

「データ解析」（下平英寿）　講義資料７

検定と信頼区間

- 目標： 検定と信頼区間について理解する．
  1. 回帰係数の t-検定
  2. 回帰係数，予測値の信頼区間
  3. 回帰モデルの F 検定
  4. 予測式の信頼区間（同時信頼区間）

1　回帰係数の t-検定

1.1　重回帰分析の復習

- 重回帰モデルは
$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_p x_p + \epsilon$$
ベクトル表現すると
$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$
- 回帰係数ベクトル $\boldsymbol{\beta}$ を最小二乗法で推定すると
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$$
で与えられる．
- 正規モデル
$$\boldsymbol{\epsilon} \sim N_n(\boldsymbol{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I}_n)$$
を仮定すると，回帰係数ベクトルは多変量正規分布に従う
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim N_{p+1}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1})$$
ここでサイズ $(p+1)\times(p+1)$ の行列 $\boldsymbol{A}$ を
$$\boldsymbol{A} = (a_{ij}) = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}, \quad i,j = 0,\dots,p$$
とおけば，
$$\hat{\beta}_i \sim N(\beta_i, \sigma^2 a_{ii})$$
- データから $V(\hat{\beta}_i) = \sigma^2 a_{ii}$ を推定するには，誤差分散 $\hat{\sigma}^2$ をその推定量で置き換える．誤差 ϵ の分散 σ^2 の不偏推定は
$$S_\epsilon^2 = \frac{1}{n-p-1}\sum_{i=1}^n e_i^2 = \frac{\|\boldsymbol{e}\|^2}{n-p-1}$$
回帰係数 $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ の個数は $p+1$ 個であることに注意．したがって，自由度は $n-(p+1)$．

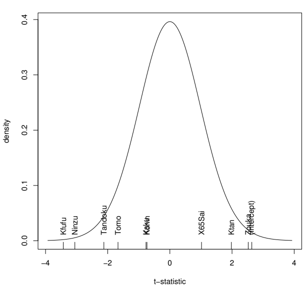
- 不偏推定量 S_ϵ^2 を用いると，
$$\hat{V}(\hat{\beta}_i) = S_\epsilon^2 a_{ii}$$
である．したがって標準誤差の推定は
$$\hat{\mathrm{se}}(\hat{\beta}_i) = \sqrt{\hat{V}(\hat{\beta}_i)} = S_\epsilon \sqrt{a_{ii}}$$
Ｒの組み込み関数では，この式を用いている．
- t-統計量，p-値は
$$t_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\mathrm{se}}(\hat{\beta}_i)}, \quad p_i = 2\Pr\{T > |t_i|\}$$
で与えられる．T は自由度 $n-p-1$ の t-分布に従う確率変数．確率値は，仮に $\beta_i = 0$ であると仮定したとき，実際に観測した $|t_i|$ より絶対値の大きな t-統計量を観測する確率を表す．これが小さいほど，仮定した $\beta_i = 0$ と矛盾するので，$\beta_i \neq 0$ と考えられる．(背理法と同様のロジック.)
- 統計的仮説検定では，あらかじめ閾値 α をさだめておく（通常 $\alpha = 0.05$ または 0.01 を使うことが多い）．そして，$p_i < \alpha$ ならば $\beta_i \neq 0$，$p_i \geq \alpha$ ならば $\beta_i = 0$ と「判定」する．
- もし本当に $\beta_i = 0$ だとすると，p_i は区間 $[0,1]$ の一様分布に従う（確率変数をその分布関数で変換してるから）．従って，$p_i < \alpha$ となり誤って $\beta_i \neq 0$ と判定してしまう確率は α である．
- １００％正確な判断はありえない．α は判断の正確さを調整するパラメタと考えてよい．α を小さくすればするほど，$\beta_i = 0$ を誤って $\beta_i \neq 0$ と判定する確率は小さくなる．しかし逆に，もし $\beta_i \neq 0$ が真実のときに誤って $\beta_i = 0$ と誤判定する確率は増える．この両者はトレードオフの関係にある．
- 正規モデルを仮定すると，t-統計量は，自由度 $n-p-1$ の t-分布に従う確率変数の実現値である．このことを次で示す．

```
# run0073.R
# 回帰係数の t-検定
# あらかじめ x に説明変数の行列，y に目的変数のベクトルを設定しておく
fit <- lm(y~.,data.frame(x,y)) # 線形モデルの当てはめ
be <- coef(summary(fit)) # 結果の取り出し
cat("# 回帰係数，標準誤差，t-統計量，p-値\n"); print(be)
tval <- be[,"t value"] # t-統計量
mx <- max(abs(tval))+0.5; x0 <- seq(-mx,mx,len=300) # プロットの範囲を決める
plot(x0,dt(x0,df.residual(fit)),type="l",
     xlab="t-statistic",ylab="density") # t-分布の密度関数
rug(tval); text(tval,0.01,names(tval),srt=90,adj=0)
dev.copy2eps(file="run0073-d.eps")
pv0 <- 2*pt(abs(x0),df.residual(fit),lower.tail=F)  # p-値
plot(x0,pv0,type="l",log="y",xlab="t-statistic",ylab="p-value")
```

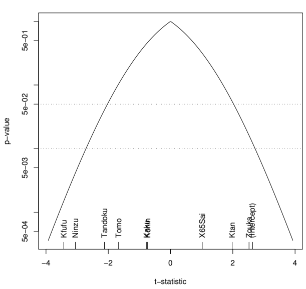


```
abline(h=c(0.01,0.05),lty=3)
rug(tval); text(tval,pv0[1]*1.1,names(tval),srt=90,adj=0)
dev.copy2eps(file="run0073-t.eps")
```

```
> dat <- read.table("dat0002.txt") # データの読み込み (47 x 10 行列)
> x <- dat[,-10]; y <- dat[,10]
> source("run0073.R")
# 回帰係数，標準誤差，t-統計量，p-値
               Estimate  Std. Error    t value    Pr(>|t|)
(Intercept) 15.89979396 6.030963886  2.6363603 0.012175936
Zouka        1.35299378 0.536658497  2.5211448 0.016136162
Ninzu       -3.26224134 1.066976341 -3.0574636 0.004131840
Kaku        -0.02794050 0.036376197 -0.7680984 0.447303442
Tomo        -0.01586652 0.009506475 -1.6690220 0.103554493
Tandoku     -0.11120432 0.052370545 -2.1234134 0.040470167
X65Sai       0.03597994 0.035336821  1.0181996 0.315195078
Kfufu       -0.20127472 0.058708226 -3.4283904 0.001504385
Ktan         0.10625525 0.053686459  1.9791816 0.055273358
Konin       -0.08330936 0.113092312 -0.7366492 0.465981104
```



run0073-d



run0073-t

1.2　カイ二乗分布と t-分布

- 正規モデルを仮定すると以下の結果が得られる．
- 残差二乗和を誤差分散 σ^2 で割ったものは，自由度 $n-p-1$ のカイ二乗分布に従う．
$$\sum_{i=1}^n \frac{e_i^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

- 一般に n 個の独立な正規分布 $Z_1,\dots,Z_n \sim N(0,1)$ の二乗和は自由度 n のカイ二乗分布に従う
$$\sum_{i=1}^n Z_i^2 \sim \chi^2_n$$
従って，誤差の二乗和
$$\sum_{i=1}^n \frac{\epsilon_i^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_n$$
である．残差二乗和のほうでは，$e_i \sim N(0, \sigma^2(1-h_{ii}))$ だったので，大雑把にいって e_i/σ は近似的に $N(0,1)$ であるから，$\sum_{i=1}^n \frac{e_i^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_n$ でもよさそうな気もちょっとするが，実際には自由度が $n-p-1$ になる．
- この事実をキチンと証明するには，まず
$$\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H})\boldsymbol{\epsilon}$$
$$\|\boldsymbol{e}\|^2 = \boldsymbol{\epsilon}'(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H})^2\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}'(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H})\boldsymbol{\epsilon} = \|\boldsymbol{\epsilon}\|^2 - \boldsymbol{\epsilon}'\boldsymbol{H}\boldsymbol{\epsilon}$$
に注意する．$\boldsymbol{H}$ は $\mathrm{Span}(\boldsymbol{x}_0,\dots,\boldsymbol{x}_p)$ への射影行列であり，$\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H}$ はその直交補空間への射影行列である．適当に座標系をとりなおすことにより，$n\times n$ の直交行列
$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \dots, \boldsymbol{u}_n)$$
を使って，
$$\boldsymbol{H} = (\boldsymbol{u}_1,\dots,\boldsymbol{u}_{p+1})(\boldsymbol{u}_1,\dots,\boldsymbol{u}_{p+1})'$$
$$\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H} = (\boldsymbol{u}_{p+2},\dots,\boldsymbol{u}_n)(\boldsymbol{u}_{p+2},\dots,\boldsymbol{u}_n)'$$
とかける．
$$z_i = \boldsymbol{u}_i'\boldsymbol{\epsilon}/\sigma, \quad i = 1,\dots,n$$
と置けば，これは互いに独立に $N(0,1)$ に従う確率変数である．従って，
$$\boldsymbol{\epsilon}'\boldsymbol{H}\boldsymbol{\epsilon}/\sigma^2 = z_1^2 + \cdots + z_{p+1}^2 \sim \chi^2_{p+1}$$
$$\|\boldsymbol{e}\|^2/\sigma^2 = z_{p+2}^2 + \cdots + z_n^2 \sim \chi^2_{n-p-1}$$
である．さらに，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は $z_1,\dots,z_{p+1}$ だけに関係していて $z_{p+2},\dots,z_n$ とは無関係であるから，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ と $S_\epsilon^2 = \|\boldsymbol{e}\|^2/(n-p-1)$ は互いに独立である．
- ここまでの結果をまとめると，
  1. 回帰係数の最小二乗推定 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の従う分布は
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} \sim N_{p+1}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1})$$
ここでサイズ $(p+1)\times(p+1)$ の行列 $\boldsymbol{A}$ を
$$\boldsymbol{A} = (a_{ij}) = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}, \quad i,j = 0,\dots,p$$
とおけば，
$$\hat{\beta}_i \sim N(\beta_i, \sigma^2 a_{ii})$$

2. 誤差分散の不偏推定 S_ϵ^2 の従う分布は

$$\frac{(n-p-1)S_\epsilon^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

3. $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ と S_ϵ^2 は互いに独立

- ところで一般に $Z \sim N(0,1)$ と $S^2 \sim \chi^2_n$ が互いに独立なら，これらから作られる確率変数 $T = Z/\sqrt{S^2/n}$ の従う確率分布は自由度 n の t-分布であることが知られている．

$$T = \frac{Z}{\sqrt{S^2/n}} \sim t\text{-分布}_n$$

確率密度関数は

$$f(t) = \frac{\Gamma((n+1)/2)}{\sqrt{n\pi}\Gamma(n/2)}\left(1+\frac{t^2}{n}\right)^{-(n+1)/2}$$

である．

- これを回帰分析に利用する

$$\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sigma\sqrt{a_{ii}}} \sim N(0,1)$$

$$\frac{(n-p-1)S_\epsilon^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

なので，

$$\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sigma\sqrt{a_{ii}}} \Big/ \sqrt{\frac{S_\epsilon^2}{\sigma^2}} = \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\sqrt{a_{ii}}S_\epsilon} \sim t\text{-分布}_{n-p-1}$$

式を整理すると，

$$\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\hat{\mathrm{se}}(\hat{\beta}_i)} \sim t\text{-分布}_{n-p-1}$$

- ところで R で計算している t-統計量は

$$t_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\mathrm{se}}(\hat{\beta}_i)}$$

であるから，もし $\beta_i = 0$ ならば

$$t_i \sim t\text{-分布}_{n-p-1}$$

である．もし $\beta_i > 0$ ならば，t-分布から予想されるよりも大きな t_i が得られる可能性が高く，逆にもし $\beta_i < 0$ ならば，t-分布から予想されるよりも小さな t_i が得られる可能性が高い．

1.3　シミュレーションで確認

```
# run0074.R
# 回帰係数の分布：シミュレーション
source("run0044.R") # drawhist のロード
```

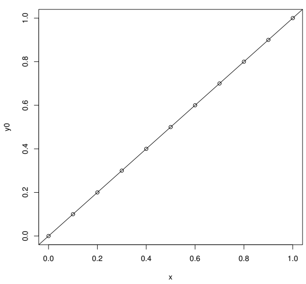


```
#n <- 11 # データサイズ
#be <- c(0,1) # 真の回帰係数 (beta0,beta1)
#x <- seq(0,1,len=n) # x を決める
#filename <- "run0074-"
p <- length(be)-1 # p+1 が回帰係数の個数
X <- cbind(1,x) # データ行列
colnames(X) <- names(be) <- c("beta0","beta1")
A <- solve(t(X) %*% X) # A=(X'X)^-1
B <- A %*% t(X) # B = (X'X)^-1 X'
sqrA <- sqrt(diag(A)) # A の対角項の平方根
func0074 <- function(y) {
  be <- B %*% y # 回帰係数の推定
  pred <- X %*% be # 予測値
  resid <- y-pred # 残差
  se2 <- sum(resid^2)/(n-p-1) # sigma^2 の不偏推定
  se <- sqrt(se2) # sigma の推定
  tval <- be/(se*sqrA) # t-統計量
  pval <- 2*pt(abs(tval),n-p-1,lower.tail=F) # p-値
  list(be=be,se2=se2,tval=tval,pval=pval)
}
y0 <- X %*% be # 真の y (誤差＝0)
sigma0 <- 0.3 # 誤差の標準偏差の真値
cat("# start simulation: ",date(),"\n")
b <- 10000 # シミュレーション繰り返し数
simy <- matrix(0,n,b) # y を格納するアレイ
simbe <- matrix(0,length(be),b) # 回帰係数を格納するアレイ
simse2 <- rep(0,b) # se2 を格納するアレイ
simtval <- matrix(0,length(be),b) # t 統計量を格納するアレイ
simpval <- matrix(0,length(be),b) # p-値を格納するアレイ
for(i in 1:b) {
  simy[,i] <- y0 + rnorm(n,mean=0,sd=sigma0)
  fit <- func0074(simy[,i])
  simbe[,i] <- fit$be; simse2[i] <- fit$se2
  simtval[,i] <- fit$tval; simpval[,i] <- fit$pval
}
cat("# end simulation: ",date(),"\n")
cat("# １回目のシミュレーション結果\n"); print(func0074(simy[,1]))
cat("# pval0 < 0.05 の回数 = ",sum(simpval[1,]<0.05),"\n")
cat("# pval1 < 0.05 の回数 = ",sum(simpval[2,]<0.05),"\n")
if(!is.null(filename)) {
  plot(x,y0); abline(be)
  dev.copy2eps(file=paste(filename,"s0.eps",sep=""))
```

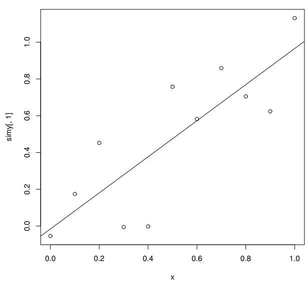


```
  plot(x,simy[,1]); abline(simbe[,1])
  dev.copy2eps(file=paste(filename,"s1.eps",sep=""))
  plot(simbe[1,],simbe[2,],pch=".",xlab="beta0",ylab="beta1")
  dev.copy2eps(file=paste(filename,"th1.eps",sep=""))
  plot(simse2,simbe[2,],pch=".",xlab="se2",ylab="beta1")
  dev.copy2eps(file=paste(filename,"th2.eps",sep=""))
  for(i in 1:2) {
    drawhist(simtval[i,],30,paste("tval",i-1,sep=""))
    t0 <- seq(min(simtval[i,]),max(simtval[i,]),len=300)
    lines(t0,dt(t0,n-p-1),col=4,lty=2)
    dev.copy2eps(file=paste(filename,"tval",i-1,".eps",sep=""))
    drawhist(simpval[i,],20,paste("pval",i-1,sep=""),filename)
  }
}
```

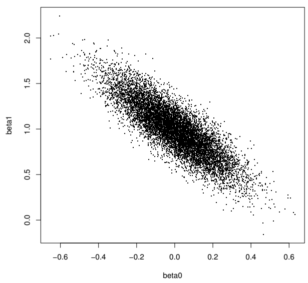
```
> n <- 11 # データサイズ
> be <- c(0,1) # 真の回帰係数 (beta0,beta1)
> x <- seq(0,1,len=n) # x を決める
> filename <- "run0074-"
> source("run0074.R")
# start simulation:  Wed Oct  6 11:45:50 2004
# end simulation:  Wed Oct  6 11:45:52 2004
# １回目のシミュレーション結果
$be
              [,1]
  beta0 -0.01592933
  beta1  0.98142543
$se2
[1] 0.05716638
$tval
             [,1]
  beta0 -0.1181108
  beta1  4.3051007
$pval
              [,1]
  beta0 0.908573939
  beta1 0.001975822

# pval0 < 0.05 の回数 =  504
# pval1 < 0.05 の回数 =  8748
```

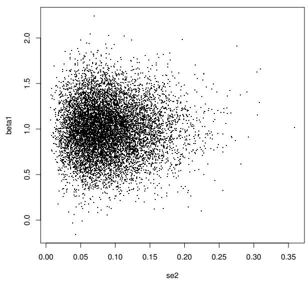
run0074-s0



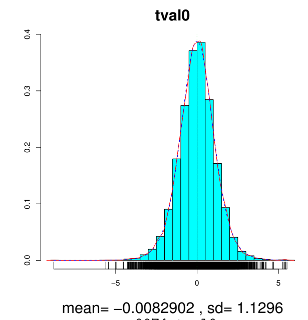
run0074-s1



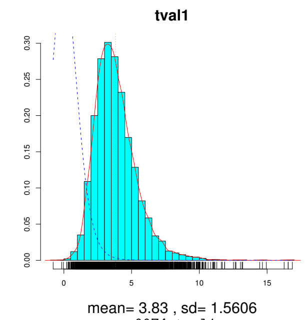
run0074-th1



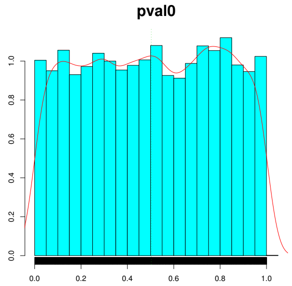
run0074-th2



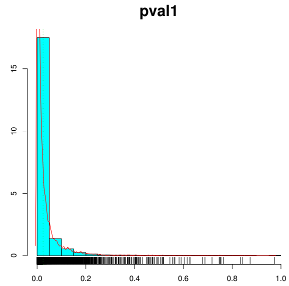
run0074-tval0



run0074-tval1



mean= 0.50308 , sd= 0.28884
run0074-pval0



mean= 0.024496 , sd= 0.058195
run0074-pval1

- $b = 10000$ 回のシミュレーション．デスクトップＰＣで計算して 2 秒程度．Pentium 1G のノートパソコン（vmware 上の linux 環境）で実行しても，３秒程度．

2　回帰係数，予測値の信頼区間

2.1　回帰係数の線形結合

- 回帰係数の線形結合を考え，その性質を調べる

$$v = w_0\beta_0 + w_1\beta_1 + \cdots + w_p\beta_p$$

$$\hat{v} = w_0\hat{\beta}_0 + w_1\hat{\beta}_1 + \cdots + w_p\hat{\beta}_p$$

- $\boldsymbol{w} = (w_0, w_1, \ldots, w_p)$ を設定することにより，

$$w_j = 1, w_k = 0, k \neq j \quad \Rightarrow \quad \hat{v} = \hat{\beta}_j$$

$$w_0 = x_{i0}, \ldots w_p = x_{ip} \quad \Rightarrow \quad \hat{v} = \hat{y}_i$$

などが表現できるので便利．

- ベクトル表現

$$v = \boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta}, \quad \hat{v} = \boldsymbol{w}'\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

- 回帰係数は多変量正規分布に従う

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

従って，$\hat{v}$ は正規分布に従う

$$\hat{v} \sim N(\boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w})$$

2.2　確率値

- 結局

$$\hat{v} \sim N(v, \sigma_v^2)$$

ただし

$$v = \boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta}, \quad \sigma_v^2 = \sigma^2\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w}$$

- σ^2 を S_ϵ^2 で推定すると，

$$\hat{\sigma}_v^2 = S_\epsilon^2\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w} = S_\epsilon^2\frac{\sigma_v^2}{\sigma^2} = \frac{\|\boldsymbol{e}\|^2/\sigma^2}{n-p-1}\sigma_v^2$$

つまり

$$(n-p-1)\frac{\hat{\sigma}_v^2}{\sigma_v^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

- 以上より，

$$\frac{\hat{v}-v}{\sigma_v} \Big/ \sqrt{\frac{\hat{\sigma}_v^2}{\sigma_v^2}} \sim t\text{-分布}_{n-p-1}$$

式を整理すると，

$$\frac{\hat{v}-v}{\hat{\sigma}_v} \sim t\text{-分布}_{n-p-1}$$

- R では自由度 $n-p-1$ の t-分布に従う確率変数 T が t 以下の値をとる確率は

$$\Pr\{T \leq t\} = \texttt{pt(t,n-p-1)}$$

とかける．これを $\mathrm{pt}(t)$ とあらわしておく．

$$\Pr\{T > t\} = \texttt{1-pt(t,n-p-1)} = \texttt{pt(t,n-p-1,lower.tail=F)}$$

というオプションも用意されていて，確率値の計算では良く用いる．

- 回帰係数の t-検定では，$\beta_i = 0$ という仮説を考えた．より一般的に，帰無仮説 $v = v_0$ を対立仮説 $v \neq v_0$ に対して検定することを考える．p-値は

$$p\text{-値}\,(v_0) = \Pr\left\{|T| > \left|\frac{\hat{v}-v_0}{\hat{\sigma}_v}\right|\right\} = 2 \times \left(1 - \mathrm{pt}\left(\left|\frac{\hat{v}-v_0}{\hat{\sigma}_v}\right|\right)\right)$$

ここで帰無仮説 $v = v_0$ の確率値を p-値 (v_0) とあらわした．これがもし p-値 $(v_0) < \alpha$ ならば，この $v = v_0$ という仮説が棄却され $v \neq v_0$ と判断される．

- 特に真値 v に関しては，

$$\frac{\hat{v}-v}{\sigma_v} \Big/ \sqrt{\frac{\hat{\sigma}_v^2}{\sigma_v^2}} \sim t\text{-分布}_{n-p-1}$$

より

$$p\text{-値}\,(v) \sim \text{一様分布}\,[0,1]$$

となり，

$$\Pr\{p\text{-値}\,(v) < \alpha\} = \alpha$$

である．

2.3　信頼区間

- 先ほど，帰無仮説 $v = v_0$ の確率値を p-値 (v_0) とあらわした．これがもし $< \alpha$ ならば，この $v = v_0$ という仮説が棄却され $v \neq v_0$ と判断される．
- この方法で棄却されない v_0 の集合を考える

$$\text{信頼区間}\,(1-\alpha) = \{v_0 \mid p\text{-値}\,(v_0) \geq \alpha\}$$

これを信頼係数（または信頼度）$1-\alpha$ の信頼区間と呼ぶ．たとえば $\alpha = 0.05$ ならば，信頼係数 0.95 の信頼区間である．

- 真値 v が信頼区間に入る確率は $1-\alpha$（以上）である．

$$\Pr\{v \in \text{信頼区間}\,(1-\alpha)\} = 1-\alpha$$

（証明）「$v \in$ 信頼区間 $(1-\alpha)$」と「p-値 $(v) \geq \alpha$」は同値である．ところが p-値 (v) は区間 [0,1] の一様分布に従うから，この事象が起こる確率は $1-\alpha$ である．

- 信頼区間を計算するために，まず $a = \mathrm{pt}(b)$ の逆関数として，$b = \mathrm{qt}(a)$ を用意する．つまり，自由度 $n-p-1$ の t-分布に従う確率変数 T が t 以下の値をとる確率がちょうど a になるような t の値を $\mathrm{qt}(a)$ と書く．

$$\Pr\{T \leq \mathrm{qt}(a)\} = a$$

R では

$$\mathrm{qt}(a) = \texttt{qt(a,n-p-1)}$$

という関数が用意されている．$0 < a < 1$ である．

- 信頼区間は

$$2 \times \left(1 - \mathrm{pt}\left(\left|\frac{\hat{v}-v_0}{\hat{\sigma}_v}\right|\right)\right) \geq \alpha$$

を整理して

$$\mathrm{pt}\left(\left|\frac{\hat{v}-v_0}{\hat{\sigma}_v}\right|\right) \leq 1-\alpha/2$$

従って，

$$\left|\frac{\hat{v}-v_0}{\hat{\sigma}_v}\right| \leq \mathrm{qt}(1-\alpha/2)$$

これを整理すると，

$$\hat{v} - \hat{\sigma}_v\mathrm{qt}(1-\alpha/2) \leq v_0 \leq \hat{v} + \hat{\sigma}_v\mathrm{qt}(1-\alpha/2)$$

つまり

$$\text{信頼区間}\,(1-\alpha) = [\hat{v} - \hat{\sigma}_v\mathrm{qt}(1-\alpha/2), \quad \hat{v} + \hat{\sigma}_v\mathrm{qt}(1-\alpha/2)]$$

2.4　回帰係数の信頼区間

- 回帰係数 β_j は $\boldsymbol{w}$ を次のようにすればよい．

$$w_j = 1, w_k = 0, k \neq j \quad \Rightarrow \quad \hat{v} = \hat{\beta}_j$$

- $V(\hat{v})$ の推定は

$$\hat{\sigma}_v^2 = S_\epsilon^2\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w} = S_\epsilon^2 a_{jj}$$

- β_j の信頼区間は

$$\text{信頼区間}\,(1-\alpha) = [\hat{\beta}_j - S_\epsilon\sqrt{a_{jj}}\mathrm{qt}(1-\alpha/2), \quad \hat{\beta}_j + S_\epsilon\sqrt{a_{jj}}\mathrm{qt}(1-\alpha/2)]$$

2.5　予測値の信頼区間

- 説明変数が $\boldsymbol{x} = (1, x_1, \ldots, x_p)'$ の時の予測値は $\hat{y} = \boldsymbol{x}'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ である．この「真値」は $y = \boldsymbol{x}'\boldsymbol{\beta}$ である．$v = y$ とするには $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{x}$ とおけばよい．
- $V(\hat{v})$ の推定は

$$\hat{\sigma}_v^2 = S_\epsilon^2\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w} = S_\epsilon^2\boldsymbol{x}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{x}$$

- y の信頼区間は

$$\text{信頼区間}\,(1-\alpha) = [\boldsymbol{x}'\hat{\boldsymbol{\beta}} - S_\epsilon\sqrt{\boldsymbol{x}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{x}}\,\mathrm{qt}(1-\alpha/2), \ \boldsymbol{x}'\hat{\boldsymbol{\beta}} + S_\epsilon\sqrt{\boldsymbol{x}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{x}}\,\mathrm{qt}(1-\alpha/2)]$$

```
# run0075.R
# 回帰係数と予測値の信頼区間：多項式回帰
# x=説明変数のベクトル，y=目的変数のベクトル，p=多項式の次数
# a <- func0075a(x,p); b <- func0075b(y,0.05,a)
xpow <- function(a,p) a^(0:p) # c(a^0,a^1,...,a^p)
calcX <- function(x,p) { # デザイン行列 X を作る
  X <- matrix(0,length(x),p+1)
  for(i in 1:length(x)) X[i,] <- xpow(x[i],p)
  X
}
calcq0 <- function(n,p,alpha) qt(1-alpha/2,n-p-1) # 個別の信頼区間
calcq1 <- function(n,p,alpha) sqrt((p+1)*qf(1-alpha,p+1,n-p-1)) # 同時信頼区間
func0075a <- function(x,p) { # 回帰分析の準備
  X <- calcX(x,p) # データ行列
  colnames(X) <- paste("beta",0:p,sep="")
  A <- solve(t(X) %*% X) # A=(X'X)^-1
  B <- A %*% t(X) # B = (X'X)^-1 X'
  sqrA <- sqrt(diag(A)) # A の対角項の平方根
  x0 <- seq(min(x),max(x),len=300) # x の範囲を 300 等分しておく
```

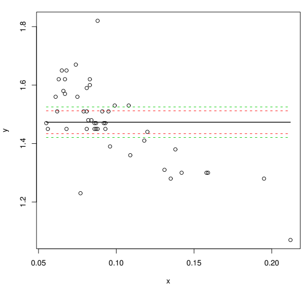
```
  X0 <- calcX(x0,p) # x0に相当するデータ行列
  sqrXAX <- apply(X0,1,function(x) sqrt(t(x) %*% A %*% x))
                                          # sqrt(x'Ax)のベクトル
  list(X=X,A=A,B=B,sqrA=sqrA,x0=x0,X0=X0,sqrXAX=sqrXAX)
}
func0075b <- function(y,alpha,a,calcq=calcq0) { # 信頼区間の計算
  n <- nrow(a$X); p <- ncol(a$X)-1
  q0 <- calcq(n,p,alpha)
  be <- a$B %*% y # 回帰係数の推定
  pred <- a$X %*% be # 予測値
  resid <- y-pred # 残差
  rss <- sum(resid^2) # 残差平方和
  se2 <- rss/(n-p-1) # sigma^2の不偏推定
  se <- sqrt(se2) # sigmaの推定
  bese <- se*a$sqrA # 回帰係数の標準誤差
  rsq <- 1-rss/sum((y-mean(y))^2) # 決定係数
  tval <- be/(se*a$sqrA) # t-統計量
  pval <- 2*pt(abs(tval),n-p-1,lower.tail=F) # p-値
  beconf <- cbind(be-q0*se*a$sqrA,be+q0*se*a$sqrA) # 信頼区間
  pred0 <- a$X0 %*% be # 予測値(x0)
  pred0conf <- cbind(pred0-q0*se*a$sqrXAX,pred0+q0*se*a$sqrXAX)
  list(be=be,bese=bese,se=se,rss=rss,rsq=rsq,tval=tval,pval=pval,
       beconf=beconf,pred0=pred0,pred0conf=pred0conf)
}
func0075c <- function(x,y,a,b,col=2,lty=2,add=F) {
  if(!add) plot(x,y)
  lines(a$x0,b$pred0)
  lines(a$x0,b$pred0conf[,1],col=col,lty=lty)
  lines(a$x0,b$pred0conf[,2],col=col,lty=lty)
  coef <- cbind(b$be,b$bese,b$tval,b$pval,b$beconf)
  colnames(coef) <- c("Estimate","StdErr",
                    "t-value","p-value","Lower","Upper")
  invisible(list(coef=coef,se=b$se,rss=b$rss,rsq=b$rsq))
}
```

```
# run0076.R
# 回帰係数と予測値の信頼区間：多項式回帰 p次まで
# x=説明変数ベクトル，y=目的変数ベクトル，p=多項式次数をセットしておく
source("run0075.R")
for(i in 0:p) {
  cat("# 次数=",i,"\n")
```

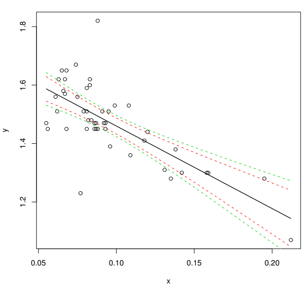


```
  a <- func0075a(x,i)
  c1 <- func0075c(x,y,a,func0075b(y,0.05,a))
  c2 <- func0075c(x,y,a,func0075b(y,0.01,a),col=3,add=T)
  colnames(c1$coef)[5:6] <- c("Lo05","Up05")
  colnames(c2$coef)[5:6] <- c("Lo01","Up01")
  coef <- cbind(c1$coef,c2$coef[,5:6,drop=F])
  cat("RSS=",c1$rss,", RSQ=",c1$rsq,"\n")
  print(round(coef,3))
  dev.copy2eps(file=paste("run0076-s",i,".eps",sep=""))
}
```

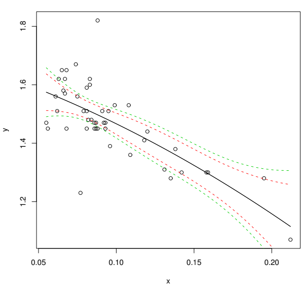
```
> dat <- read.table("dat0001.txt") # データの読み込み (47 x 2行列)
> x <- dat[,1]/100; y <- dat[,2]
> p <- 3
> source("run0076.R")
# 次数= 0
RSS= 0.815383 , RSQ= 0
      Estimate StdErr t-value p-value  Lo05  Up05  Lo01  Up01
beta0    1.473  0.019  75.848       0 1.434 1.512 1.421 1.525
# 次数= 1
RSS= 0.3812667 , RSQ= 0.5324078
      Estimate StdErr t-value p-value   Lo05   Up05   Lo01   Up01
beta0    1.742  0.040  43.592       0  1.662  1.823  1.635  1.850
beta1   -2.825  0.395  -7.158       0 -3.620 -2.030 -3.886 -1.763
# 次数= 2
RSS= 0.3786836 , RSQ= 0.5355758
      Estimate StdErr t-value p-value    Lo05   Up05    Lo01   Up01
beta0    1.681  0.120  14.043   0.000   1.440  1.922   1.359  2.003
beta1   -1.672  2.141  -0.781   0.439  -5.987  2.642  -7.436  4.091
beta2   -4.698  8.576  -0.548   0.587 -21.983 12.586 -27.788 18.391
# 次数= 3
RSS= 0.3747561 , RSQ= 0.5403926
      Estimate  StdErr t-value p-value     Lo05    Up05     Lo01    Up01
beta0    1.462   0.347   4.212   0.000    0.762   2.162    0.527   2.398
beta1    4.415   9.320   0.474   0.638  -14.381  23.211  -20.704  29.534
beta2  -56.680  77.913  -0.727   0.471 -213.807 100.447 -266.664 153.304
beta3  135.499 201.844   0.671   0.506 -271.559 542.557 -408.492 679.491
```

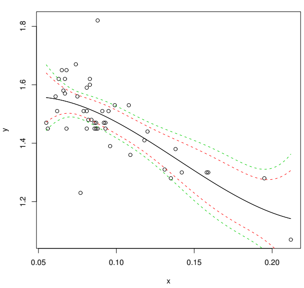
run0076-s0



run0076-s1



run0076-s2



run0076-s3

- 各次数 $p = 0, 1, 2, 3$ のグラフを描いた．予測値とその信頼区間も示した．赤は $\alpha = 0.05$，緑は $\alpha = 0.01$ である．
- 次数を上げると $\mathrm{RSS} = \|\boldsymbol{e}\|^2$（残差平方和）は小さくなる．決定係数 R^2 は大きくなる．いずれも，次数の増加とともに，回帰の当てはまりがよくなることを示唆する．
- ところがグラフを見ると，次数 $p = 1$ くらいで十分な感じ．いったい，次数はいくつにするのが適切なのか？
- 回帰係数の t 検定の確率値を順番にみていく
  1. 次数 $p = 0$ のとき，$\beta_0 = 0$ を検定する確率値は，ほぼゼロ．つまり $\beta_0 \neq 0$ と結論．つまり，$p \geq 0$ が示唆される．
  2. 次数 $p = 1$ のとき，$\beta_0 = 0$ を検定する確率値は，ほぼゼロ．つまり $\beta_0 \neq 0$ と結論．同様に $\beta_1 \neq 0$ と結論．つまり，$p \geq 1$ が示唆される．

  3. 次数 $p = 2$ のとき，$\beta_0 = 0$ を検定する確率値は，ほぼゼロ．つまり $\beta_0 \neq 0$ と結論．ところが $\beta_1 = 0$ を検定する確率値は 0.439 なので $\beta_1 = 0$ と結論．同様に $\beta_2 = 0$ と結論．これは $p = 0$ を示唆？　矛盾？
  4. 次数 $p = 3$ のときは，$\beta_0 \neq 0$，$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = 0$ と結論．これは $p = 0$ を示唆？矛盾？
- この例からも分かるように，回帰係数の t-検定は解釈に注意する．
- この場合は，$p = 1$ と判断するのが適切．次数 $p = 2$ のチェックのときは，$\beta_2 = 0$ or $\beta_2 \neq 0$ だけをチェックすべき．

3　回帰モデルの F 検定

3.1　部分モデル

- これまで p 個の説明変数の重回帰モデルを考えた

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

ベクトル表現すると

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

- 最初の k 個の説明変数だけを用いる重回帰モデルを考える（例：多項式回帰で次数を p から k に変更する）

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$$

ベクトル表現すると

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}^{(k)}\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \boldsymbol{\epsilon}$$

ただし

$$\boldsymbol{X}^{(k)} = (\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k), \quad \boldsymbol{\beta}^{(k)} = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k)'$$

- なお，

$$\boldsymbol{X}^{(-k)} = (\boldsymbol{x}_{k+1}, \boldsymbol{x}_{k+2}, \ldots, \boldsymbol{x}_p), \quad \boldsymbol{\beta}^{(-k)} = (\beta_{k+1}, \beta_{k+2}, \ldots, \beta_p)'$$

とおけば

$$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{X}^{(k)}, \boldsymbol{X}^{(-k)}), \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}^{(k)} \\ \boldsymbol{\beta}^{(-k)} \end{bmatrix}$$

と分割してかける．

- 回帰係数 $\boldsymbol{\beta}^{(k)}$ の最小二乗推定は，

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)} = (\boldsymbol{X}^{(k)\prime}\boldsymbol{X}^{(k)})^{-1}\boldsymbol{X}^{(k)\prime}\boldsymbol{y}$$

$i = 0, \ldots, k$ について，一般に $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(k)}$ の第 i 成分と $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の第 i 成分は一致しない．

- p 個の説明変数をもつモデルにおいて，

$$\beta_{k+1} = \beta_{k+2} = \cdots = \beta_p = 0$$

と設定すれば，k 個の説明変数をもつモデルになる．したがって，後者は前者の「部分モデル」または「部分回帰」と呼ばれる．

- ここでは最初の k 個の説明変数としたが，添え字を付け替えることにより，実際にはどの k 個を選んでも，同様な議論ができる．

- さらに以降の議論で本質的なのは，

$$\mathrm{Span}(\boldsymbol{x}_0, \ldots, \boldsymbol{x}_k) \subset \mathrm{Span}(\boldsymbol{x}_0, \ldots, \boldsymbol{x}_p)$$

ということなので，説明変数の線形結合をとっても良い．

3.2 残差平方和と F 検定

- 回帰モデル (k) のハット行列

$$\boldsymbol{H}^{(k)} = \boldsymbol{X}^{(k)}(\boldsymbol{X}^{(k)\prime}\boldsymbol{X}^{(k)})^{-1}\boldsymbol{X}^{(k)\prime}$$

予測値のベクトル

$$\hat{\boldsymbol{y}}^{(k)} = \boldsymbol{H}^{(k)}\boldsymbol{y}$$

残差ベクトル

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}^{(k)} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H}^{(k)})\boldsymbol{y}$$

- 回帰モデル (k) の残差平方和は

$$\mathrm{RSS}^{(k)} = \|\boldsymbol{e}^{(k)}\|^2$$

である．もしモデル (k) が正しければ，

$$\frac{\mathrm{RSS}^{(k)}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-k-1}$$

である．さらに残差平方和の差

$$\frac{\mathrm{RSS}^{(k)} - \mathrm{RSS}^{(p)}}{\sigma^2} = \frac{\|\boldsymbol{e}^{(k)}\|^2}{\sigma^2} - \frac{\|\boldsymbol{e}^{(p)}\|^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{p-k}$$

である．これと

$$\frac{\mathrm{RSS}^{(p)}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

は互いに独立である．

- もしモデル (k) が正しくない場合，$\frac{\mathrm{RSS}^{(k)}}{\sigma^2}$ は「非心カイ二乗分布」という分布に従う．

- モデル (k) が正しければ，

$$F = \frac{(\mathrm{RSS}^{(k)} - \mathrm{RSS}^{(p)})/(p-k)}{\mathrm{RSS}^{(p)}/(n-p-1)}$$

は互いに独立な自由度 $p-k$ のカイ二乗と自由度 $n-p-1$ のカイ二乗の比であり，したがって，自由度 $p-k, n-p-1$ の F 分布に従う．

$$F \sim F_{p-k,n-p-1}$$

- F 分布の分布関数は R の関数 pf で計算できる．一般に X が自由度 m, n の F 分布に従うとき，この分布関数は

$$\Pr\{X \le x\} = \mathtt{pf(x,m,n)}$$

$$\Pr\{X > x\} = 1 - \mathtt{pf(x,m,n)} = \mathtt{pf(x,m,n,lower.tail=F)}$$

pf の逆関数は qf である．

$$\Pr\{X \le \mathtt{qf(a,m,n)}\} = \mathtt{a}$$

である．

```
# run0077.R
# F検定
fkentei <- function(fitk,fitp) {
  rssk <- sum(resid(fitk)^2) # RSS^(k)
  rssp <- sum(resid(fitp)^2) # RSS^(p)
  dfk <- df.residual(fitk) # n-k-1
  dfp <- df.residual(fitp) # n-p-1
  bunshi <- (rssk - rssp)/(dfk-dfp) # (RSS^(k)-RSS^(p))/(p-k)
  bunbo <- rssp/dfp # RSS^(p) / (n-p-1)
  fvalue <- bunshi/bunbo # F統計量
  pvalue <- pf(fvalue,dfk-dfp,dfp,lower.tail=F)
  list(fvalue=fvalue,df1=dfk-dfp,df2=dfp,pvalue=pvalue)
}
```

```
> source("run0077.R")
> # 多項式回帰
> dat <- read.table("dat0001.txt") # データの読み込み (47 x 2行列)
> x <- dat[,1]/100; y <- dat[,2]
> fit0 <- lm(y ~ 1, data.frame(x,y)) # k=0
> fit1 <- lm(y ~ x, data.frame(x,y)) # k=1
> fit2 <- lm(y ~ x + I(x^2), data.frame(x,y)) # k=2
> summary(fit2) # k=2のサマリ

Call:
lm(formula = y ~ x + I(x^2), data = data.frame(x, y))

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.29411 -0.04875 -0.00797  0.04600  0.32282

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   1.6807     0.1197  14.043   <2e-16 ***
```



```
x             -1.6725     2.1408  -0.781    0.439
I(x^2)        -4.6985     8.5762  -0.548    0.587
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 0.09277 on 44 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.5356,Adjusted R-squared: 0.5145
F-statistic: 25.37 on 2 and 44 DF,  p-value: 4.7e-08

> unlist(fkentei(fit0,fit2)) # 上のF検定はコレ!
      fvalue          df1          df2       pvalue
2.537048e+01 2.000000e+00 4.400000e+01 4.700319e-08
> unlist(fkentei(fit1,fit2)) # 上のt検定(x^2の項)はコレ!
    fvalue        df1        df2     pvalue
 0.3001376  1.0000000 44.0000000  0.5865649
> sqrt(0.3001376) # これがt統計量(x^2の項)の絶対値
[1] 0.5478482
```

- F 検定は，モデル (k) からモデル (p) に変更したときに，当てはまり（ＲＳＳ値）がどれだけ改善したかをチェックしている．

- 特によく利用されるのは次の２パターン

1. $k=0$ とする．これは $y=$ 定数 というモデルと比較して，モデル (p) の回帰が意味あるのかどうかを調べる．これで F 検定の p-value が $<\alpha$ となり有意だとしても，p 個の説明変数すべてが必要であるという意味ではない．(その一部で十分かもしれない．)
2. $k=p-1$ とする．これは説明変数 x_p が必要かどうかをチェックし，回帰係数 $\beta_p = 0$ or $\beta_p \ne 0$ を判定する．数学的に β_p の t- 検定と等価．（おなじ確率値になる．）また，統計量も $|t|^2 = F$ の関係がある．したがって，通常 F 検定ではなくて，t-検定として実装されている．

3.3 尤度比検定∗

- 一般の確率モデルの比較では，F 検定の変わりに尤度比検定が適用できる．

- 尤度比検定を重回帰モデルに適用すると，F 検定とほぼ同じ結果になる．

- モデル１とモデル２は互いに包含関係（ネスト）であり，モデル２はモデル１を一般化したものとする．モデル１はモデル２の特殊な場合になる．
（重回帰モデルの例）モデル１＝モデル (k)，モデル２＝モデル (p)．

- まず二つの確率モデルの対数尤度を $\ell_1(\theta_1)$，$\ell_2(\theta_2)$ とする．ここで θ_1 と θ_2 はパラメタベクトルで，次元はそれぞれ $p_1 = \dim\theta_1, p_2 = \dim\theta_2$ とおく．
（重回帰モデルの例）$\theta_1 = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k, \sigma)$，$\theta_2 = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p, \sigma)$，$p_1 = k+2$，$p_2 = p+2$．

- パラメタの最尤推定を $\hat\theta_1, \hat\theta_2$，最大対数尤度を $\ell_1(\hat\theta_1)$，$\ell_2(\hat\theta_2)$ と書く．
（重回帰モデルの例）

$$\ell_1(\hat\theta_1) = \ell(\hat\beta_0, \hat\beta_1, \ldots, \hat\beta_k, \hat\sigma) = -\frac{n}{2}\left\{1 + \log(2\pi\frac{\mathrm{RSS}^{(k)}}{n})\right\}$$

$$\ell_2(\hat\theta_1) = \ell(\hat\beta_0, \hat\beta_1, \ldots, \hat\beta_p, \hat\sigma) = -\frac{n}{2}\left\{1 + \log(2\pi\frac{\mathrm{RSS}^{(p)}}{n})\right\}$$

- モデル１が正しいとき，対数尤度の差の２倍は，**近似的に** カイ二乗分布に従う．自由度は $p_2 - p_1$ である．(n が十分大きいとき，近似がよくなる)．つまり

$$2 \times (\ell_2(\hat\theta_1) - \ell_1(\hat\theta_2)) \sim \chi^2_{p_2-p_1}$$

（重回帰モデルの例）

$$2 \times (\ell_2(\hat\theta_1) - \ell_1(\hat\theta_2)) = n\log\mathrm{RSS}^{(k)} - n\log\mathrm{RSS}^{(p)} \sim \chi^2_{p-k}$$

```
# run0081.R
# 尤度比検定
yudohikentei <- function(fitk,fitp) {
  rssk <- sum(resid(fitk)^2) # RSS^(k)
  rssp <- sum(resid(fitp)^2) # RSS^(p)
  dfk <- df.residual(fitk) # n-k-1
  dfp <- df.residual(fitp) # n-p-1
  n <- length(resid(fitk)) # n
  chisqvalue <- n*(log(rssk)-log(rssp)) # 尤度比統計量
  pvalue <- pchisq(chisqvalue,dfk-dfp,lower.tail=F)
  list(chisqvalue=chisqvalue,df=dfk-dfp,n=n,pvalue=pvalue)
}
```

```
> dat <- read.table("dat0001.txt") # データの読み込み (47 x 2行列)
> x <- dat[,1]/100; y <- dat[,2]
> fit0 <- lm(y ~ 1, data.frame(x,y)) # k=0
> fit1 <- lm(y ~ x, data.frame(x,y)) # k=1
> fit2 <- lm(y ~ x + I(x^2), data.frame(x,y)) # k=2
> source("run0081.R")
> unlist(fkentei(fit0,fit2)) # F検定
      fvalue          df1          df2       pvalue
2.537048e+01 2.000000e+00 4.400000e+01 4.700319e-08
> unlist(yudohikentei(fit0,fit2)) # 尤度比検定
  chisqvalue           df            n       pvalue
3.604697e+01 2.000000e+00 4.700000e+01 1.487646e-08
> unlist(fkentei(fit1,fit2)) # F検定
```

```
    fvalue        df1        df2     pvalue
 0.3001376  1.0000000 44.0000000  0.5865649
> unlist(yudohikentei(fit1,fit2)) # 尤度比検定
chisqvalue         df          n     pvalue
 0.3195130  1.0000000 47.0000000  0.5719005
```

3.4 QR 分解

- 最小二乗法の計算では，通常，QR 分解と呼ばれる行列の分解をしている．

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$$

ここで，$\boldsymbol{X}$ はサイズ $n \times (p+1)$，$\boldsymbol{Q}$ はサイズ $n \times (p+1)$，$\boldsymbol{R}$ はサイズ $(p+1) \times (p+1)$．$\boldsymbol{Q}$ の列は互いに直交していて，$\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}_{p+1}$ である．$\boldsymbol{R}$ は上三角行列である．

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \boldsymbol{R}'\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}$$

$$(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} = (\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R})^{-1} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{R}^{-1'}$$

- QR 分解は，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の計算時に利用される．

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{R}^{-1'}\boldsymbol{R}'\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{y} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{y}$$

まず $\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{y}$ を計算した後，$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{y})$ の計算時には R^{-1} を計算する必要はない．$\boldsymbol{R}$ が上三角であることを利用して，$\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{y}$ と $\boldsymbol{R}$ から直接 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ を計算するアルゴリズムがあり，このほうが $\boldsymbol{R}^{-1}$ を経由するより演算数が少ないし，数値的にも安定する．

```
> X <- matrix(c(1^(1:5),2^(1:5),3^(1:5)),5,3)
> X
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    1    2    3
[2,]    1    4    9
[3,]    1    8   27
[4,]    1   16   81
[5,]    1   32  243
> QR <- qr(X)
> R <- qr.R(QR)
> Q <- qr.Q(QR)
> R
          [,1]      [,2]       [,3]
[1,] -2.236068 -27.72724 -162.33854
[2,]  0.000000  24.39672  197.92824
[3,]  0.000000   0.00000   29.99355
> Q
           [,1]       [,2]       [,3]
```



```
[1,] -0.4472136 -0.4262868  0.4925791
[2,] -0.4472136 -0.3443086  0.1516455
[3,] -0.4472136 -0.1803521 -0.3301785
[4,] -0.4472136  0.1475608 -0.6936976
[5,] -0.4472136  0.8033866  0.3796515
> Q %*% R
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    1    2    3
[2,]    1    4    9
[3,]    1    8   27
[4,]    1   16   81
[5,]    1   32  243
> t(Q) %*% Q
              [,1]          [,2]          [,3]
[1,]  1.000000e-00 -8.180305e-17  1.924459e-17
[2,] -8.180305e-17  1.000000e-00 -1.428436e-17
[3,]  1.924459e-17 -1.428436e-17  1.000000e-00
```

3.5 F 検定のつづき∗

- まえに議論した直交基底

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n)$$

をうまく定義すると，

$$\boldsymbol{H}^{(k)} = (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{k+1})(\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{k+1})', \quad k = 0, \ldots, p$$

とできる．$\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p$ を順番にグラム・シュミットの直交化すればよい．じつは QR 分解 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ は，これと同等の計算をしている（ここでは述べないが，グラム・シュミットの直交化よりも効率の良いアルゴリズム）．$\boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{q}_i, i = 1, \ldots, p+1$，のこりの $\boldsymbol{u}_{p+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ はこれらと直交する適当な基底を選べばよい．

- 回帰モデル (p) で正規モデルを仮定する．

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

$$\boldsymbol{\epsilon} \sim N_n(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I}_n)$$

これは

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}^{(k)}\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \boldsymbol{X}^{(-k)}\boldsymbol{\beta}^{(-k)} + \boldsymbol{\epsilon}$$

ともかけるので，回帰モデル (k) の残差ベクトルは

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H}^{(k)})\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H}^{(k)})(\boldsymbol{X}^{(-k)}\boldsymbol{\beta}^{(-k)} + \boldsymbol{\epsilon})$$

もし $\boldsymbol{\beta}^{(-k)} = \boldsymbol{0}$ ならば

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H}^{(k)})\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{H}^{(k)})\boldsymbol{\epsilon} = (\boldsymbol{u}_{k+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_n)(\boldsymbol{u}_{k+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_n)'\boldsymbol{\epsilon}$$

したがって，$z_i = \boldsymbol{u}'\boldsymbol{\epsilon}/\sigma,\ i = 1, \ldots, n$ とおけば，

$$\frac{\|\boldsymbol{e}^{(k)}\|^2}{\sigma^2} = z_{k+2}^2 + \cdots + z_n^2$$

- 結局，モデル (k) が正しいとき，

$$\frac{\mathrm{RSS}^{(k)}}{\sigma^2} = \frac{\|\boldsymbol{e}^{(k)}\|^2}{\sigma^2} = z_{k+2}^2 + \cdots + z_n^2 \sim \chi^2_{n-k-1}$$

$$\frac{\mathrm{RSS}^{(p)}}{\sigma^2} = \frac{\|\boldsymbol{e}^{(p)}\|^2}{\sigma^2} = z_{p+2}^2 + \cdots + z_n^2 \sim \chi^2_{n-p-1}$$

$$\frac{\mathrm{RSS}^{(k)} - \mathrm{RSS}^{(p)}}{\sigma^2} = \frac{\|\boldsymbol{e}^{(k)}\|^2}{\sigma^2} - \frac{\|\boldsymbol{e}^{(p)}\|^2}{\sigma^2} = z_{k+2}^2 + \cdots + z_{p+1}^2 \sim \chi^2_{p-k}$$

そして，$\mathrm{RSS}^{(p)}$ と $\mathrm{RSS}^{(k)} - \mathrm{RSS}^{(p)}$ は，互いに共通の z_i を含まないので，独立．

4 予測式の信頼区間（同時信頼区間）

4.1 回帰係数ベクトルの同時信頼域

- 復習

  1. 正規回帰モデルを仮定する．回帰係数の最小二乗推定 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は多変量正規分布に従う．

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

  2. 誤差分散 σ^2 の不偏推定 S_ϵ^2 は

  $$\frac{(n-p-1)S_\epsilon^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-p-1}$$

  であり，これは $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ とは独立である．

- ここで，適当な $(p+1) \times (p+1)$ 行列 $\boldsymbol{R}$ を選ぶと，

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X} = \boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}$$

とできることに注意する．具体的には，前に説明した QR 分解 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ から得られる $\boldsymbol{R}$ でよい．

$$(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} = (\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R})^{-1} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{R}^{-1'}$$

- $p+1$ ベクトル $\boldsymbol{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_{p+1})'$ を

$$\boldsymbol{z} = \frac{1}{\sigma}\boldsymbol{R}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})$$

で定義する．$\boldsymbol{z}$ は多変量正規分布に従い，平均は $E(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{0}$，分散は

$$V(\boldsymbol{z}) = \frac{1}{\sigma}\boldsymbol{R}\sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{R}'\frac{1}{\sigma} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{R}^{-1'}\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{I}_{p+1}$$

従って，

$$\boldsymbol{z} \sim N_{p+1}(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_{p+1})$$

成分で書けば，

$$z_1, z_2, \ldots, z_{p+1} \sim N(0, 1)$$

でこれらは互いに独立．

- 以上より，

$$F = \frac{\|\boldsymbol{z}\|^2/(p+1)}{S_\epsilon^2/\sigma^2} \sim F_{p+1, n-p-1}$$

は自由度 $p+1, n-p-1$ の F 分布に従う．$\|\boldsymbol{z}\|^2 = \|\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})\|^2/\sigma^2$ を代入すると，

$$F = \frac{\|\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})\|^2}{(p+1)S_\epsilon^2}$$

である．

- $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の信頼域（信頼係数 or 信頼度$=1-\alpha$）を作るには次のように考える．

$$\mathrm{qf}(a) = \mathtt{qf}(\mathtt{a}, \mathtt{p+1}, \mathtt{n-p-1})$$

と置けば，

$$\Pr\{F \le \mathrm{qf}(1-\alpha)\} = 1 - \alpha$$

である．そこで

$$\text{信頼域}\,(1-\alpha) = \left\{\boldsymbol{\beta} \quad : \quad (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})(\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \le (p+1)S_\epsilon^2\mathrm{qf}(1-\alpha)\right\}$$

と定めれば，これは $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ を中心とする楕円体である．そして

$$\Pr\{\boldsymbol{\beta} \in \text{信頼域}\,(1-\alpha)\} = 1 - \alpha$$

である．

- 信頼域を実際にグラフ描いてみるには，

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta}, \quad \hat{\boldsymbol{\gamma}} = \boldsymbol{R}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

と回帰係数を変数変換して $\boldsymbol{\gamma}$ のほうで考えたほうが分かりやすい．それを $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{\gamma}$ で戻せばよい．$\boldsymbol{\gamma}$ の信頼域は

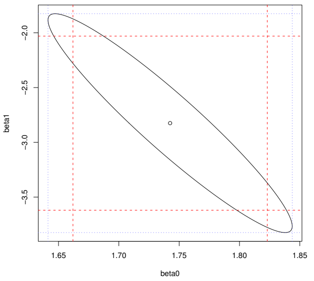
$$\left\{\boldsymbol{\gamma} \quad : \quad \|\boldsymbol{\gamma} - \hat{\boldsymbol{\gamma}}\|^2 \le (p+1)S_\epsilon^2\mathrm{qf}(1-\alpha)\right\}$$

であるから $\hat{\gamma}$ を中心とする半径 $S_\epsilon\sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}$ の球体．

```
# run0078.R
# 回帰係数の信頼域：単回帰
# x=説明変数のベクトル，y=目的変数のベクトル
source("run0075.R")
p <- 1 # 単回帰なので次数=1
n <- length(y) # サンプルサイズ
alpha <- 0.05 # 信頼係数=1-alpha
a <- func0075a(x,p) # 回帰分析の準備
a$QR <- qr(a$X); a$R <- qr.R(a$QR) # QR 分解
a$IR <- solve(a$R) # R^-1
b0 <- func0075b(y,alpha,a) # 回帰係数など
```

```
th <- seq(0,2*pi,len=300) # 描画の範囲（0..2*pi を 300 等分）
ga <-  b0$se*calcq1(n,p,alpha)*rbind(cos(th),sin(th)) # gamma でみた円
be <- as.vector(b0$be) + a$IR %*% ga # beta の信頼域（楕円）
plot(t(be),type="l") # 楕円
points(t(b0$be)) # 中心
abline(v=b0$beconf[1,],lty=2,col=2) # beta0 の信頼区間（赤）
abline(h=b0$beconf[2,],lty=2,col=2) # beta1 の信頼区間（赤）
b1 <- func0075b(y,alpha,a,calcq1) # calcq1 を使ってもう一度
abline(v=b1$beconf[1,],lty=3,col=4) # beta0 の同時信頼区間（青）
abline(h=b1$beconf[2,],lty=3,col=4) # beta1 の同時信頼区間（青）
dev.copy2eps(file="run0078-b.eps")
coef <- cbind(b0$be,b0$beconf,b1$beconf)
colnames(coef) <- c("Estimate","Lo","Up","JointLo","JointUp")
print(coef)
```

```
> dat <- read.table("dat0001.txt") # データの読み込み (47 x 2 行列)
> x <- dat[,1]/100; y <- dat[,2]
> source("run0078.R")
       Estimate         Lo         Up    JointLo    JointUp
beta0  1.742483  1.661974  1.822993  1.641291  1.843676
beta1 -2.824869 -3.619719 -2.030019 -3.823917 -1.825821
```



run0078-b

- 単回帰の例：$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1)'$ の同時信頼域（楕円）を描いた．以下すべて $\alpha = 0.05$ とした．

$$\Pr\{\boldsymbol{\beta} \in \text{同時信頼域}\} = 1 - \alpha$$

- 各回帰係数 $\beta_i,\ i = 0, 1$ の信頼区間を直線で示した（赤）．これは各係数を別々に見て信頼区間を t-検定から得ている．つまり，

$$\Pr\{\beta_0 \in \text{信頼区間}_0\} = 1 - \alpha$$

$$\Pr\{\beta_1 \in \text{信頼区間}_1\} = 1 - \alpha$$

であるが，一般に

$$\Pr\{\beta_0 \in \text{信頼区間}_0, \quad \beta_1 \in \text{信頼区間}_1\} < 1 - \alpha$$

となる可能性がある．

- 各係数について，同時信頼域の最小値，最大値を直線（青）で示した．これを「同時信頼区間」と呼ぶと

$$\Pr\{\beta_0 \in \text{同時信頼区間}_0, \quad \beta_1 \in \text{同時信頼区間}_1\} \geq 1 - \alpha$$

である．$\boldsymbol{\beta}$ の集合としてみると，同時信頼域より大きくなってしまっている．

4.2 回帰式の信頼区間

- 「回帰式の信頼区間」，言い換えると，「予測値の同時信頼区間」を求める． 一般には，回帰係数の線形結合 $v = \boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta}$ の同時信頼区間を考える．
- 同時ではない，個別の信頼区間は以前求めた．

$$\text{信頼区間}\ (1-\alpha) = [\hat{v} - \hat{\sigma}_v \mathrm{qt}(1-\alpha/2), \quad \hat{v} + \hat{\sigma}_v \mathrm{qt}(1-\alpha/2)]$$

ただし

$$\hat{\sigma}_v = S_\epsilon \sqrt{\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w}}$$

$$\mathrm{qt}(a) = \mathtt{qt(a,n-p-1)}$$

この信頼区間は

$$\Pr\{v \in \text{信頼区間}\ (1-\alpha)\} = 1 - \alpha$$

を満たす．

- ここで求めたい「同時信頼区間」は，$\boldsymbol{w}$ に関する任意の集合 W に対して，

$$\Pr\{\boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta} \in \text{同時信頼区間}_{\boldsymbol{w}}(1-\alpha), \quad \boldsymbol{w} \in W\} \geq 1 - \alpha$$

となるようなものである．

- (例) 前節で求めた，回帰係数 β_0 と β_1 は集合 W の要素が二つの場合に相当する．そこで求めた同時信頼区間は

$$\Pr\{\beta_0 \in \text{同時信頼区間}_0, \quad \beta_1 \in \text{同時信頼区間}_1\} \geq 1 - \alpha$$

を満たしていた．

- 導出は後ほど述べるが，結論としては，次のように計算すればよい．

$$\text{同時信頼区間}_{\boldsymbol{w}}(1-\alpha) = [\hat{v} - \hat{\sigma}_v\sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}, \quad \hat{v} + \hat{\sigma}_v\sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}]$$

ただし

$$\mathrm{qf}(a) = \mathtt{qf}(\mathtt{a}, \mathtt{p}+1, \mathtt{n}-\mathtt{p}-1)$$

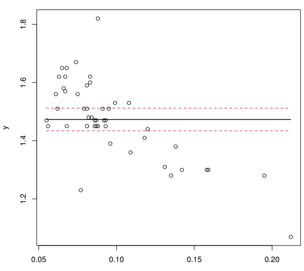
である．

```
# run0079.R
# 回帰係数と予測値の同時信頼区間：多項式回帰
# x=説明変数のベクトル，y=目的変数のベクトル，p=多項式の次数，alpha も．
source("run0075.R")
func0079 <- function(x,y,a,alpha,output=T) {
  b0 <- func0075b(y,alpha,a)
  b1 <- func0075b(y,alpha,a,calcq1)
  coef <- cbind(b0$be,b0$bese,b0$tval,b0$pval,b0$beconf,b1$beconf)
  colnames(coef) <- c("Estimate","StdErr","t-value","p-value",
                      "Lo","Up","JointLo","JointUp")
  if(output) {
    func0075c(x,y,a,b0); func0075c(x,y,a,b1,col=4,lty=3,add=T)
    cat("RSS=",b0$rss,", RSQ=",b0$rsq,"\n")
    print(round(coef,3))
  }
  list(b0=b0,b1=b1,coef=coef)
}
func0079b <- function(x,y,p,alpha,filename="run0079-") {
  for(i in 0:p) {
    cat("# 次数=",i,"\n")
    a <- func0075a(x,i)
    func0079(x,y,a,alpha)
    if(!is.null(filename))
      dev.copy2eps(file=paste(filename,"s",i,".eps",sep=""))
  }
}
```

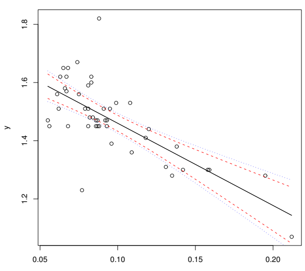
```
> source("run0079.R")
> dat <- read.table("dat0001.txt") # データの読み込み (47 x 2 行列)
> x <- dat[,1]/100; y <- dat[,2]
> p <- 3; alpha <- 0.05
> func0079b(x,y,p,alpha)
# 次数= 0
RSS= 0.815383 , RSQ= 0
```



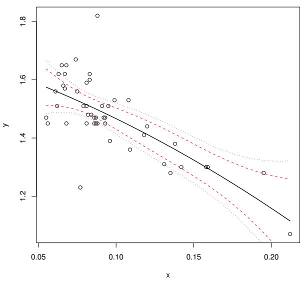
```
      Estimate StdErr t-value p-value    Lo    Up JointLo JointUp
beta0    1.473  0.019  75.848       0 1.434 1.512   1.434   1.512
# 次数= 1
RSS= 0.3812667 , RSQ= 0.5324078
      Estimate StdErr t-value p-value     Lo     Up JointLo JointUp
beta0    1.742  0.040  43.592       0  1.662  1.823   1.641   1.844
beta1   -2.825  0.395  -7.158       0 -3.620 -2.030  -3.824  -1.826
# 次数= 2
RSS= 0.3786836 , RSQ= 0.5355758
      Estimate StdErr t-value p-value      Lo     Up JointLo JointUp
beta0    1.681  0.120  14.043   0.000   1.440  1.922   1.333   2.029
beta1   -1.672  2.141  -0.781   0.439  -5.987  2.642  -7.895   4.550
beta2   -4.698  8.576  -0.548   0.587 -21.983 12.586 -29.628  20.231
# 次数= 3
RSS= 0.3747561 , RSQ= 0.5403926
      Estimate  StdErr t-value p-value       Lo      Up  JointLo JointUp
beta0    1.462   0.347   4.212   0.000    0.762   2.162    0.345   2.579
beta1    4.415   9.320   0.474   0.638  -14.381  23.211  -25.578  34.407
beta2  -56.680  77.913  -0.727   0.471 -213.807 100.447 -307.403 194.042
beta3  135.499 201.844   0.671   0.506 -271.559 542.557 -514.031 785.029
```



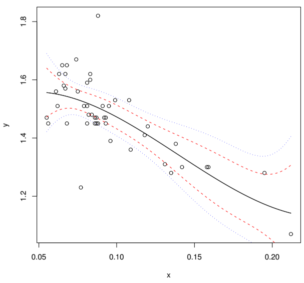
run0079-s0



run0079-s1



run0079-s2



run0079-s3

- すべて $\alpha = 0.05$，つまり信頼係数 95%である．
- 回帰係数の信頼区間 (Up,Lo) と同時信頼区間 (JointLo,JointUp)
- 予測値の信頼区間（赤）と同時信頼区間（青）

4.3　同時信頼区間の導出＊

- $v = \boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{w} \in W$ の同時信頼区間を求める
- $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{R}'^{-1}\boldsymbol{w}$ と変換すると，$v = \boldsymbol{w}'\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{a}'\boldsymbol{\gamma}$ とかける．このほうが，扱いやすい．
- シュバルツ (Schwartz) の不等式より
$$|\hat{v} - v| = |\boldsymbol{a}'(\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma})| \le \|\boldsymbol{a}\| \cdot \|\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}\|$$
で等号は $\boldsymbol{a}$ と $\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}$ が平行のときのみ．
- $\boldsymbol{\gamma}$ の同時信頼域（球体）は
$$\left\{\boldsymbol{\gamma} \quad : \quad \|\boldsymbol{\gamma} - \hat{\boldsymbol{\gamma}}\| \le S_\epsilon \sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}\right\}$$
であったから，$\boldsymbol{\gamma}$ がこの同時信頼域に入っていれば，
$$|\hat{v} - v| \le \|\boldsymbol{a}\| S_\epsilon \sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}$$
である．$\boldsymbol{\gamma}$ が同時信頼域に入る確率は $1-\alpha$ なので，
$$\Pr\left\{|\hat{v} - v| \le \|\boldsymbol{a}\| S_\epsilon \sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}\right\} \ge 1 - \alpha$$
である．
- ここで $\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{\boldsymbol{w}'\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{R}'^{-1}\boldsymbol{w}} = \sqrt{\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w}}$ に注意すれば，
$$\text{同時信頼区間}_{\boldsymbol{w}} = \left\{v \quad : \quad |\hat{v} - v| \le S_\epsilon \sqrt{\boldsymbol{w}'(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{w}} \sqrt{(p+1)\mathrm{qf}(1-\alpha)}\right\}$$

4.4　シミュレーションで確認

```
# run0080.R
# 信頼区間，同時信頼区間：シミュレーション
# run0074.R のシミュレーション結果を利用する．
# run0075.R,run0079.R の関数をつかって信頼区間を計算する．
source("run0079.R")
func0080a <- function(v) { # check if v1 in [v2,v3]
  (v[1] >= v[2]) && (v[1] <= v[3])
}
func0080b <- function(be,y00,d) {
  coef <- cbind(be,d$coef)
  be0 <- apply(coef[,c("be","Lo","Up")],1,func0080a)
  be1 <- apply(coef[,c("be","JointLo","JointUp")],1,func0080a)
  pred0 <- all(apply(cbind(y00,d$b0$pred0conf),1,func0080a))
  pred1 <- all(apply(cbind(y00,d$b1$pred0conf),1,func0080a))
  list(be0=be0,be1=be1,pred0=pred0,pred1=pred1)
}
a <- func0075a(x,p) # 準備
y00 <- a$X0 %*% be # 300 分割した点に対応する真の y
cat("# 一回目のシミュレーション結果のチェック\n")
d <- func0079(x,simy[,1],a,alpha) # 信頼区間等の計算
abline(be,col=3,lty=4) # 真の回帰直線
cat("# 信頼区間に入っていたか？\n")
yesno1 <- unlist(func0080b(be,y00,d)); print(yesno1)
dev.copy2eps(file="run0080-s1.eps")
cat("# シミュレーション結果のチェック\n")
yesno <- matrix(0,length(yesno1),b) # 結果をしまうアレイ
rownames(yesno) <- names(yesno1)
for(i in 1:b) {
  d <- func0079(x,simy[,i],a,alpha,output=F)
  yesno[,i] <- unlist(func0080b(be,y00,d))
}
print(yesno[,1:5])
cat("# シミュレーションで信頼区間に入っていた回数\n")
print(apply(yesno,1,sum))
```

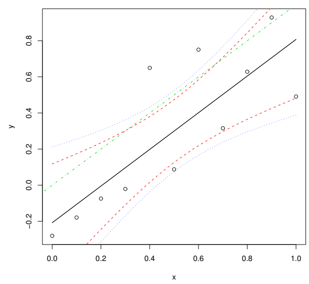
```
> n <- 11 # データサイズ
> be <- c(0,1) # 真の回帰係数 (beta0,beta1)
> x <- seq(0,1,len=n) # x を決める
> filename <- NULL
> source("run0074.R")
```



```
# start simulation:  Wed Oct  6 11:46:43 2004
# end simulation:  Wed Oct  6 11:46:45 2004
# 1回目のシミュレーション結果
$be
            [,1]
  beta0 -0.1491011
  beta1  1.3627077
$se2
[1] 0.04218202
$tval
           [,1]
  beta0 -1.287003
  beta1  6.958817
$pval
               [,1]
  beta0 2.302066e-01
  beta1 6.619553e-05

# pval0 < 0.05 の回数 =  508
# pval1 < 0.05 の回数 =  8751

> alpha <- 0.05
> source("run0080.R")
# 一回目のシミュレーション結果のチェック
RSS= 0.5859556 , RSQ= 0.6594943
      Estimate StdErr t-value p-value     Lo    Up JointLo JointUp
beta0   -0.208  0.144  -1.447   0.182 -0.534 0.117  -0.628   0.212
beta1    1.016  0.243   4.175   0.002  0.465 1.566   0.306   1.726
# 信頼区間に入っていたか？
be0.beta0 be0.beta1 be1.beta0 be1.beta1     pred0     pred1
     TRUE      TRUE      TRUE      TRUE     FALSE      TRUE
# シミュレーション結果のチェック
          [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
be0.beta0    1    1    1    1    1
be0.beta1    1    1    1    0    1
be1.beta0    1    1    1    1    1
be1.beta1    1    1    1    1    1
pred0        0    1    1    0    1
pred1        1    1    1    1    1
# シミュレーションで信頼区間に入っていた回数
be0.beta0 be0.beta1 be1.beta0 be1.beta1     pred0     pred1
     9498      9453      9835      9825      8736      9519
```



```
> sum(yesno[1,] & yesno[2,]) # joint0
[1] 9235
> sum(yesno[3,] & yesno[4,]) # joint1
[1] 9750
```



run0080-s1

- シミュレーションなので回帰係数の真値 $\beta_0 = 0, \beta_1 = 1$ が分かっている．これが信頼区間に何回入ったかを数える．シミュレーションは 10000 回の繰り返しなので，信頼係数 =95%ならば，9500 回程度が理想的．
- 個別の（同時でない）信頼区間
$$\#\{\beta_0 \in \text{信頼区間}_0\} = 9498$$
$$\#\{\beta_1 \in \text{信頼区間}_1\} = 9453$$
であるから，個別に β_0 と β_1 を見るかぎりほぼ 95%．しかし，
$$\#\{\beta_0 \in \text{信頼区間}_0, \quad \beta_1 \in \text{信頼区間}_1\} = 9235$$
となり，同時に入るのは約 92%に低下する．
- 同時信頼区間
$$\#\{\beta_0 \in \text{同時信頼区間}_0, \quad \beta_1 \in \text{同時信頼区間}_1\} = 9750$$
となり，同時に入るのは約 98%になる．
- 予測値の信頼区間各 x で個別に見れば，
$$\#\{\beta_0 + \beta_1 x \in \text{信頼区間}\,(x), \} = \text{約}\, 9500, \quad \text{すべての}\, x$$
のはずである．ところが
$$\#\{\beta_0 + \beta_1 x \in \text{信頼区間}\,(x), \quad \text{すべての}\, x\} = 8736$$
なので，予測式としてみると信頼区間に入る確率は約 87%となり，95%よりかなり低下する．

- 予測値の同時信頼区間

$$\#\{\beta_0+\beta_1 x \in 同時信頼区間\,(x),\quad すべての\,x\} = 9519$$

なので，予測式としてみると信頼区間に入る確率は約 95%となり理想的．

5 課題

5.1 課題 7-1

X2000 データセットから自由に変量を選び多項式回帰を次数 $p=1,2,3$ について行え．R に組み込み関数や講義で説明した関数など自由に用いてよい．自分で書いたプログラムはレポートに添付すること．

- それぞれの次数について，決定係数，および各回帰係数の推定値，標準誤差，t 統計量，p-値を示せ．
- 結局，どの次数 p を用いるのが最も適切かを判断せよ．
- 上で選んだ次数について x,y の散布図上に推定した回帰直線（曲線）とその 95%信頼区間（赤線），および 95%同時信頼区間（青線）を重ねて描け．

5.2 課題 7-2

`run0075.R` では次の二つの関数を定義している．

```
calcq0 <- function(n,p,alpha) qt(1-alpha/2,n-p-1) # 個別の信頼区間
calcq1 <- function(n,p,alpha) sqrt((p+1)*qf(1-alpha,p+1,n-p-1)) # 同時信頼区間
```

$n=30, \alpha=0.05$ とおき，`calcq0(n,p,alpha)` と `calcq1(n,p,alpha)` を $p=0,1,\ldots,10$ の範囲で計算して重ねてプロットせよ（横軸=p，縦軸=関数値とする）．これらの関数値を比較せよ．この違いは回帰直線 (曲面) の信頼区間，同時信頼区間ついてどのような結果をもたらすかを説明せよ．