2013–01–21

「生態学基礎論 (生物多様性論 II)」の一部:

生態学の統計モデリング (2013 年 1 月) の投影資料

全部で 2 回講義の 2 回目

一般化線形モデル (GLM) の基礎

何でも「割算」するな!

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

http://goo.gl/lqFgH

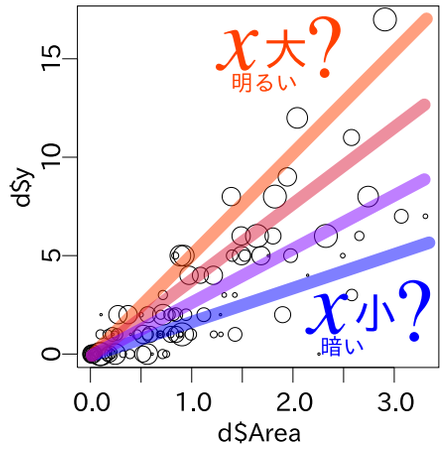
全 2 回だけの授業: 統計モデリングの概要

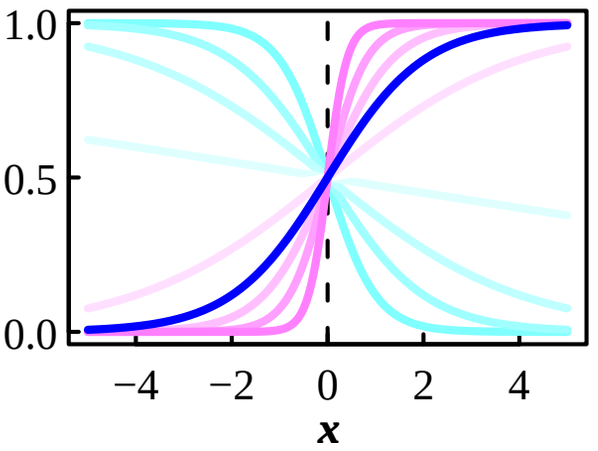
主題: 一般化線形モデル **(GLM)** を使った統計モデリングと「脱」割算解析

1. 観測データの統計モデル化　1/16 (水)
   - 統計モデルとは? **GLM** とは?
   - (**GLM** の一部である) ポアソン回帰の説明
2. 何でも「割算」するな!　1/21 (月)
   - ポアソン回帰を強化する `offset` 項わざ
   - (**GLM** の一部である) ロジスティック回帰の説明

今日のハナシ

1. 割算解析やめましょう: その前に前回の復習
2. 「脱」割算の **offset** 項わざ: ポアソン回帰を強めてみる
3. ロジスティック回帰: おススめできない解析と対比しつつ





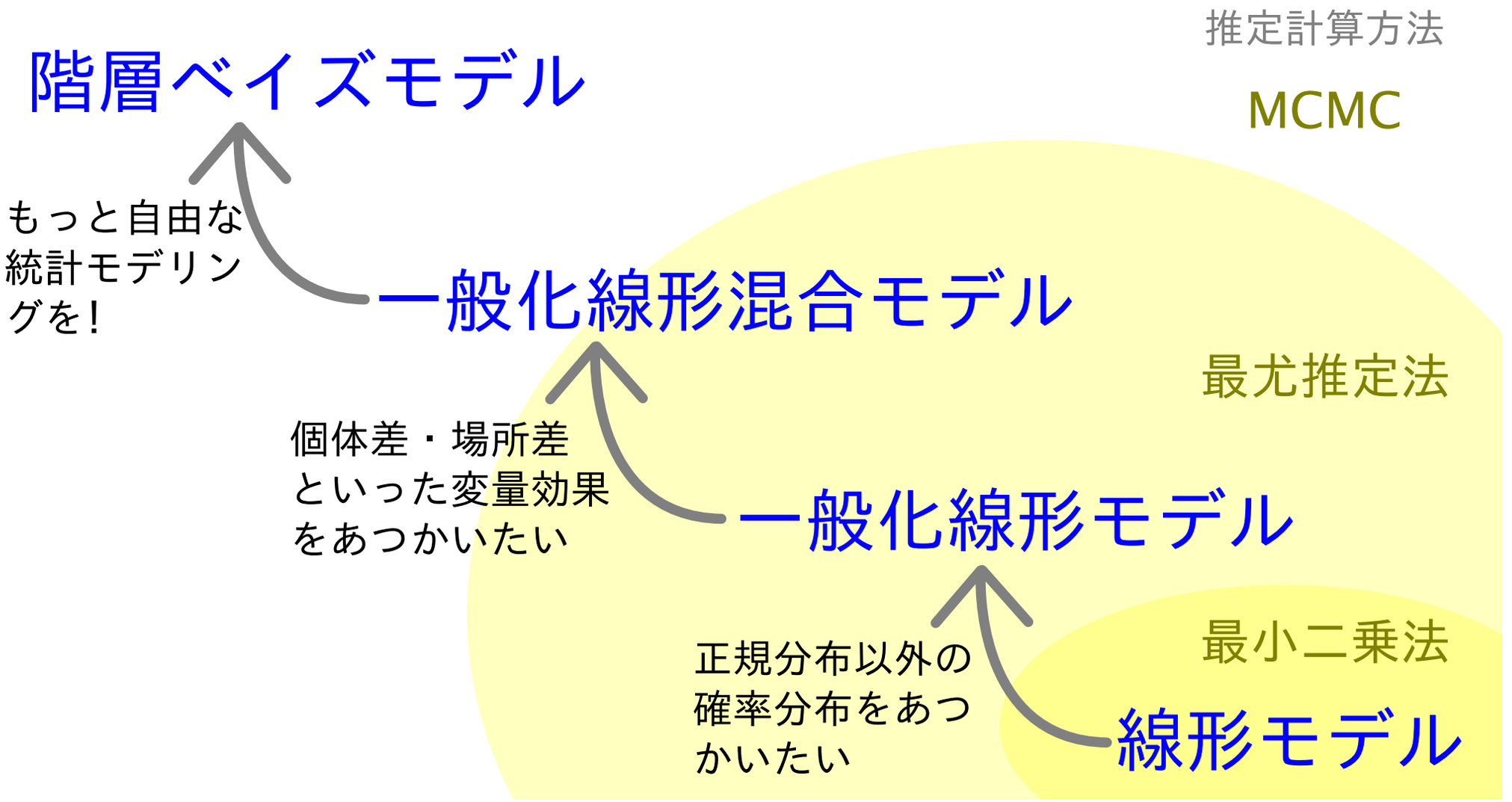
1. 割算解析やめましょう

その前に前回の復習

統計モデリング: 観測データのモデル化

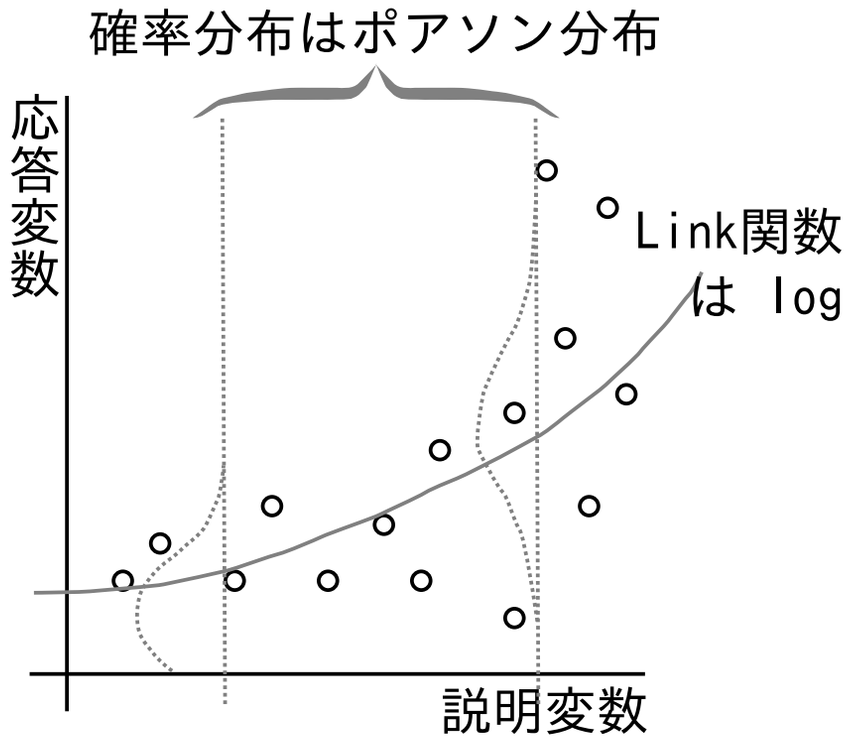
- 統計モデルは観測データのパターンをうまく説明できるようなモデル
- 基本的部品: 確率分布 (とそのパラメーター)
- データにもとづくパラメーター推定，あてはまりの良さを定量的に評価できる

線形モデルの発展



統計モデル勉強のプラン: 線形モデルを発展させる

カウントデータならポアソン回帰で!



- ポアソン回帰は一般化線形モデルの一部
- 平均値とともに増大する分散に対応
- モデルによる予測はつねに非負

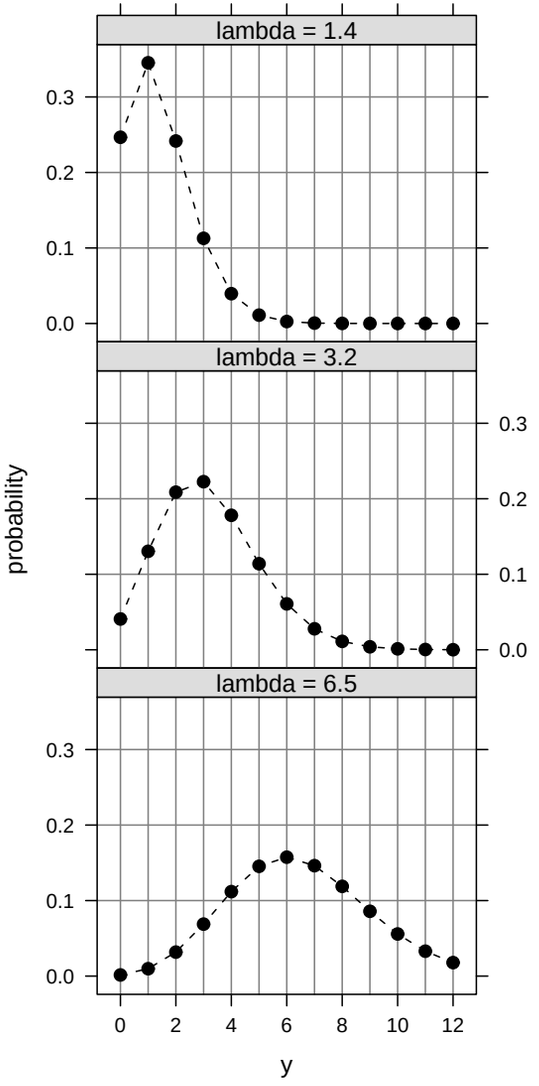
ポアソン分布 (Poisson distribution) とは何か?

- 離散分布 $y_i \in \{0, 1, 2, \cdots, \infty\}$
- 確率分布 (paramter: λ)

$$\frac{\lambda^y \exp(-\lambda)}{y!}$$

- 平均 λ, 分散 λ

- 上限を設定できないカウントデータに
- 例: 産卵数・種子数・個体数……



一般化線形モデル (generalized linear model; GLM)

確率分布・link 関数・線形予測子 を
指定して特定できる統計モデル

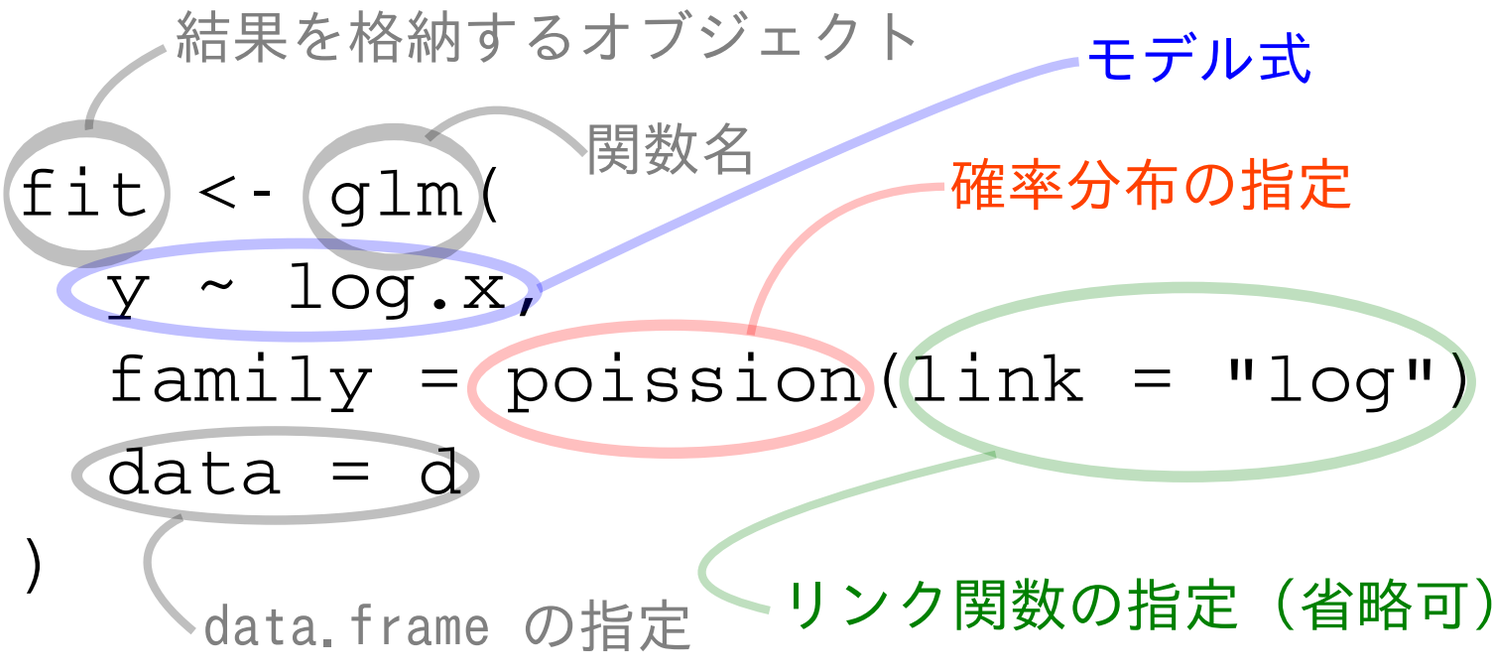
- 確率分布: 応答変数のばらつきとして 正規分布，ポアソン分布，二項分布その他を指定できる
- link 関数を $f()$ とすると， 確率分布の平均値 $=$ f(線形予測子) という関係がある
- 線形予測子: $\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots$， ただし x_i は 説明変数で β_i は x_i の係数 (coefficient)
  - 観測データ ($\{x_i\}$ と $\{y_i\}$) にもとづいて $\{\beta_i\}$ を最尤推定するのが，GLM によるパラメーター推定

R で一般化線形モデル: glm() 関数

	確率分布	乱数生成	パラメーター推定
(離散)	ベルヌーイ分布	`rbinom()`	`glm(family = binomial)`
	二項分布	`rbinom()`	`glm(family = binomial)`
	ポアソン分布	`rpois()`	`glm(family = poisson)`
	負の二項分布	`rnbinom()`	`glm.nb()`
(連続)	ガンマ分布	`rgamma()`	`glm(family = gamma)`
	正規分布	`rnorm()`	`glm(family = gaussian)`

- `glm()` で使える確率分布は上記以外もある
- `glm.nb()` は `MASS` library 中にある

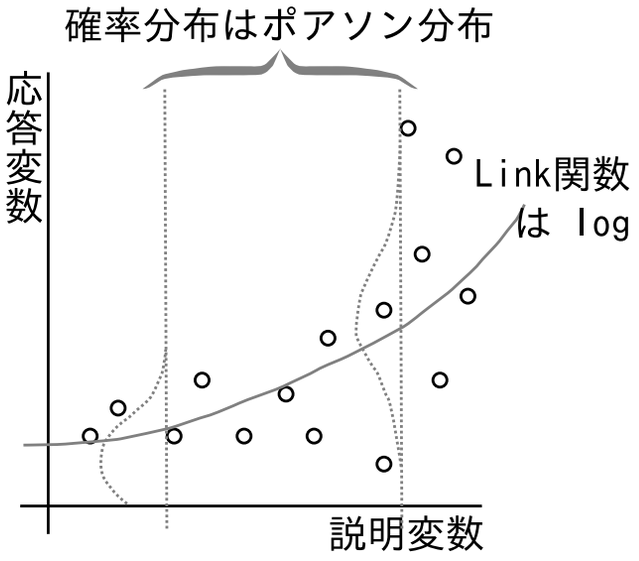
R の glm() 関数: 何を指定すればいい?



- モデル式 (線形予測子 z): どの説明変数を使うか?
- link 関数: z と応答変数 (y) 平均値 の関係は?
- family: どの確率分布を使うか?

ポアソン回帰の glm() 指定

- family: poisson, ポアソン分布
- link 関数: "log"
- モデル式 (線形予測子 z): たとえば
  y ~ x と指定したとする

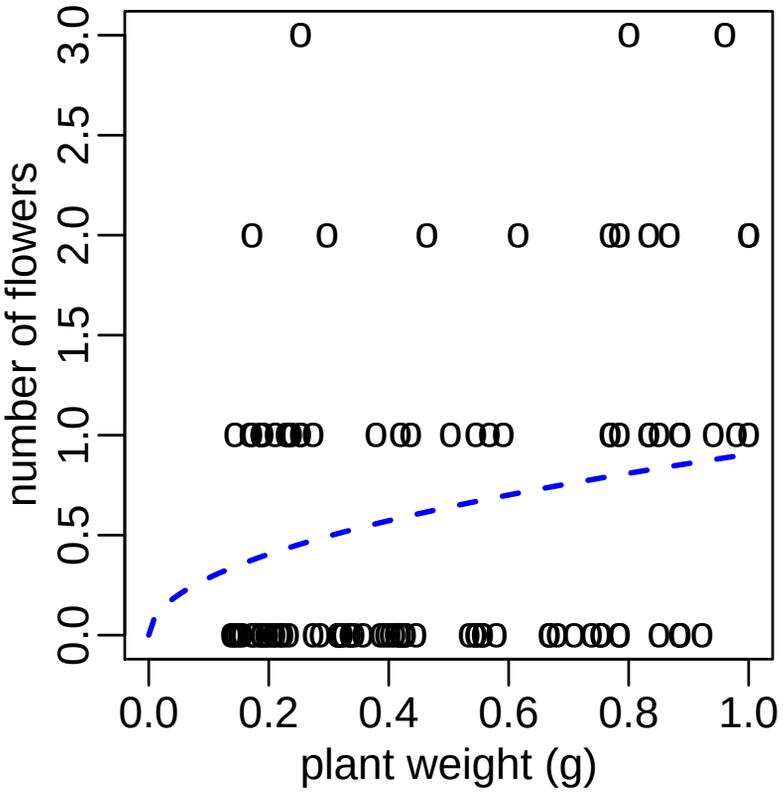


- 線形予測子 $z = a + bx$
  a, b は推定すべきパラメーター
- 応答変数の平均値を λ とすると $\log(\lambda) = z$
  つまり $\lambda = \exp(z) = \exp(a + bx)$
- 応答変数 は平均 λ のポアソン分布に従う:
  $y \sim \mathrm{Pois}(\lambda)$

GLM の推定結果を図示してみる

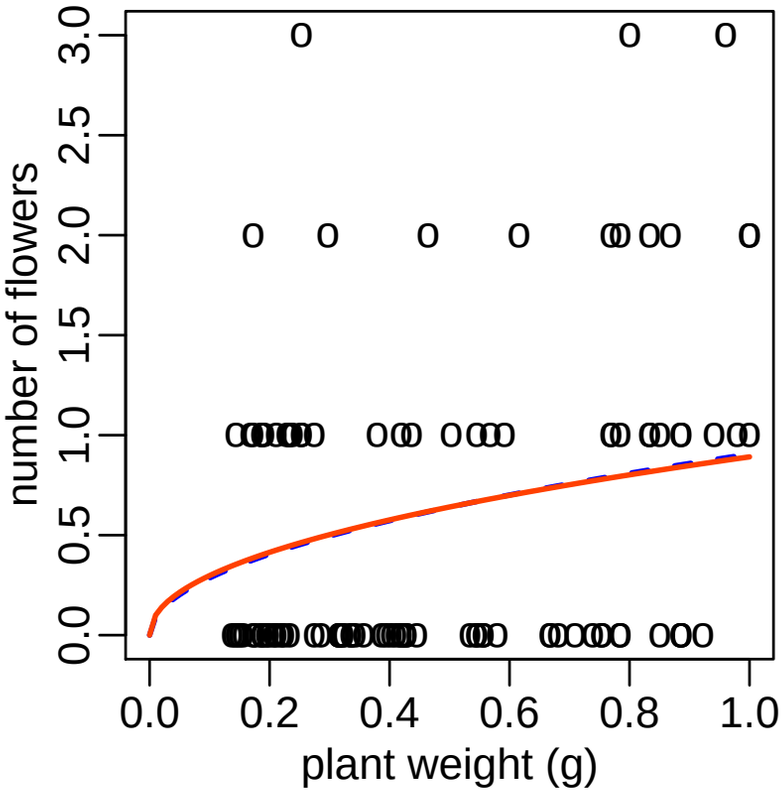
「ホント」の

重量 $\rightsquigarrow$ 平均花数



推定された

重量 $\rightsquigarrow$ 平均花数



説明したい統計モデリングのお作法

- 観測データの図をたくさん作ろう
- 観測データをどんな確率分布で表現できるか考えよう
- 「割算値」の統計モデリングはやめよう

つまり観測データの「もち味をいかした」
「ひねくりまわさない」統計モデリング

この悪しき割算な統計学

世間でよくみかけるおススめできない作法の例

- ある調査地 i で N_i 本の樹木のうち k_i 本で開花していた
- 調査地 i の開花確率を $p_i = k_i/N_i$ とした
- 別の調査地 j の開花確率を $p_j = k_j/N_j$ とした
- 調査地 i と j の間で開花確率が異なるかどうか，p_* が正規分布にしたがうと仮定して「ゆーい差を検定」した
- 確率 p_i は正規分布ではない，と指摘されたのでノンパラメトリック検定で「ゆーい差を検定」した

割算値ひねくるデータ解析はなぜよくないのか?

- 観測値 / 観測値 がどんな確率分布にしたがうのか見とおしが悪く，さらに説明要因との対応づけが難しくなる
- 情報が失われる: 「10 打数 3 安打」と「200 打数 60 安打」，「どちらも 3 割バッター」と言ってよいのか?
- 割算値を使わないほうが見とおしのよい，合理的なデータ解析ができる (今回の授業の主題)
- したがって割算値を使ったデータ解析は不利な点ばかり，そんなことをする必要性はどこにもない

避けられるわりざん，避けにくいわりざん

- 避けられる割算値
  - 密度などの指数

    例: 人口密度，specific leaf area (SLA) など

    対策: **offset** 項わざ
  - 確率

    例: N 個のうち k 個にある事象が発生する確率

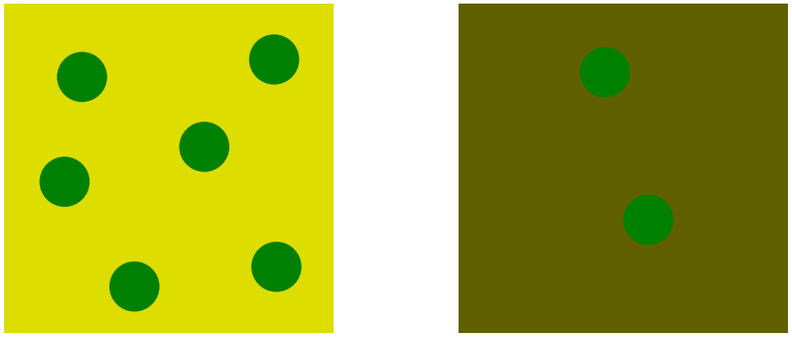
    対策: ロジスティック回帰など二項分布モデルで
- 避けにくい割算値
  - 測定機器が内部で割算した値を出力する場合
  - 割算値で作図せざるをえない場合があるかも

2. 「脱」割算の offset 項わざ

ポアソン回帰を強めてみる

例題: 調査区画内の個体密度は明るさで変わるか?

- 何か架空の植物個体の密度が「明るさ」 x に応じて どう変わるかを知りたい
- 明るさは $\{0.1, 0.2, \cdots, 1.0\}$ の 10 段階で観測した

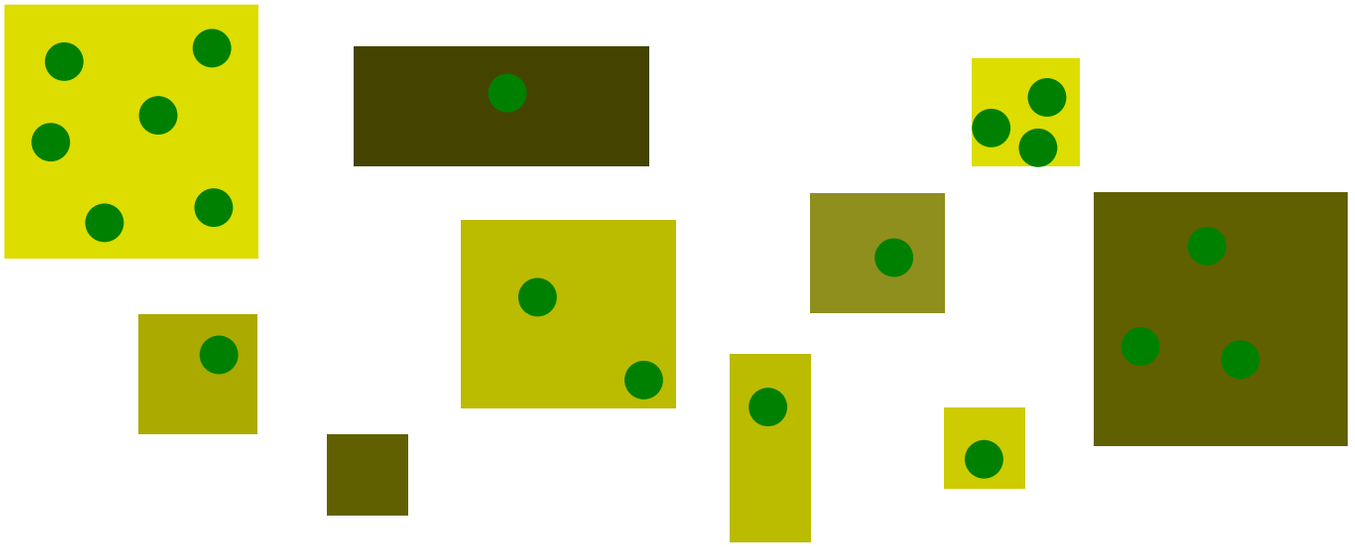


x大
明るい

x小
暗い

これだけなら単純に `glm(..., family = poisson)` すればよいのだが ……

「場所によって調査区の面積を変えました」?!!



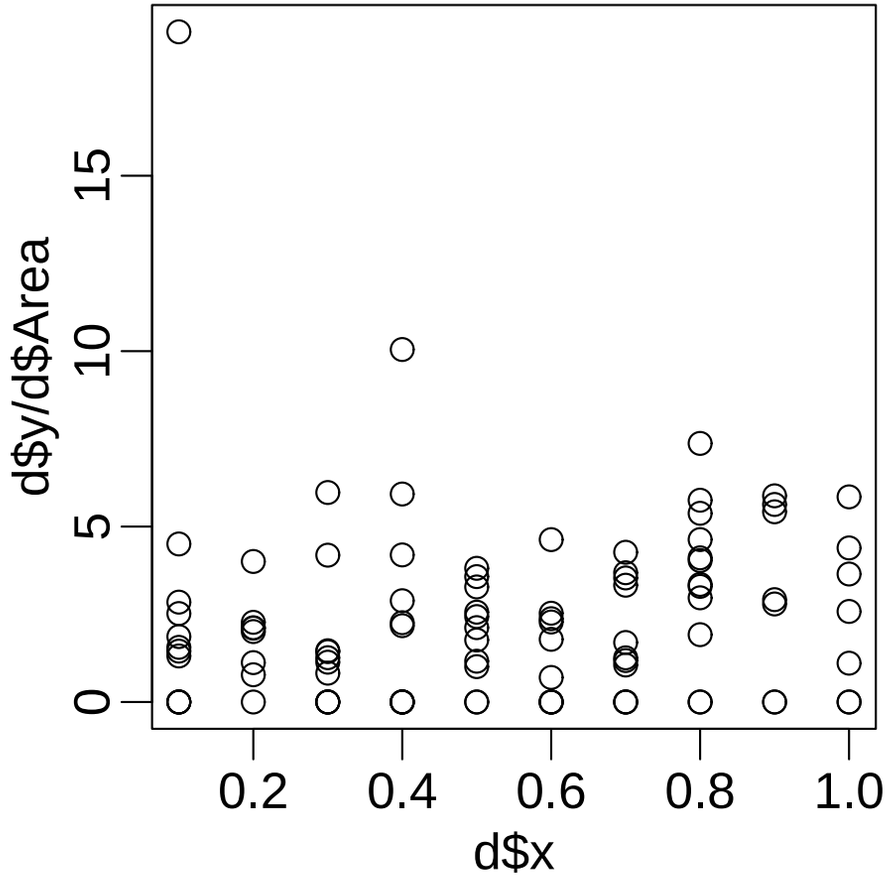
- 明るさ x と面積 A を同時に考慮する必要あり
- ただし「密度 = 個体数 / 面積」といった割算値解析はやらない!
- `glm()` の `offset` 項わざでうまく対処できる
- ともあれその前に観測データを図にしてみる

R の data.frame: 面積 Area, 明るさ x, 個体数 y

```
> load("d2.RData")
> head(d, 8) # 先頭 8 行の表示
       Area   x y
1  0.017249 0.5 0
2  1.217732 0.3 1
3  0.208422 0.4 0
4  2.256265 0.1 0
5  0.794061 0.7 1
6  0.396763 0.1 1
7  1.428059 0.6 1
8  0.791420 0.3 1
```

明るさ vs 割算値図の図

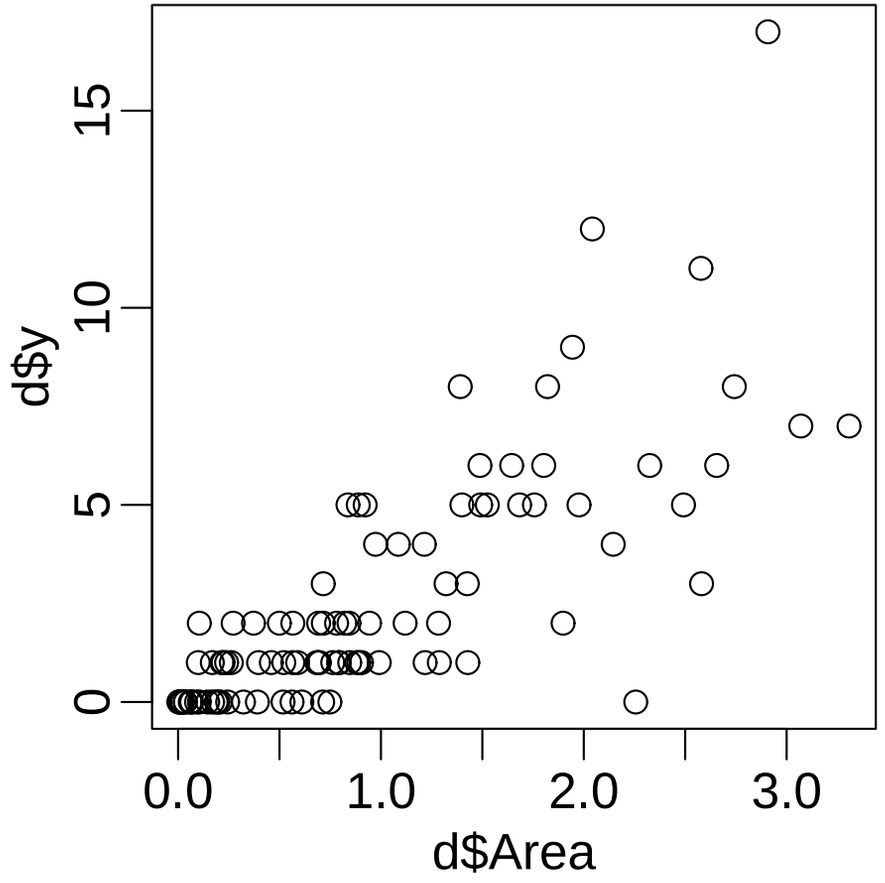
```
plot(d$x, d$y / d$Area)
```



- いまいちよくわからない……

面積 A vs 個体数 y の図

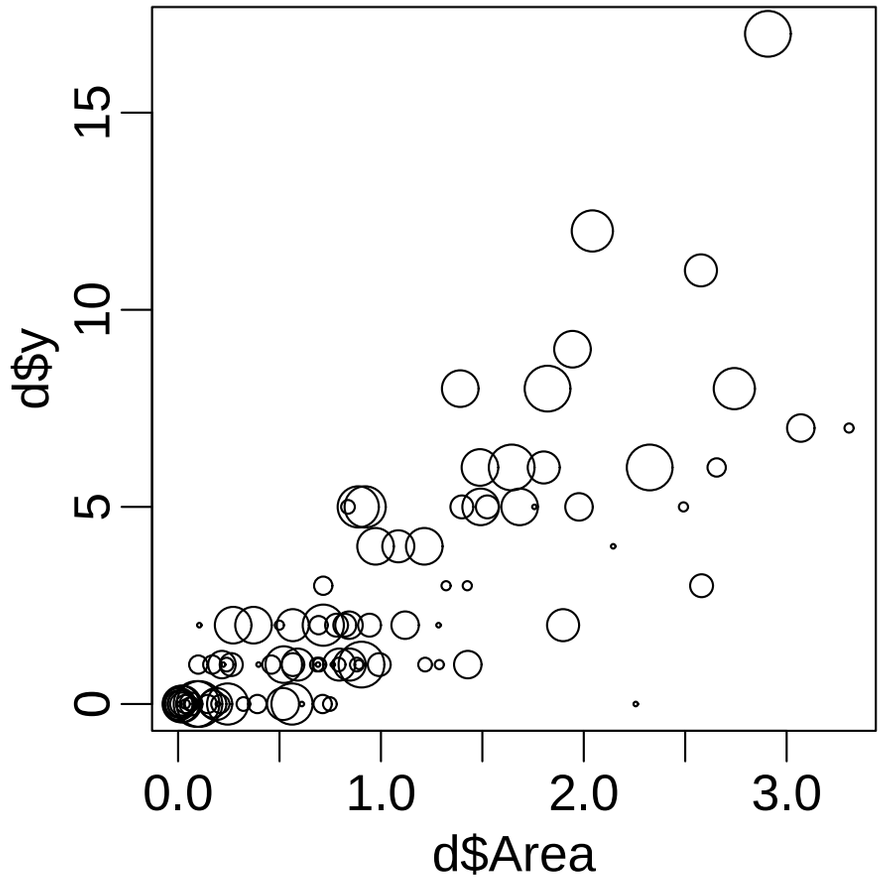
```
plot(d$Area, d$y)
```



- 面積 A とともに区画内の個体数 y が増大するようだ

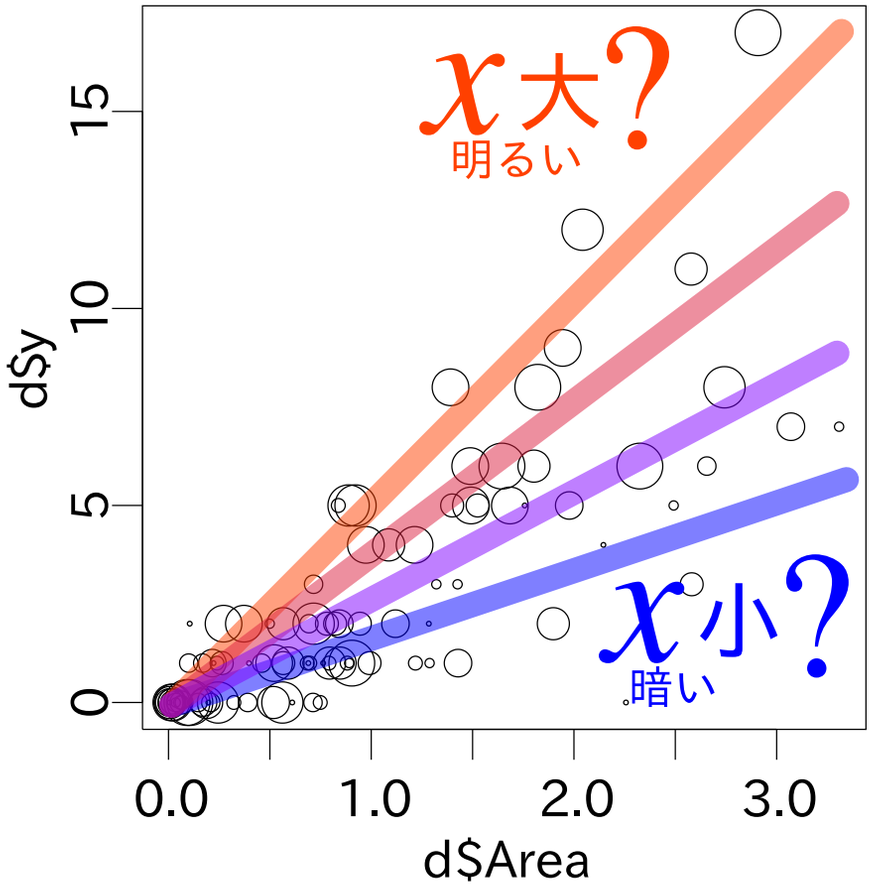
明るさ x の情報 (マルの大きさ) も図に追加

```
plot(d$Area, d$y, cex = d$x * 2)
```



- 同じ面積でも明るいほど個体数が多い?

密度が明るさ x に依存する統計モデル



- 区画内の個体数 y の平均は面積 × 密度
- 密度は明るさ x で変化する

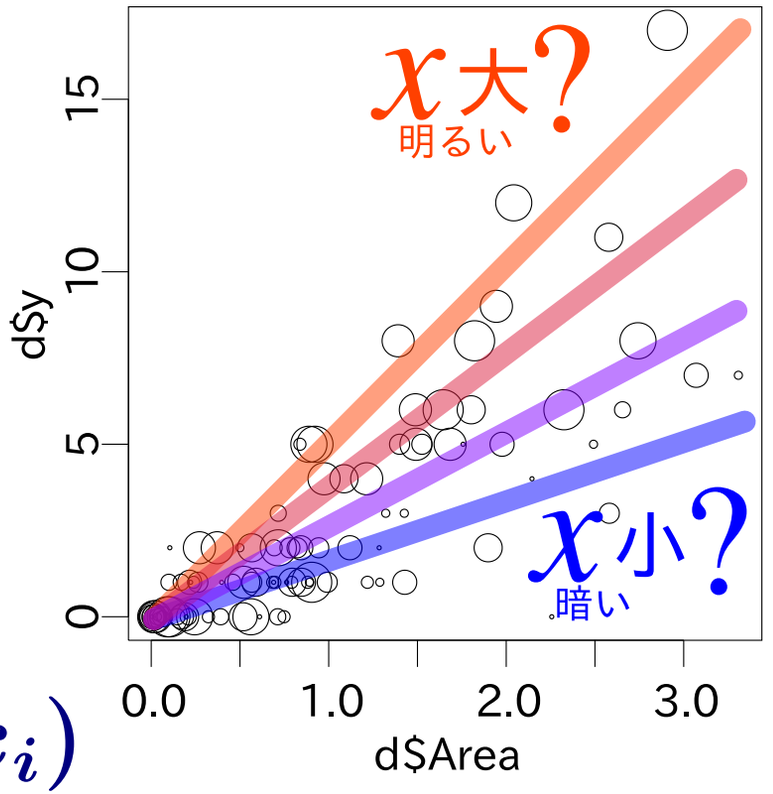
「平均個体数 = 面積 × 密度」モデル

1. ある区画 i の応答変数 y_i は平均 λ_i のポアソン分布にしたがうと仮定:

$$y_i \sim \mathrm{Pois}(\lambda_i)$$

2. 平均値 λ_i は面積 A_i に比例し，密度は明るさ x_i に依存する

$$\lambda_i = A_i \exp(a + b x_i)$$



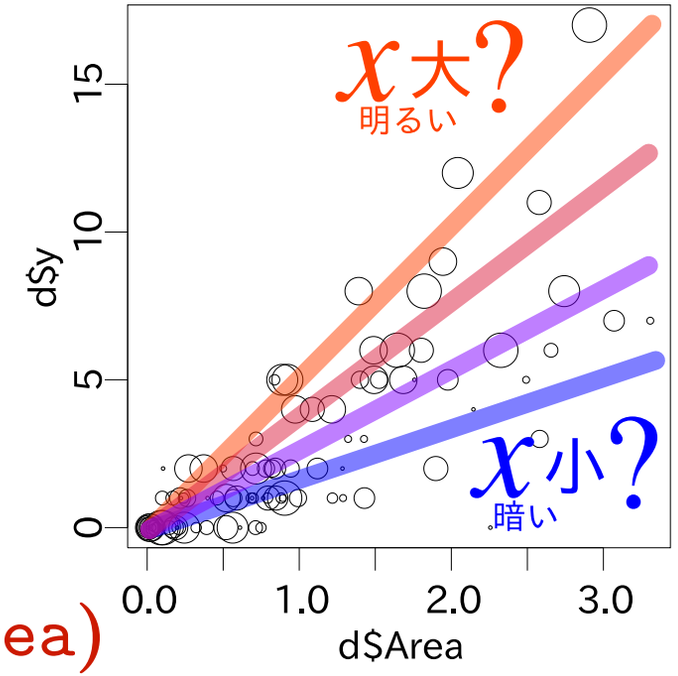
$$\lambda_i = \exp(a + b x_i + \log(A_i))$$

$$\log(\lambda_i) = a + b x_i + \log(A_i)$$

$\log(A_i)$ を offset 項とよぶ

この問題は GLM であつかえる!

- family: poisson, ポアソン分布
- link 関数: "log"
- モデル式 : y ~ x
- offset 項の指定 : log(Area)

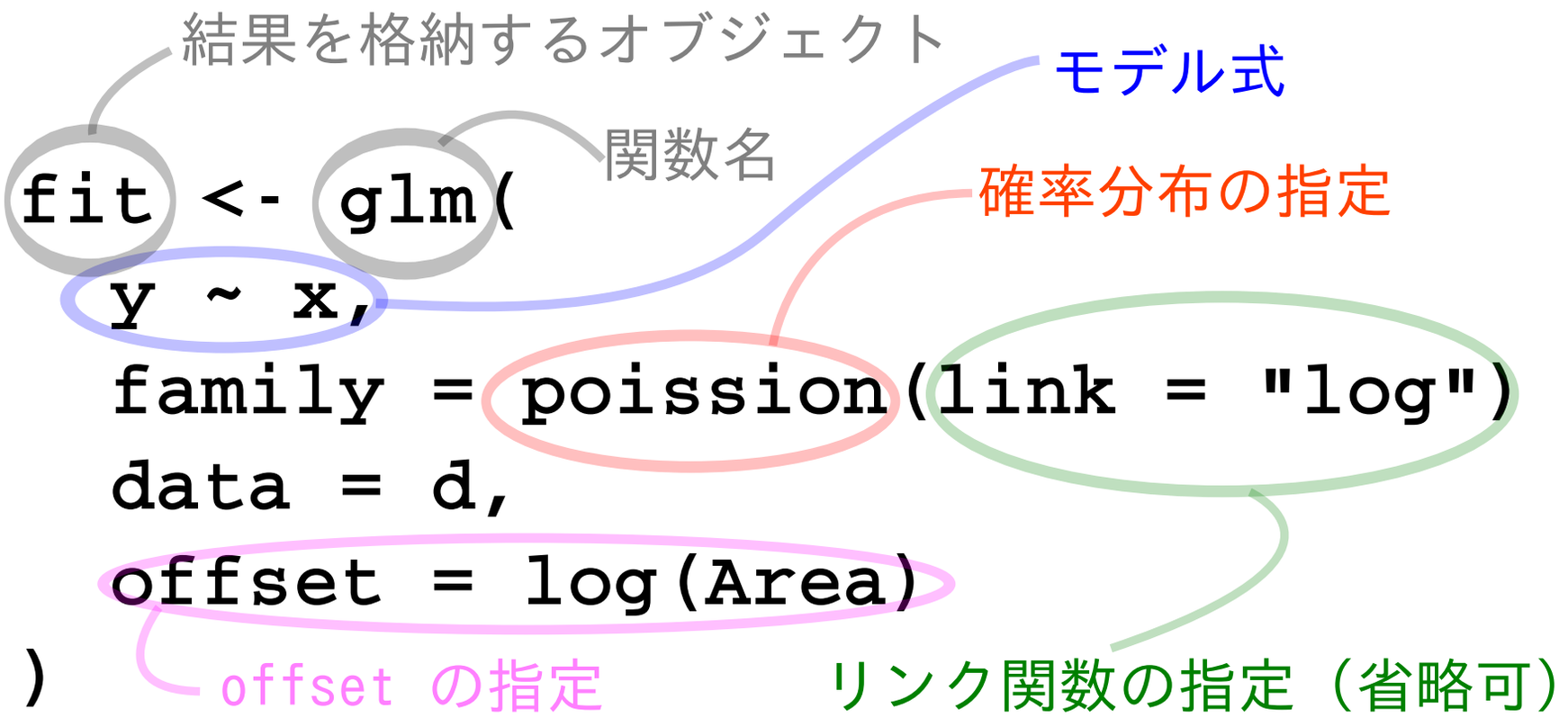


- 線形予測子 $z = a + b\,\mathrm{x} +$ log(Area)

  a, b は推定すべきパラメーター
- 応答変数の平均値を λ とすると $\log(\lambda) = z$

  つまり $\lambda = \exp(z) = \exp(a + b\,\mathrm{x} +$ log(Area)$)$
- 応答変数 は平均 λ のポアソン分布に従う:

glm() 関数の指定

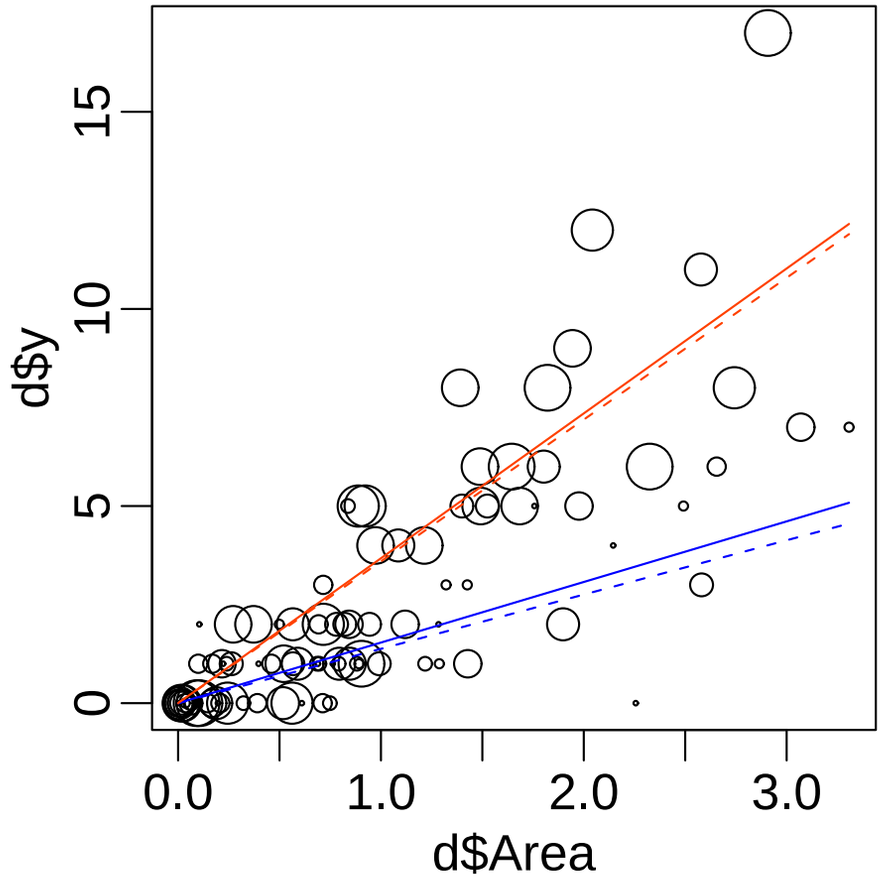

結果を格納するオブジェクト
関数名
モデル式
確率分布の指定
fit <- glm(
y ~ x,
family = poission(link = "log")
data = d,
offset = log(Area)
)
offset の指定
リンク関数の指定（省略可）

R の glm() 関数による推定結果

```
> fit <- glm(y ~ x, family = poisson(link = "log"), data = d,
  offset = log(Area))
> print(summary(fit))

Call:
glm(formula = y ~ x, family = poisson(link = "log"), data = d,
    offset = log(Area))

(... 略...)

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)    0.321      0.160    2.01    0.044
x              1.090      0.227    4.80  1.6e-06
```

Coefficients は説明変数の係数という意味

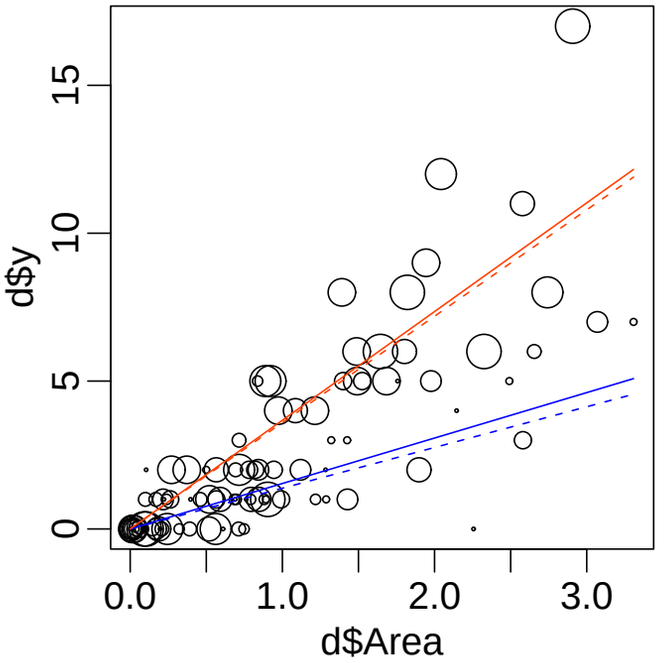
推定結果にもとづく予測を図にしてみる

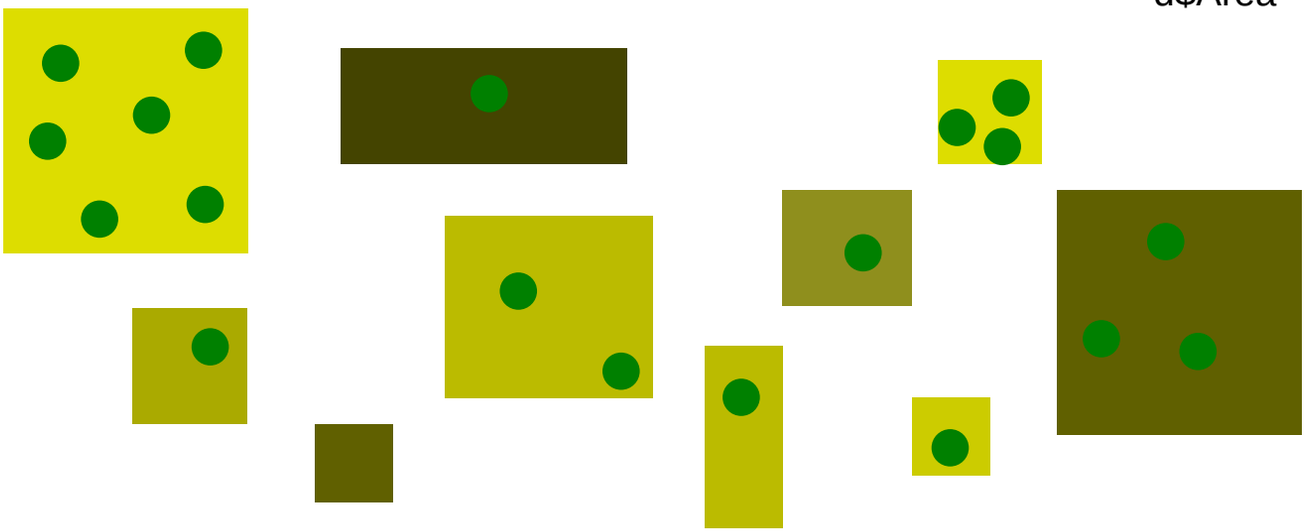


- 赤は明るさ $x = 0.9$, 青は $x = 0.1$
- 実線は `glm()` の推定結果，破線はデータ生成時に指定した関係

まとめ: glm() の offset 項わざで「脱」割算

- 平均値が面積などに比例する場合は, この面積などを **offset 項** として指定する
- 平均 = 面積 × 密度, というモデルの 密度 を **exp**(線形予測子) として定式化する





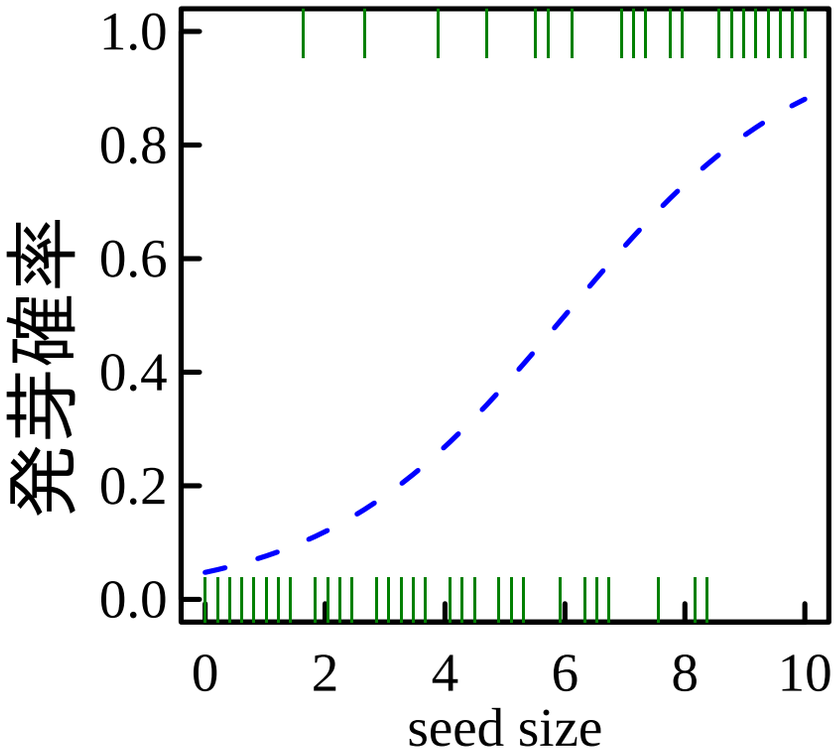
3. ロジスティック回帰

おススめできない解析と対比しつつ

架空植物の発芽実験データ

種子サイズと発芽確率の関係を調べる実験やってみた

| は観測データ (1 = 発芽した)

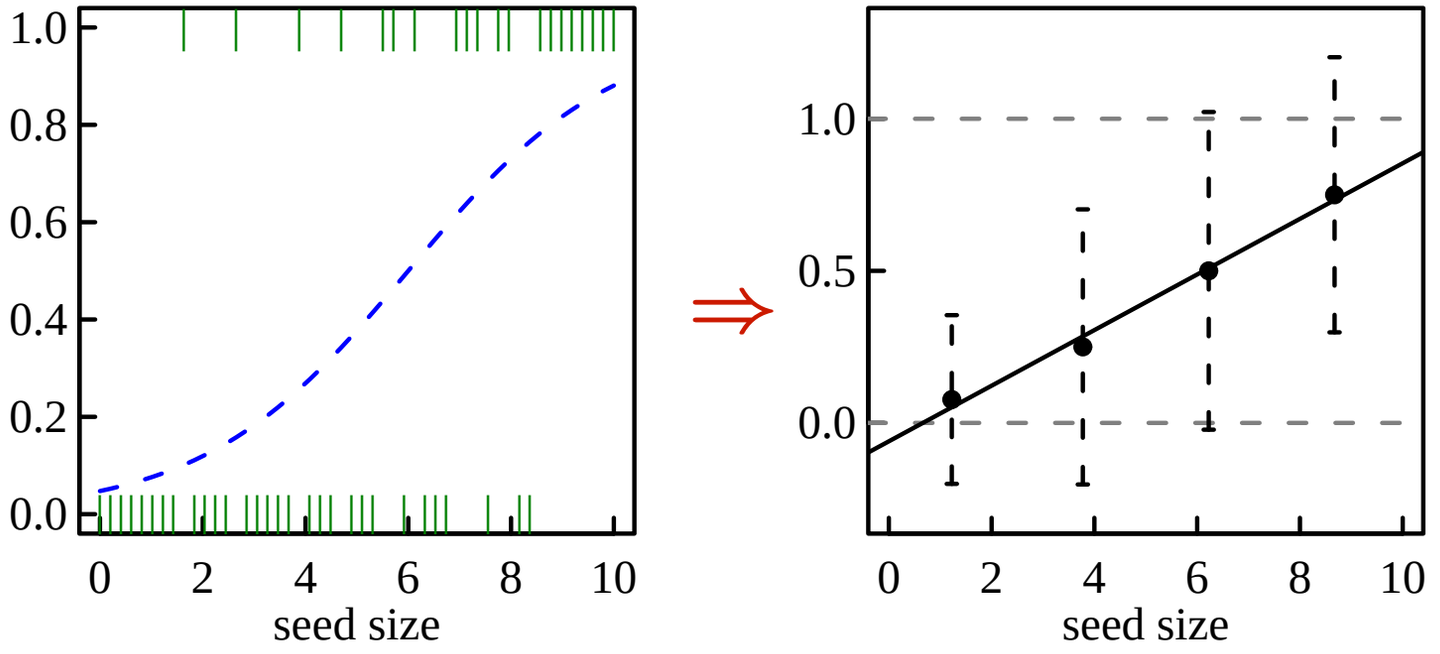


[「ホント」の発芽パターン]

- 種子が大きいほど発芽確率が高い
- 発芽確率は青破線 で示されているように上昇する

データから 青破線 (つまり真のモデル・母集団) を推定したい

(よく見かける) おススめできない解析の一例



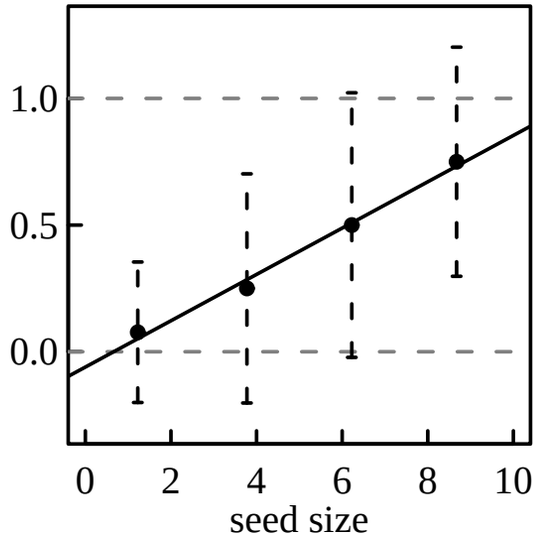
1. てきとーに種子サイズの区画を取る (上の例だと 4 区画)
2. 区画ごとに縦横の平均値など計算; $\{0, 1\}$ データを割算値に
3. 何も考えずに統計ソフトウェアにほうりこむ

(直線回帰する or 「分散分析」する or 「検定」& 多重比較する)

なぜよろしくないか? データの特徴を無視

区画はてきとー

区画のとりかたで結果は変わる



割算すると情報が失われる

1 / 2 と 100 / 200 は違う!

等分散でもなければ正規分布でもない

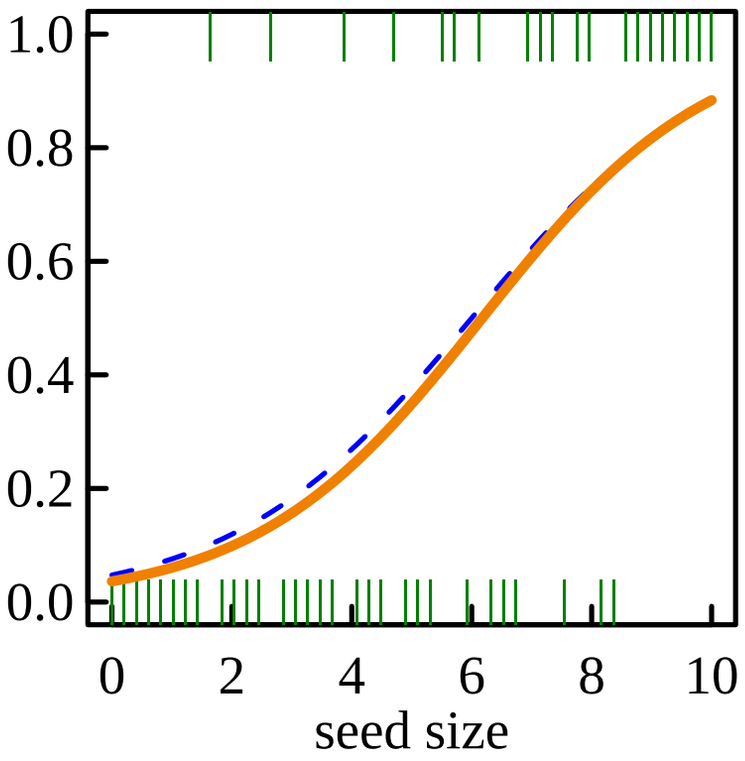
ということで直線回帰も分散分析も使えん — さらに，いわば母分散が異なる状況なので，ノンパラメトリック検定のたぐいもだめ

何を推定してるのだろうか?

発芽する確率がマイナスになったり，1 をこえたりするモデルってのは ……? (変数変換すればいいって? そのワザは呪われてる)

R の glm() で推定: ロジスティック回帰の例

発芽する・しないが二項分布にしたがうと仮定している



- 各種子について，そのサイズ (x) と“発芽した or しなかった”の対応をみる
- 発芽確率 q を以下のように仮定

$$q = \frac{1}{1 + \exp(-(a + bx))}$$

(logistic 式)

- パラメーター a と b の推定値を最尤推定法で計算する
- ここでは R の glm() 関数を使った (上の図の赤線が推定結果)

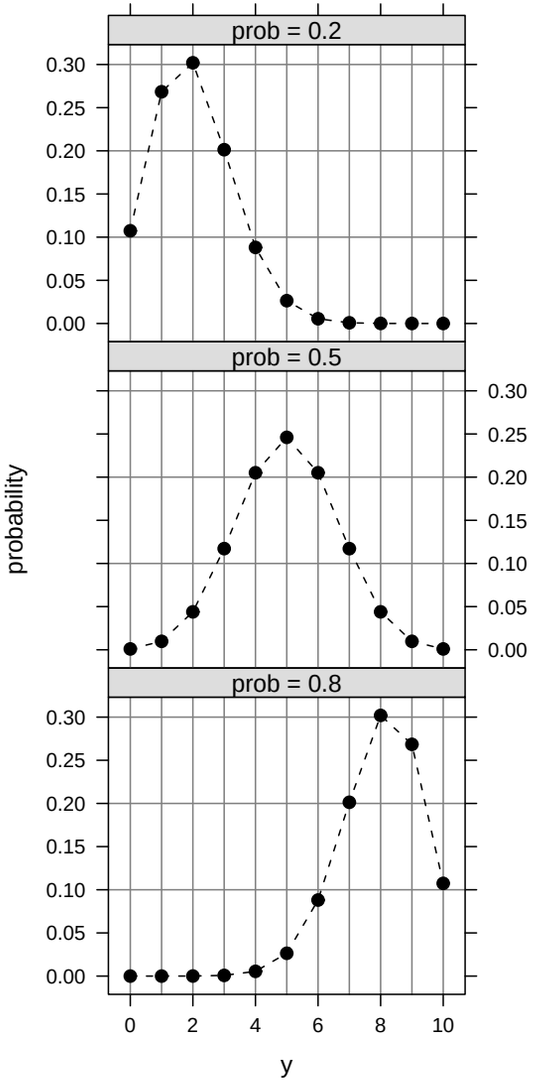
二項分布 (binomial distribution) とは何か?

- 離散分布 $y_i \in \{0, 1, 2, \cdots, N\}$
- 確率分布 (paramter: q, N)

$$\binom{N}{y} q^y (1-q)^{N-y}$$

- 平均 Nq, 分散 $Nq(1-q)$

- 上限のあるカウントデータに
- 例: N 個体中 y 個体に反応があった，死亡した，など



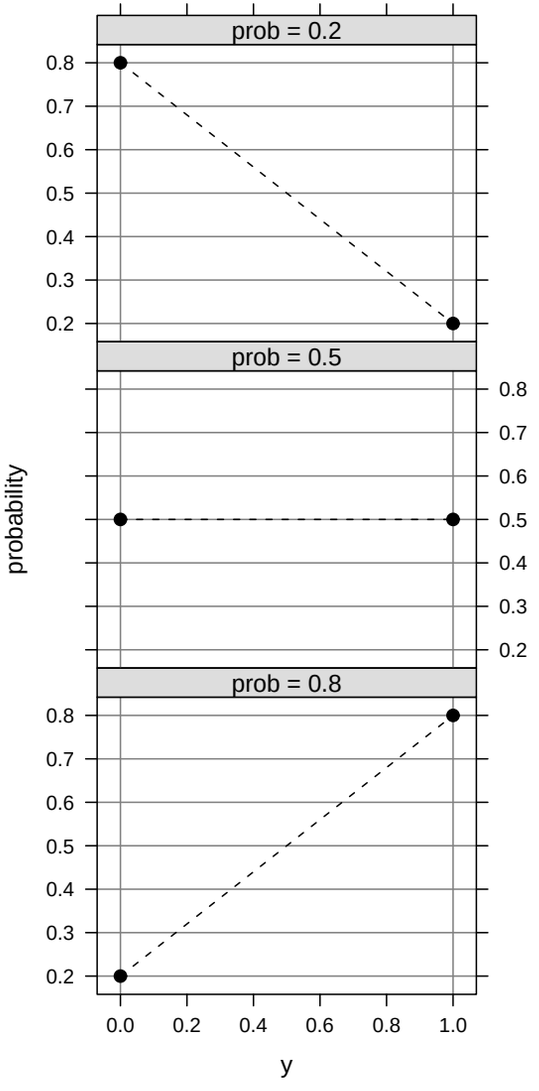
ベルヌーイ分布 (Bernoulli distribution)

- 離散分布 $y_i \in \{0, 1\}$
- 確率分布 (paramter: p)

$$q^y(1-q)^{1-y}$$

- 平均 q, 分散 $q(1-q)$

- 二項分布で $N = 1$ の場合 に該当する確率分布
- 例: ある個体で反応があった, 死亡した, など

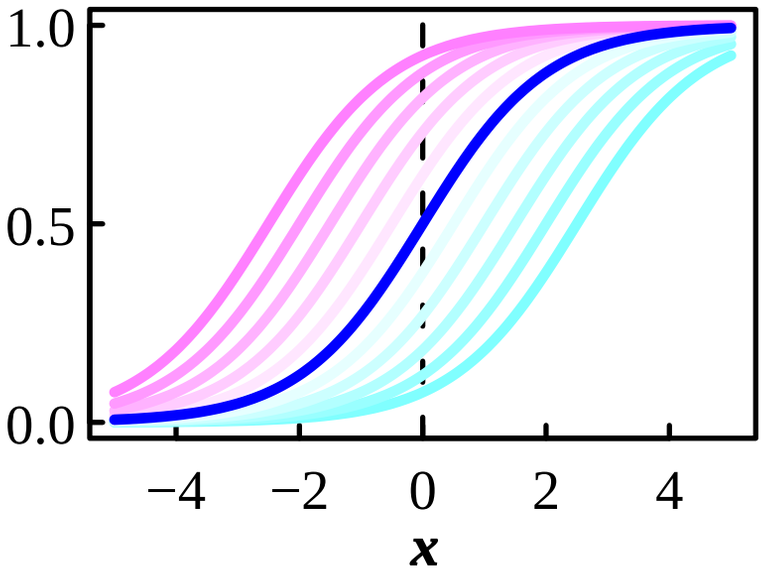


そもそも「ロジスティック関数」って何?

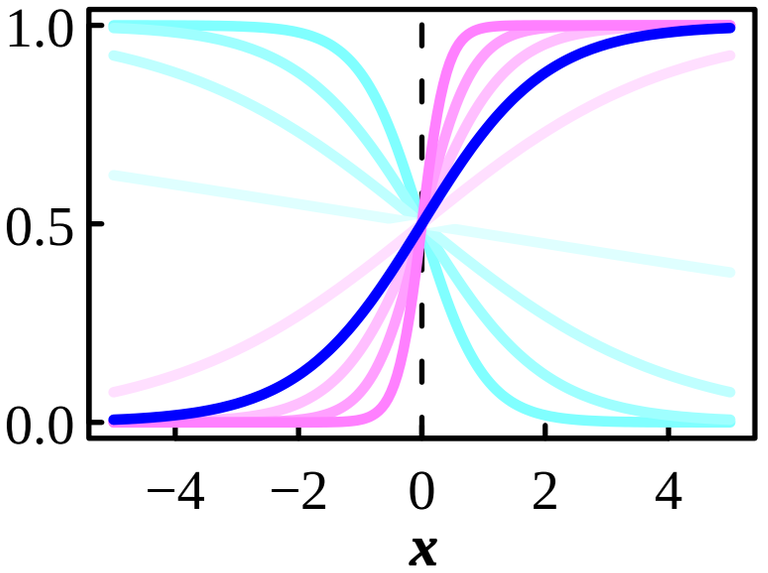
$$q = \frac{1}{1 + \exp(-(a + bx))}$$

($\exp(Z) = \mathrm{e}^{Z}$ のこと)

a だけ変化させる



b だけ変化させる



つまりパラメーター $\{a, b\}$ や説明変数 x がどんな値をとっても確率 q は $0 \leq q \leq 1$ となる便利な関数

ちょっと整理: logistic と logit

- logistic 関数

$$q = \frac{1}{1 + \exp(-(a + bx))} = \text{logistic}(a + bx)$$

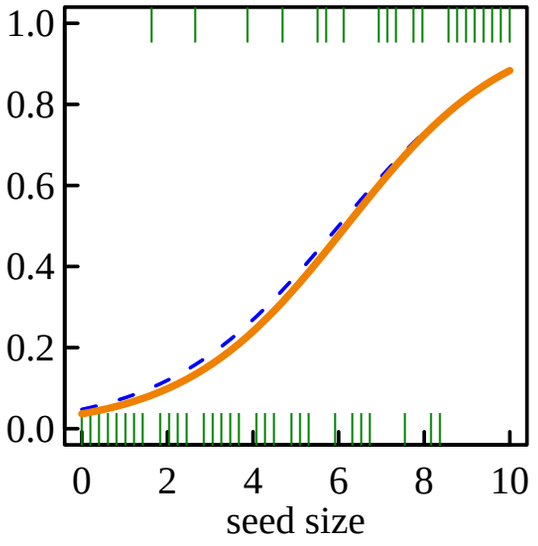
- logit 変換

$$\text{logit}(q) = \log \frac{q}{1 - q} = a + bx$$

logit は logistic の逆関数，logistic は logit の逆関数

ロジスティック回帰の glm() 指定 (1)

- family: binomial, 二項分布
  - $y \in \{0, 1, 2, \cdots, N\}$ というようにある範囲のカウントデータ である場合は二項分布で説明してみる
- link 関数: "logit"
  - これは family = binomial 時の「おススめ」 link 関数
- モデル式 (線形予測子 z): たとえば y ~ x と指定したとする

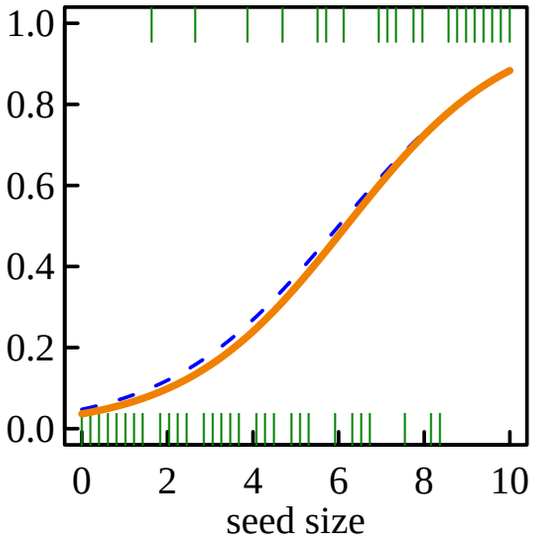



```
family = binomial(link = "logit")
```

指定とは何をやっているのだろうか?

ロジスティック回帰の glm() 指定 (2)

- family: binomial, 二項分布
- link 関数: "logit"
- モデル式 (線形予測子 z): たとえば y ~ x と指定したとする



  - 線形予測子 $z = a + bx$

    a, b は推定すべきパラメーター

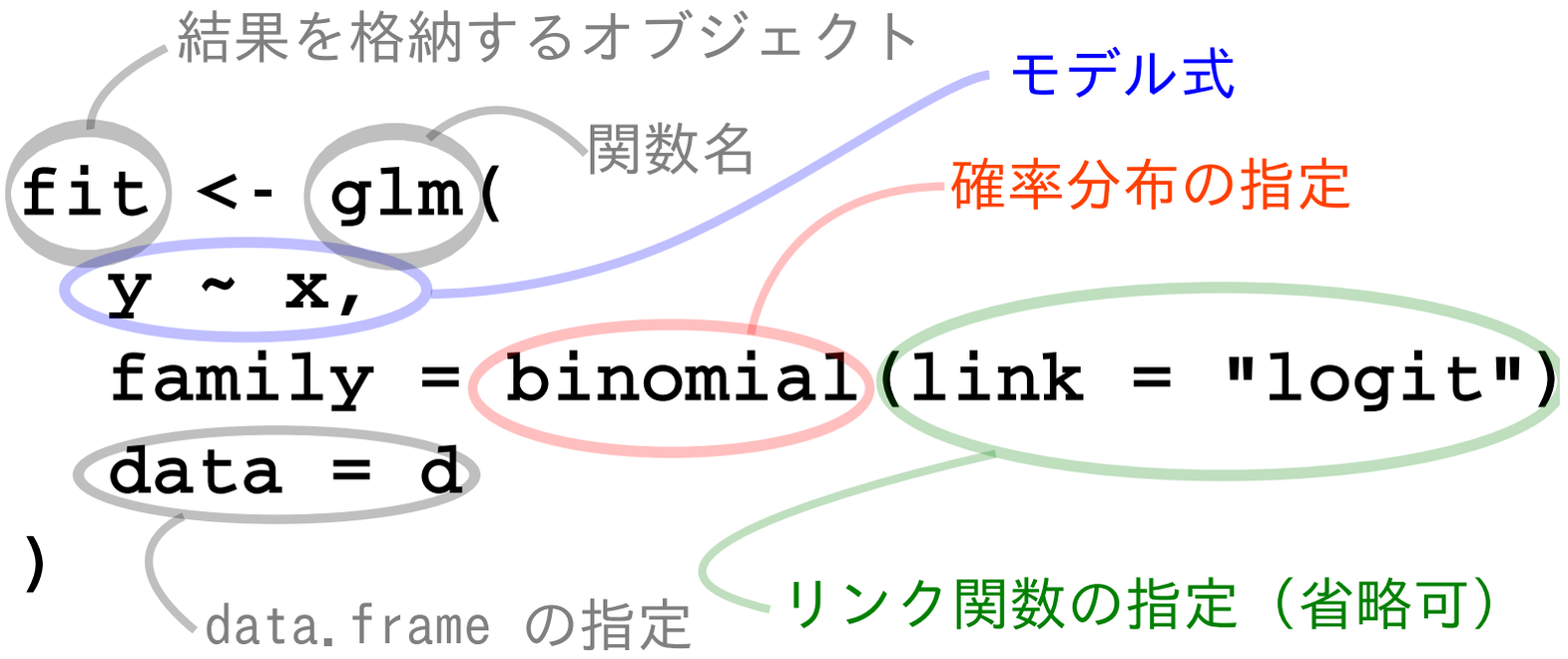
  - 事象の生起確率 を q とすると $\mathrm{logit}(q) = z$

    つまり $q = \dfrac{1}{\exp(-z)} = \dfrac{1}{1 + \exp(-(a + bx))}$

  - 応答変数 は確率 q でサイズ N の二項分布に従う:

    $y \sim \mathrm{Binom}(q, N)$

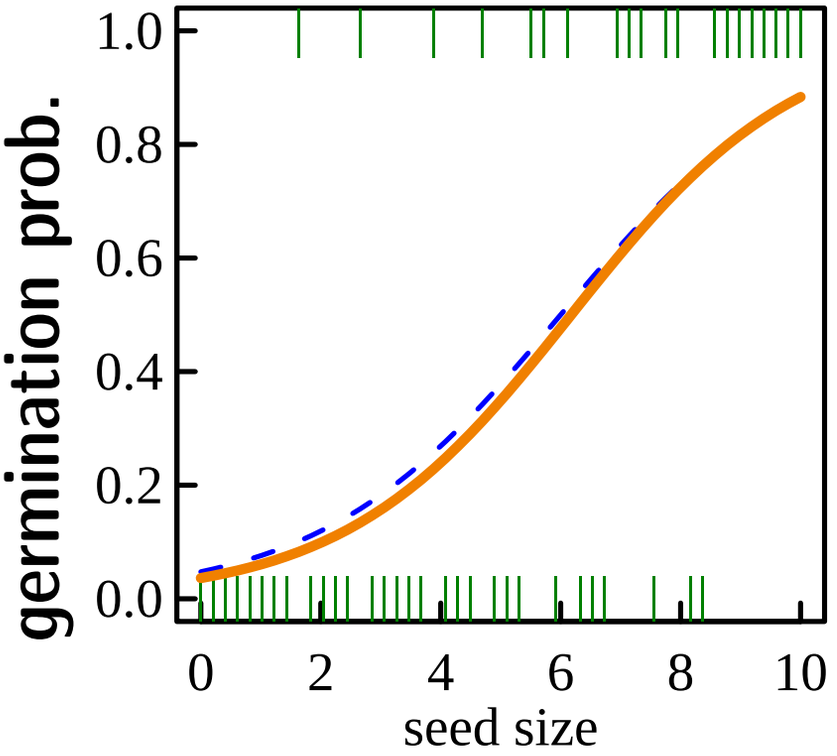
R の glm() 関数: 何を指定すればいい?



- モデル式 (線形予測子 z): 種子重 x が説明変数
- link 関数: logit リンク関数
- family: binomial, 二項分布

良い推定 (データ $\rightarrow$ モデル) をめざして Ending

おススめできないデータ解析を回避するための注意点

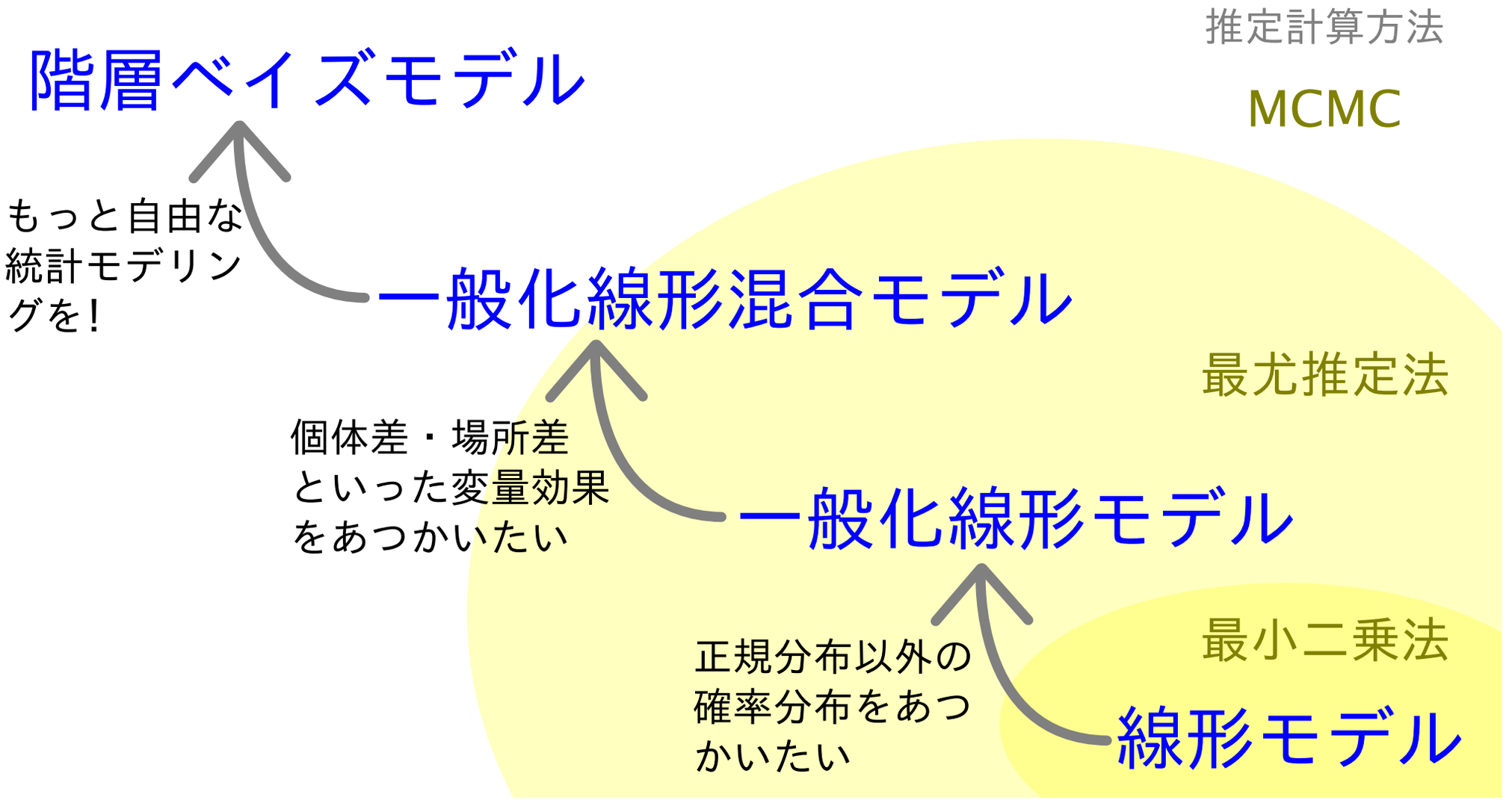


- むやみに 区画わけしない！
- 何でも 割り算するな！
- たくさん 図を描く
- 「観測データを説明する 確率分布は何か?」 を考える

コツ: 不自然にデータをこねくりまわさない

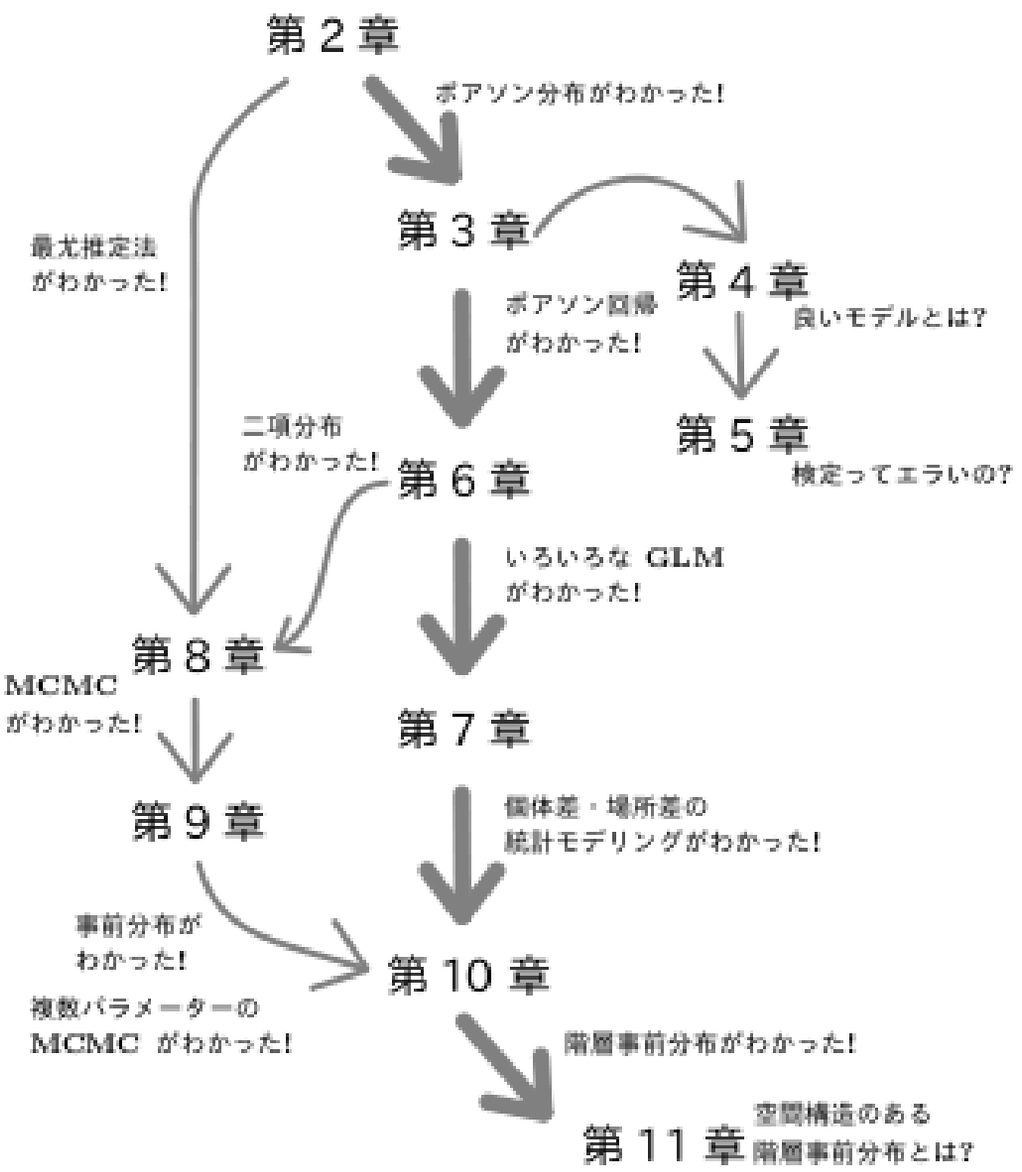
データの性質・構造にあったモデリングを!

線形モデルの発展



統計モデル勉強のプラン: 線形モデルを発展させる

(第 2 章以降の説明の流れ)



統計モデリング入門

http://goo.gl/Ufq2

統計モデル勉強のプラン: 線形モデルを発展させる