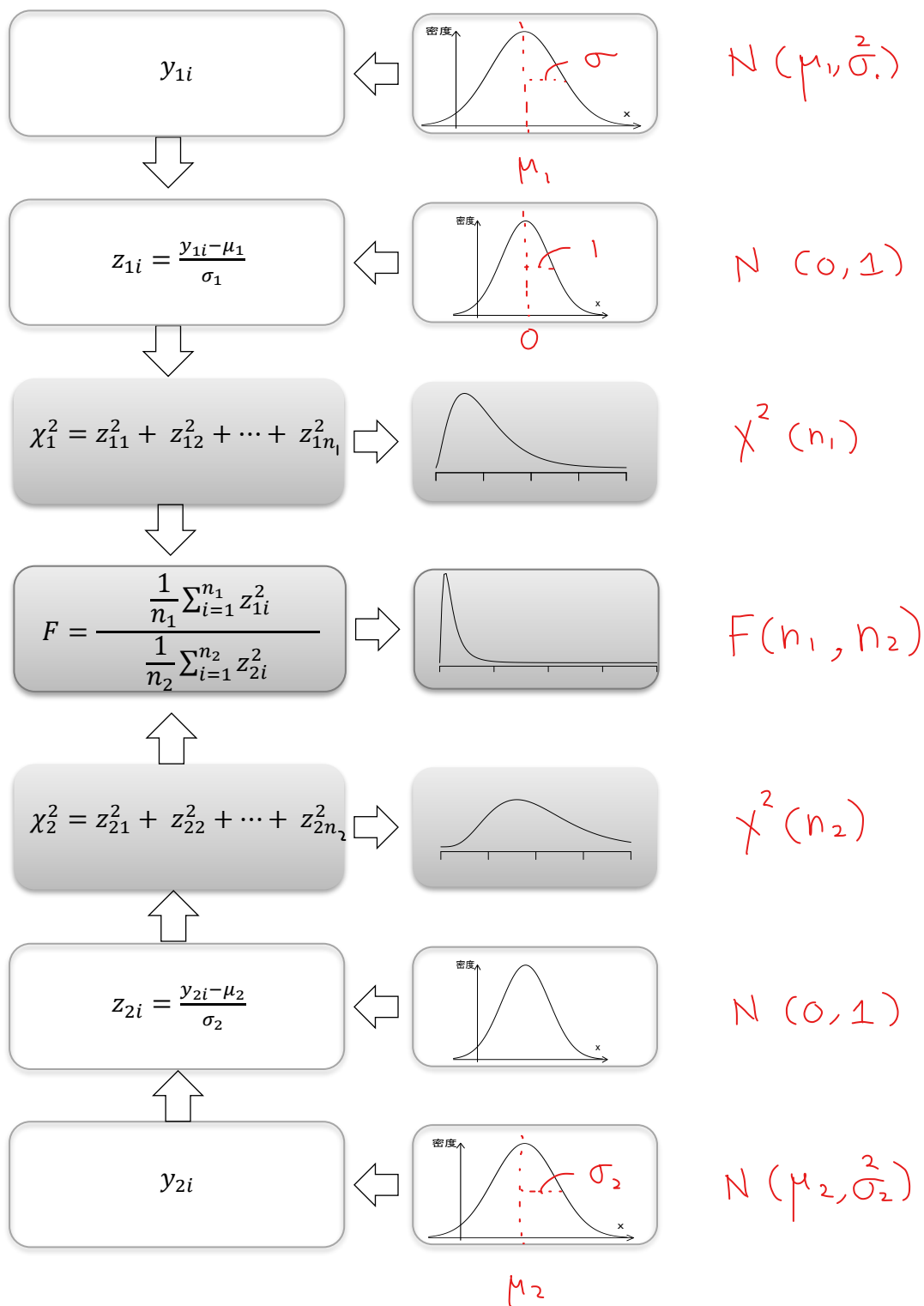
$z_n^2 \sim \chi^2(1)$

$z_1^2 + z_2^2 + \dots + z_n^2 \sim \chi^2(n)$



④ F 分布

これは、互いに独立な、二つのカイ二乗分布に従う変数 $\chi_1^2 \sim \chi^2(n_1), \chi_2^2 \sim \chi^2(n_2)$ の比が従う分布。



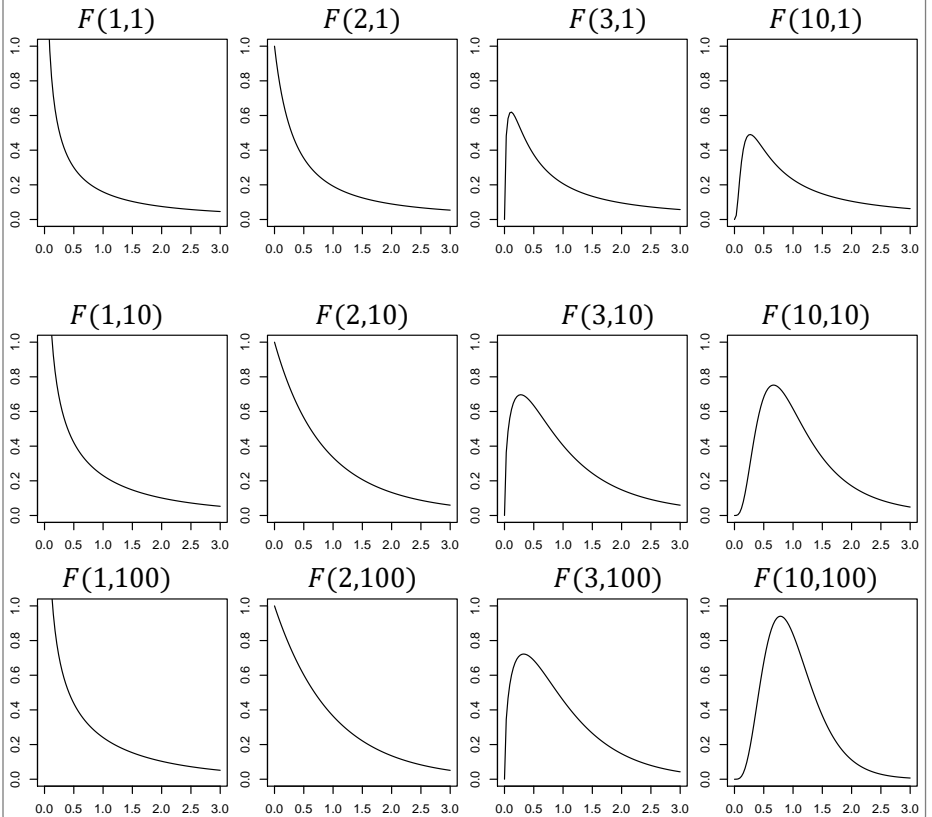


定義：F 値

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{\frac{1}{n_1} \chi_1^2}{\frac{1}{n_2} \chi_2^2} = \frac{\frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} z_{1i}^2}{\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} z_{2j}^2} \\
 &= \frac{\frac{1}{n_1} (z_{1i} \text{の平方和})}{\frac{1}{n_2} (z_{2j} \text{の平方和})} \\
 &= \frac{z_{1i} \text{の分散}}{z_{2j} \text{の分散}}
 \end{aligned}$$



F 分布



💡 A 標準化する際には中心を確認！ (統計量 y_i を標準化)

$$y_i \sim N(\underline{\mu}, \underline{\sigma^2})$$

人間の視点

$$\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \not\sim N(0, 1)$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 \not\sim \chi^2(n)$$

全知全能の視点

$$\frac{y_i - \underline{\mu}}{\underline{\sigma}} \sim N(0, 1)$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \underline{\mu}}{\underline{\sigma}} \right)^2 \sim \underline{\chi^2(n)}$$

💡 B 標準化する際には中心を確認！ (統計量 y_i を変換)

$$y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 \sim \chi^2(n-1)$$

💡 C 標準化する際には中心を確認！ (統計量 \bar{y} を標準化)

$$y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$$

中心極限定理

$$\bar{y} \sim N\left(\mu, \frac{\sigma^2}{n}\right)$$

$$\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim N(0, 1)$$

$$\left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \right)^2 \sim \underline{\chi^2(1)}$$



[B] において自由度が $n-1$ になる理由

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \mu}{\sigma} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 + \left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \right)^2$$

$\chi^2(n)$

↑ [A]
↓ [B]
ということは
再生性から

$\chi^2(n-1)$

$\chi^2(1)$



証明

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \mu}{\sigma} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{(y_i - \bar{y}) + (\bar{y} - \mu)}{\sigma} \right\}^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 + \frac{2(y_i - \bar{y})(\bar{y} - \mu)}{\sigma^2} + \left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma} \right)^2 \right\} \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 + \frac{2(\bar{y} - \mu)}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 + \frac{2(\bar{y} - \mu)}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) + n \left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 + \frac{2(\bar{y} - \mu)}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) + \left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^2 + \left(\frac{\bar{y} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \right)^2 \end{aligned}$$

(2) 検定2:「個別」の回帰係数の検定

ステップ2

① 帰無仮説と対立仮説

$$H_0 : \beta_1 = 0$$

$$H_1 : \beta_1 \neq 0$$

② 検定統計量 t

☞ t 値 (回帰係数の検定における検定統計量)

$$t = \frac{\hat{\beta}_i \text{ 「}\beta_i\text{の推定値」}}{\hat{\sigma}_{\beta_i} \text{ 「}\beta_i\text{の推定値」の標準誤差の推定値}}$$

	点推定値	標準誤差	t value	Pr(> t)	
$\hat{\beta}_0$	-0.49	0.08	-6.30	1.13e-06	***
$\hat{\beta}_1$	1.02	0.15	6.66	4.63e-07	***

F-statistic: 36.57 on 3 and 98 DF, p-value: 6.032e-16

(3) 偏回帰係数の信頼区間

標本を繰り返し抽出した時、この範囲を設けておけば 100 回に 95 回、真の β_0, β_1 を含むだろう、という区間。

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \varepsilon_i$$

未知の偏回帰係数の信頼区間

(4) 予測値の 95% 信頼区間

図の灰色の区間

標本を繰り返し抽出した時、点 x_j に対してこの範囲を設けておけば 100 回に 95 回、 μ_j を含むだろう、という区間。

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \varepsilon_i$$

μ_j の信頼区間

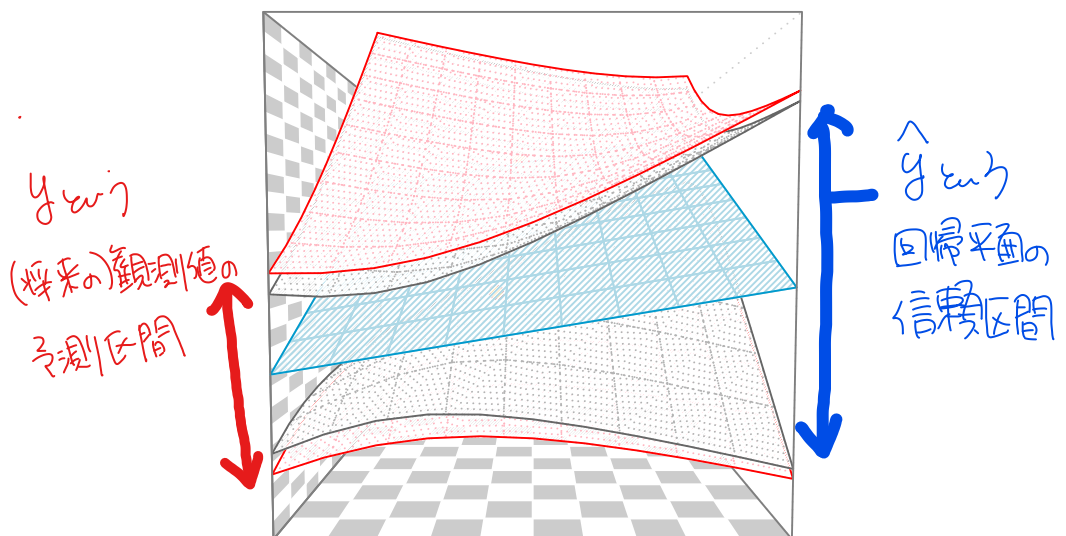
(5) データの 95% 予測区間

図の赤色の区間

標本を繰り返し抽出した時、点 x_j に対してこの範囲を設けておけば 100 回に 95 回データを含むだろう、という区間。

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \varepsilon_i$$

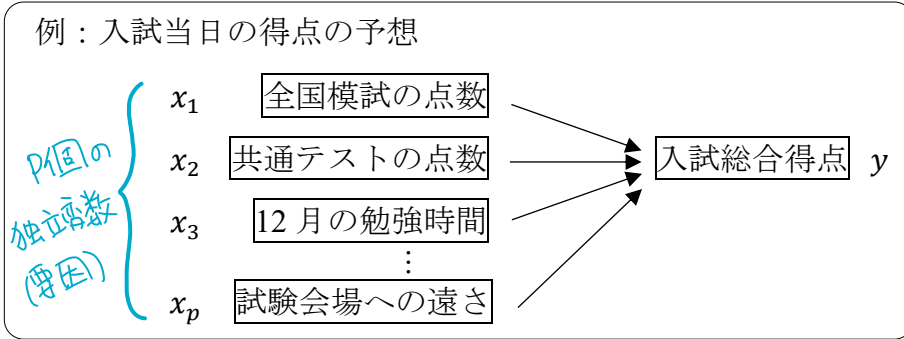
データ y の予測区間



④ 統計学における「学習」

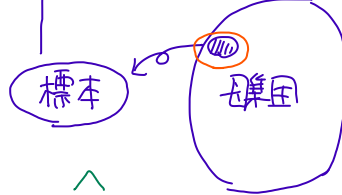
研究者が想定したモデルが
研究者が採収したデータと
学習

📖 ノート 6 分析の評価3: 想定した統計モデルの適切さの評価
(モデルの改良)



④ 過学習 overfitting

研究者が想定したモデルが
研究者が採収したデータと
学習しすぎる



独立変数の数が多いと、
左(標本)にも2も2もフィット
するが、右(母集団)から、
離れようとする危険性がある!

(1) 目的: 素性選択 Feature selection

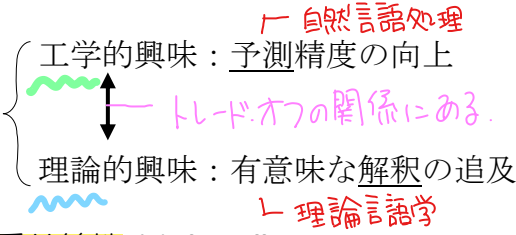
重要な独立変数(素性)のみに絞りたい!

(動機1) 過学習 overfitting

独立変数が多いと訓練データへの依存度が強
まり新標本への対応力が落ちてしまう。

(動機2) 解釈可能性 interpretability

独立変数が多いと解釈が難しくなる。



(動機3) 多重共線性 Multicollinearity

独立変数が多いと独立変数が互いに強い関連
性を持つ非理想的な状況が生まれやすい。

⇒ 偏回帰係数の推定量が不安定になる。

多数存在する独立変数を適切に操作しより良いモデルを模
索するための方法として次の三つの方略がよく紹介される。

案1 (モデル縮約): 重要度の低い変数を削除する
案2 (モデル比較): よりスマートなモデルを探す
案3 (合成指標): 変数同士を合成し新指標を作る

① 多重共線性の本質

どちらか $\hat{\beta}$ の方が
大きい値をとるので、
(小さい)

$$\begin{matrix} \hat{\beta}_1 \text{ (大)} & \hat{\beta}_2 \text{ (小)} \\ \hat{\beta}_1 \text{ (小)} & \hat{\beta}_2 \text{ (大)} \end{matrix}$$

のどちらでもいい。

$\hat{\beta}_1$ は小さいと、 $T=1$
大きいと、 $T=1$ するので、
推定が不安定!

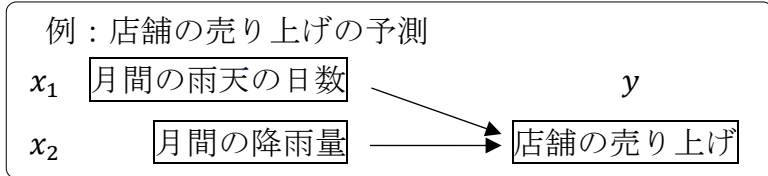
$\hat{\beta}_1$ が小さい、 $\hat{\beta}_2$ が大きい

(2) 多重共線性 Multicollinearity

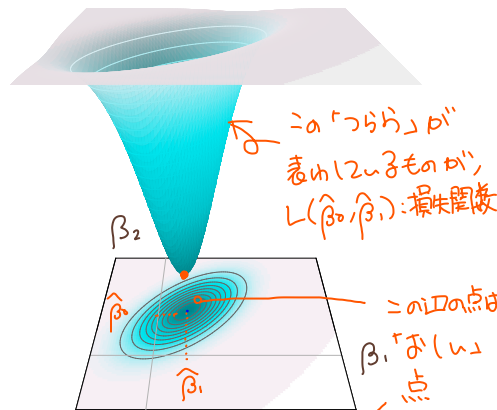
ある独立変数の値が大きくなると、
別の独立変数の値が大小対立する

独立変数が互いに強い関連性を持ち、偏回帰係数の推定量が不安定になってしまう状態のこと。

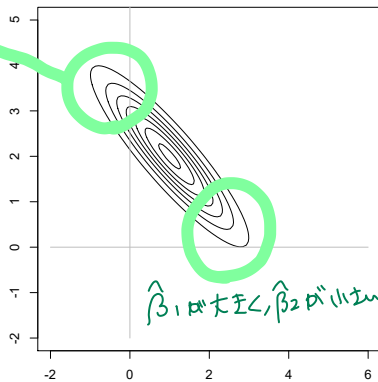
① 独立変数同士の相関が高い場合



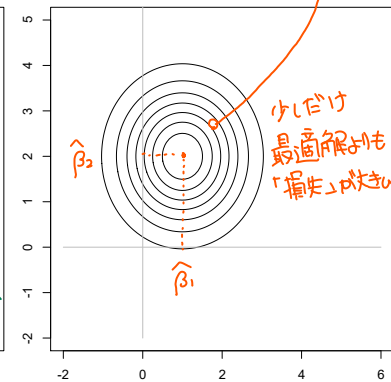
② 点推定の幾何的な理解



(ケース1) 多重共線性



(ケース2)



② VIF の発想

(ステップ1) j 番以外の独立変数が
 j 番目の独立変数を予測!

$x_j \in$

$$\begin{matrix} x_1, x_2, \dots \\ x_{j-1}, x_{j+1}, \dots \\ \dots, x_p \end{matrix}$$

x_j が他の変数と
強い関連ありの場合。
この重回帰式

$$x_j = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_{j-1} x_{j-1} + \alpha_{j+1} x_{j+1} + \dots + \alpha_p x_p$$

の決定係数 $R^2_{x_j|x_{j-1}}$ は (大)

(ステップ2) 分散(比の値) をつくることができる。

③ 分散拡大要因 VIF (Variation Inflation Factor)

多重共線性の診断に使われる指標。10 以上のものは危険だが、4 程度の数値でも多重共線性に注意するといい。

$$VIF(\beta_j) = \frac{1}{1 - R^2_{x_j|x_2}}$$

$$VIF(\hat{\beta}_j) = \frac{1}{1 - R^2_{x_j|x_2}}$$

(大)

(小)

(2) モデル縮約 Model Shrinkage (正則化 Regularization)

① 基本的なアイデア

モデルの複雑さを反映する罰則 (正則化項) を設けた上で推定を行い、偏回帰係数を最小化・削除を行う。

独立変数の数の多さのこと。

通常の最小二乗推定

$$L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{i=1}^n e_i^2$$

↑ 残差の平方和
損失関数 を最小化

正則化項付きの最小二乗推定

$R(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) \leq s$ という制約を満たす範囲で

$$L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{i=1}^n e_i^2$$

正則化項 を最小化

② ラッソ回帰 Lasso Regression

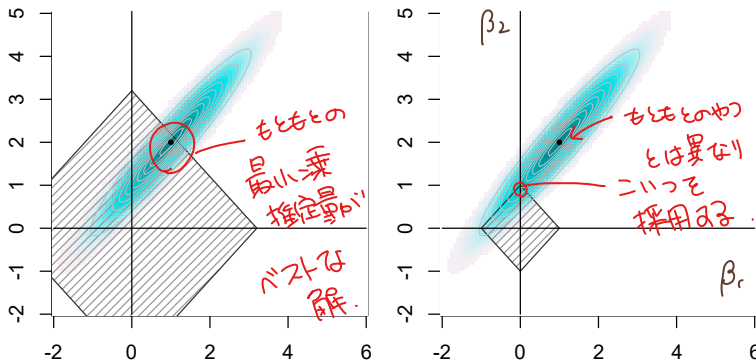
$R(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)$ の部分に L1 ノルムを用いたもの。

$\sum_{i=1}^n \beta_i \leq s$ という制約を満たす範囲で

$$L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{i=1}^n e_i^2$$

を最小化

λ を大きくすると正則化項の罰則が増大。 β_j たちは大きい値を取りづらくなり効果の小さいものから 0 になる。



① 正則化項

(例1) ラッソ回帰

$$\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 \leq 10$$

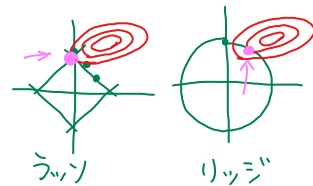
3.8 10.1

$$\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 \leq 10$$

2.9 7.1

(例2) リッジ回帰

$$\hat{\beta}_1^2 + \hat{\beta}_2^2 \leq 10$$



① L1 ノルム

$$R(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{j=1}^p |\beta_j|$$

① L2 ノルム

$$R(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{j=1}^p (\beta_j)^2$$

① 凸形状の頂点が解のとき

$$(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) = (0, 1)$$

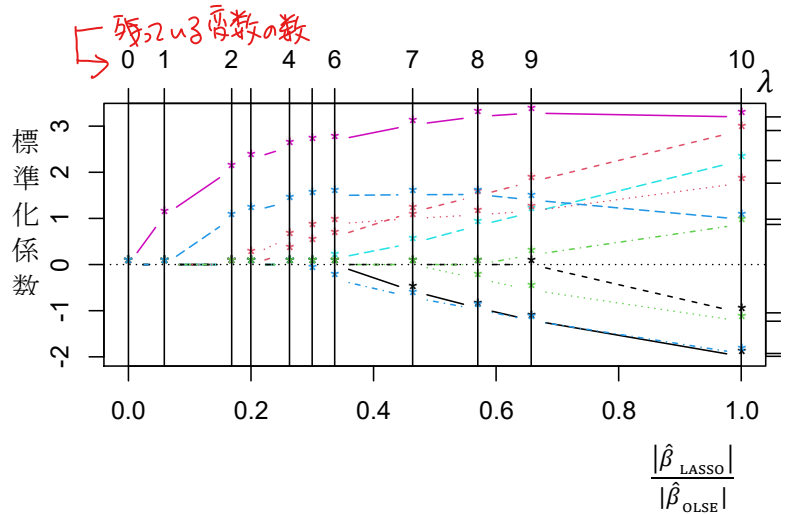
おなじみ、たとえば、 $\hat{\beta}_1$ は、モデルの当てはまりと判断したことになる。

→ 独立変数の数を減らす

③ 実践上の手続き

A. チューニング

λ の値によって、通常の最小二乗推定量 (OLSE) と比べてどのくらい係数の値が小さくなるのかを吟味する。



※係数の比較：標準化回帰係数にしておくのがコツ。

B. 変数の数の選択

(☞ クロスバリデーション)

クロスバリデーションを行い、最もパフォーマンスが高いモデルを採用することが多い。

```
> library(glmnet)
> data(QuickStartExample)

> fit <- glmnet(x, y)
> plot(fit)
> coef(fit, s = 0.1)

> cvfit <- cv.glmnet(x, y)
> plot(cvfit)
> coef(cvfit, s = "lambda.min")
> predict(cvfit, newx = x[1:5,], s = "lambda.min")
```

<https://glmnet.stanford.edu/articles/glmnet.html>

(3) **モデル選択** Model selection

これは、考えられるモデルたちの中で、最もよいパフォーマンスを持つモデルを探す試みのこと。

モデル選択のステップ

- 手順1：モデルを比較するための基準を決める
- 手順2：考えられるモデルたちのパフォーマンスを測る
- 手順3：最良のパフォーマンスを持つモデルを解釈する

① モデルのパフォーマンスを測る指標

(系統1) 訓練データの誤差を修正した指標

[1] **赤池情報量基準** (AIC) 小

$$AIC = \frac{1}{n\hat{\sigma}^2} (RSS + 2d\hat{\sigma}^2)$$

[2] **バイズ情報量基準** (BIC) 小

$$BIC = \frac{1}{n} (RSS + \log(n) d\hat{\sigma}^2)$$

[3] **Mallow's C_p** 小

$$C_p = \frac{1}{n} (RSS + 2d\hat{\sigma}^2)$$

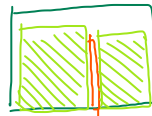
[4] **自由度調整済み決定係数** 大

$$R_{adjusted}^2 = 1 - \frac{RSS/(n-d-1)}{TSS/(n-1)}$$

(系統2) テストデータの誤差を計算した指標

[1] **Leave-One-Out Cross-Validation** (=LOOCV) 小

$$CV_{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n MSE_j^2$$



1列だけ

テストデータ

[2] **K-fold CV** 小

$$CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k MSE_j^2$$



k個の部分集合にわけます

① 考えられる「モデル」とは?

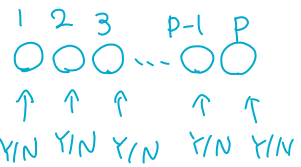
今研究者が p 個の独立変数を用意した.

$$M_1 : \beta_0$$

⋮

$$M_{(p-1)} : \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1}$$

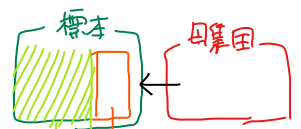
$$M_p : \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p$$



$$2 \times 2 \times 2 \times \dots \times 2$$

$$= 2^p \text{ 個のモデルを考えよう}$$

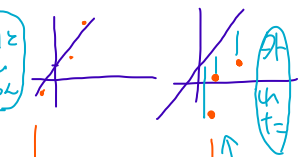
② 訓練データとテストデータ



推定に用いるデータ (訓練データ)

テストデータ

$$\hat{f} \text{ (訓練データを)} \hat{f} = \hat{g}_i = 1 + 2x_i$$



MSE



