統計モデリング入門 2013 (2)

probability distribution and maximum likelihood estimation

確率分布と最尤推定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

北大環境科学院の講義 http://goo.gl/82dgC

2013–07–03

ファイル更新時刻: 2013–07–03 12:56

agenda

今日のハナシ I

a simplified example

1. **例題: 種子数の統計モデリング**
   まあ，かなり単純な例から始めましょう
2. **データと確率分布の対応**
   probability distribution, the core of statistical model
   確率分布は統計モデルの重要な部品

the Poisson distribution

3. **ポアソン分布って何?**
   平均を変えると分布のカタチが変わる

maximum likelihood estimation of parameter λ

4. **ポアソン分布のパラメーターの 最尤推定(さいゆうすいてい)**
   もっともらしい推定?

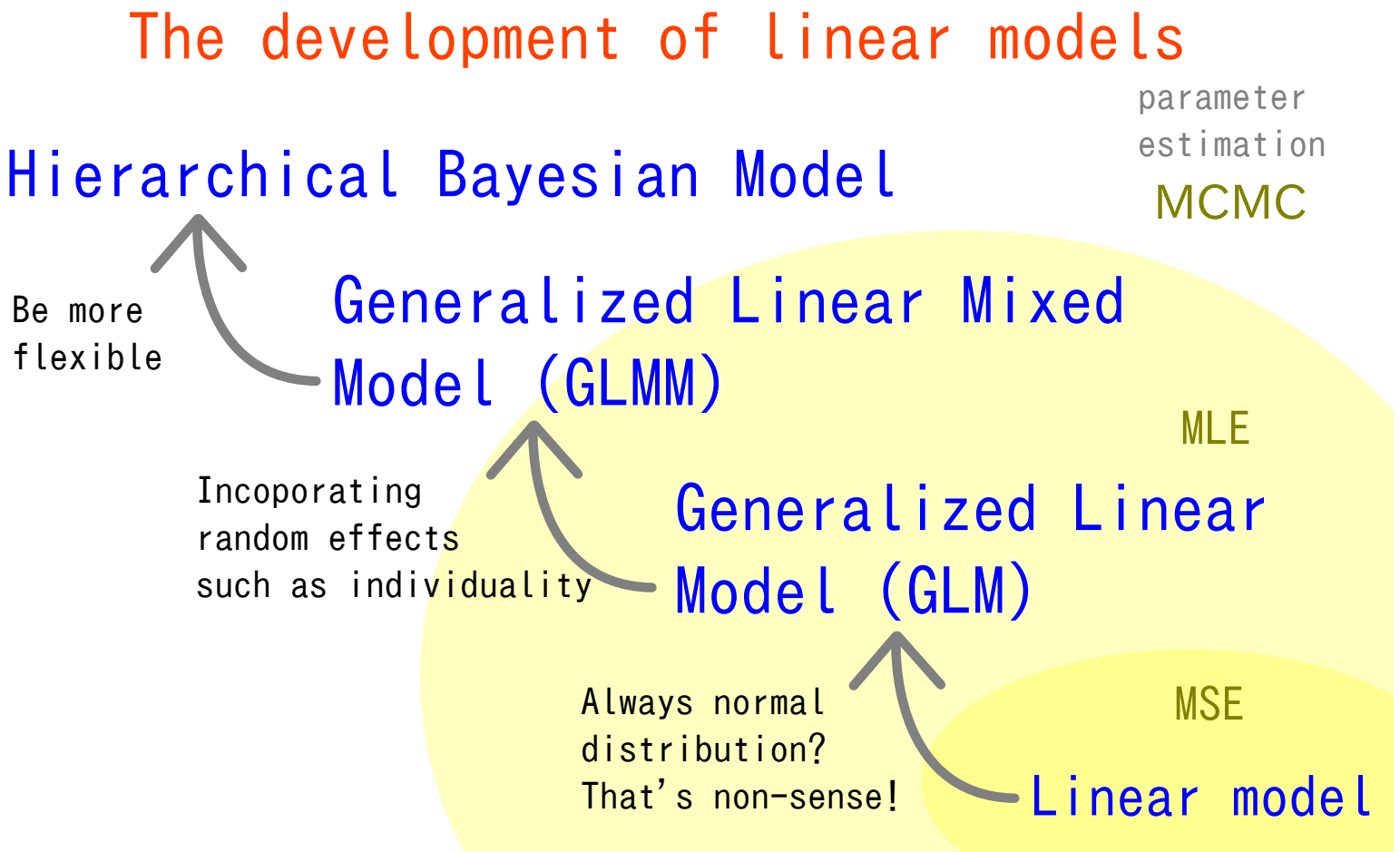
the functions of statistical model

5. **統計モデルの要点**
   random number, estimation and prediction
   乱数発生・推定・予測

本題にはいる前に
統計モデリング授業前半の
「テーマ」を
再確認しておきましょう

statistaical models appeared in the class

この授業であつかう統計モデルたち

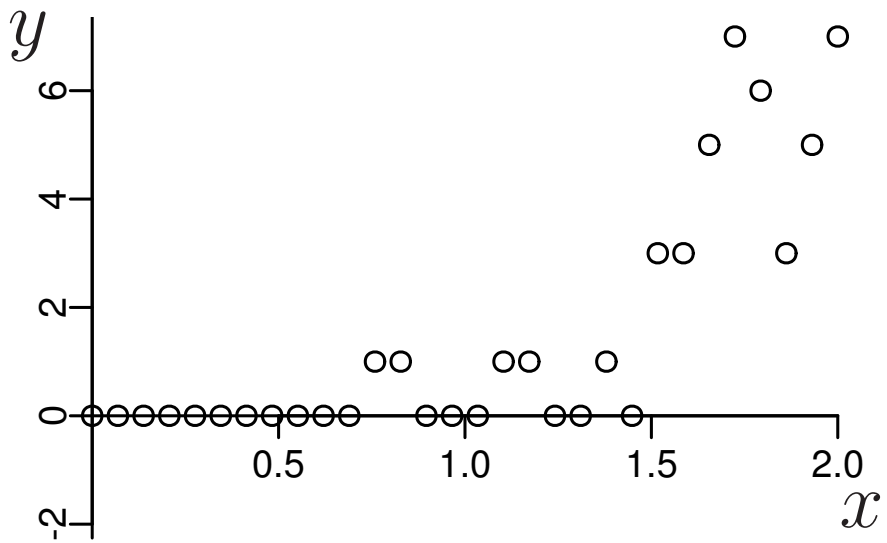


Kubo Doctrine: "Learn the evolution of linear-model family, firstly!"

suppose that you have a “count data” set ...

0 個, 1 個, 2 個と数えられるデータ

カウントデータ $(y \in \{0, 1, 2, 3, \cdots\}$ **なデータ**$)$

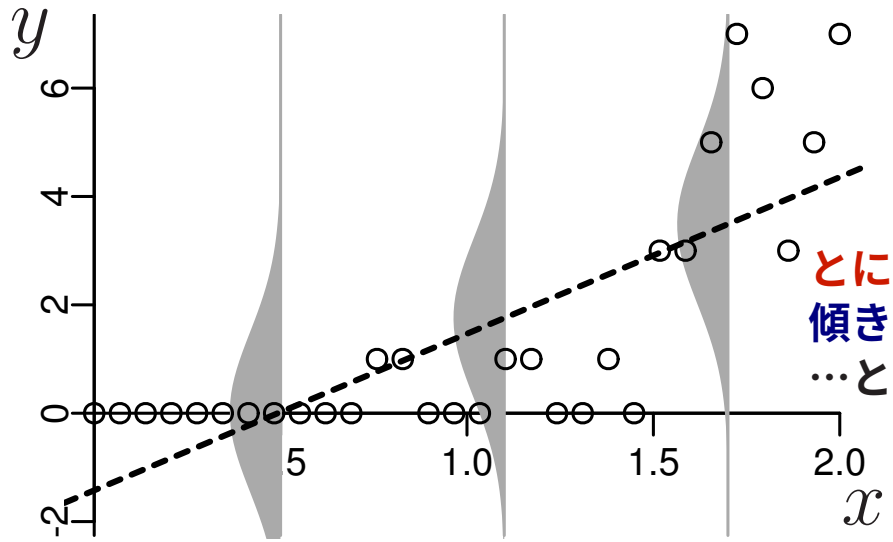


- **たとえば** x **は植物個体の大きさ，**y **はその個体の花数**
- **体サイズが大きくなると花数が増えるように見えるが……**
- **この現象を表現する統計モデルは?**

the normal distribution sucks!

正規分布を使った統計モデル …… ムリがある?

正規分布・恒等リンク関数の統計モデル



NO!

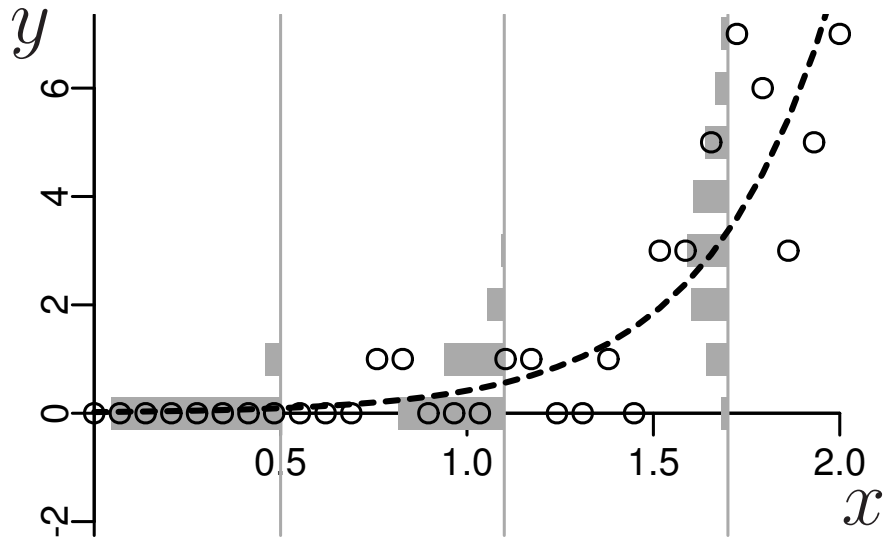
とにかくセンひきゃいいんでしょ
傾き「ゆーい」ならいいんでしょ
…という安易な発想のデータ解析

- タテ軸のばらつきは「正規分布」なのか?
- y の値は 0 以上なのに ……
- 平均値がマイナス?

the Poisson disribution approximates data

ポアソン分布を使った統計モデルなら良さそう?!

ポアソン分布・対数リンク関数の統計モデル



YES!

- タテ軸に対応する「ばらつき」
- 負の値にならない「平均値」
- 正規分布を使ってるモデルよりましだね

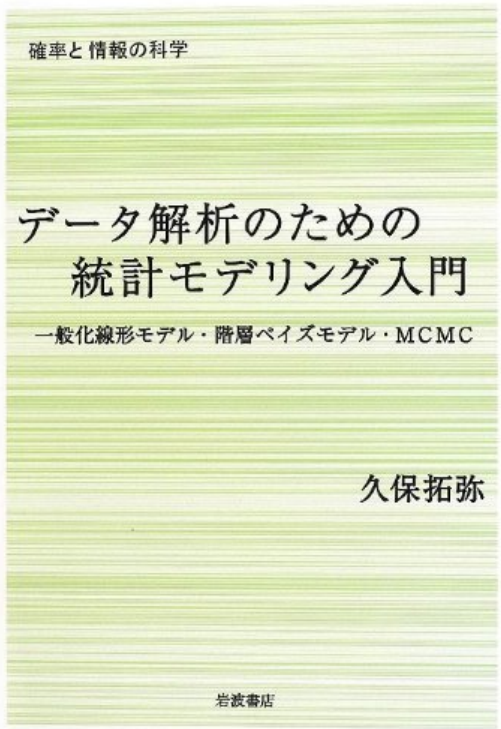
データの性質をよくみる
確率分布という部品を選ぶ
「ぶらっくぼっくす」にしない!

今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

http://goo.gl/Ufq2

今日はおもに「第 2 章 確率分布と統計モデルの最尤推定」の内容を説明します．

- 著者: 久保拓弥
- 出版社: 岩波書店
- 2012–05–18 刊行



a simplified example

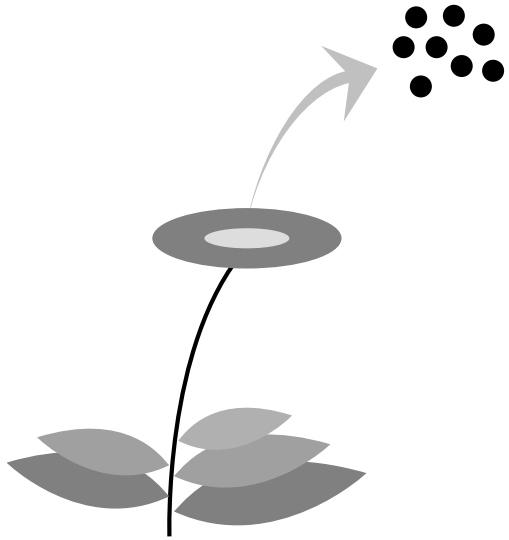
2. 例題: 種子数の統計モデリング

まあ，かなり単純な例から始めましょう

R でデータをあつかいつつ

a simplified data set, easy to understand

この授業では架空植物の架空データをあつかう



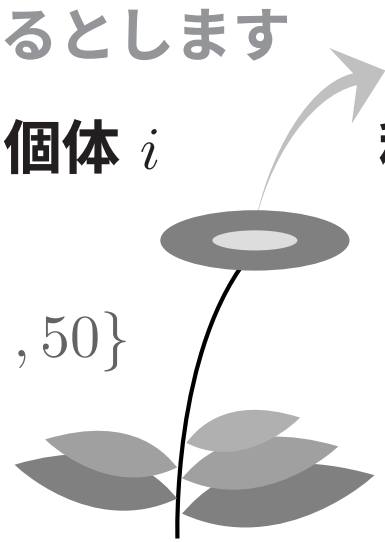
理由: よけいなことは考えなくてすむので

現実のデータはどれも授業で使うには難しすぎる……

number of seeds per plant individual

こんなデータ (架空) があったとしましょう

まあ，なんだかこういうヘンな
植物を調査しているとします



個体 i

種子数 y_i

全 50 個体

$i \in \{1, 2, 3, \cdots, 50\}$

この $\{y_i\}$ が観測データ!

$\{y_i\} = \{y_1, y_2, \cdots, y_{50}\}$

このデータ $\{y_i\}$ がすでに R という統計ソフトウェアに
格納されていた，としましょう

```
> data
 [1] 2 2 4 6 4 5 2 3 1 2 0 4 3 3 3 3 4 2 7 2 4 3 3 3 4
[26] 3 7 5 3 1 7 6 4 6 5 2 4 7 2 2 6 2 4 5 4 5 1 3 2 3
```

apply table() to categorize data

R でデータの様子をながめる

の table() 関数を使って種子数の頻度を調べる

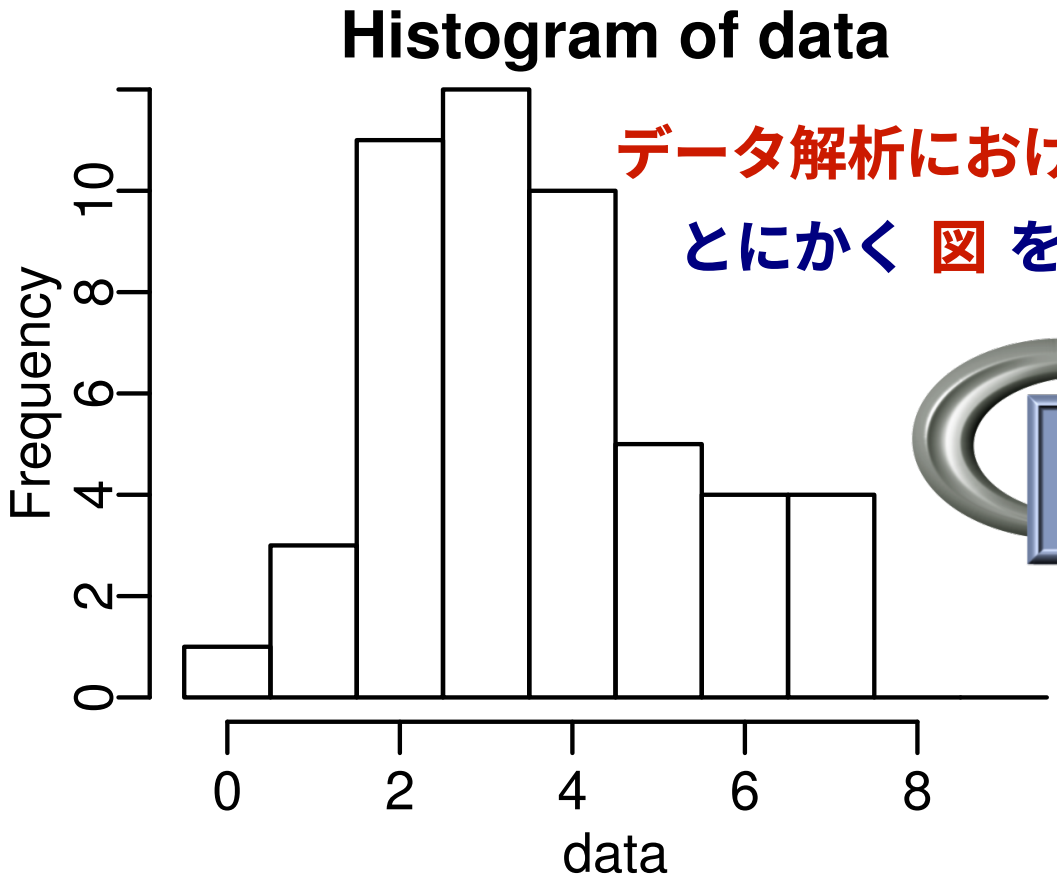
```
> table(data)
 0  1  2  3  4  5  6  7
 1  3 11 12 10  5  4  4
```

(種子数 5 は 5 個体，種子数 6 は 4 個体 ……)

start with data plotting, always

とりあえずヒストグラムを描いてみる

```
> hist(data, breaks = seq(-0.5, 9.5, 1))
```



データ解析における最重要事項

とにかく 図 を描く!

statistics to represent dispersion

「ばらつき」の統計量

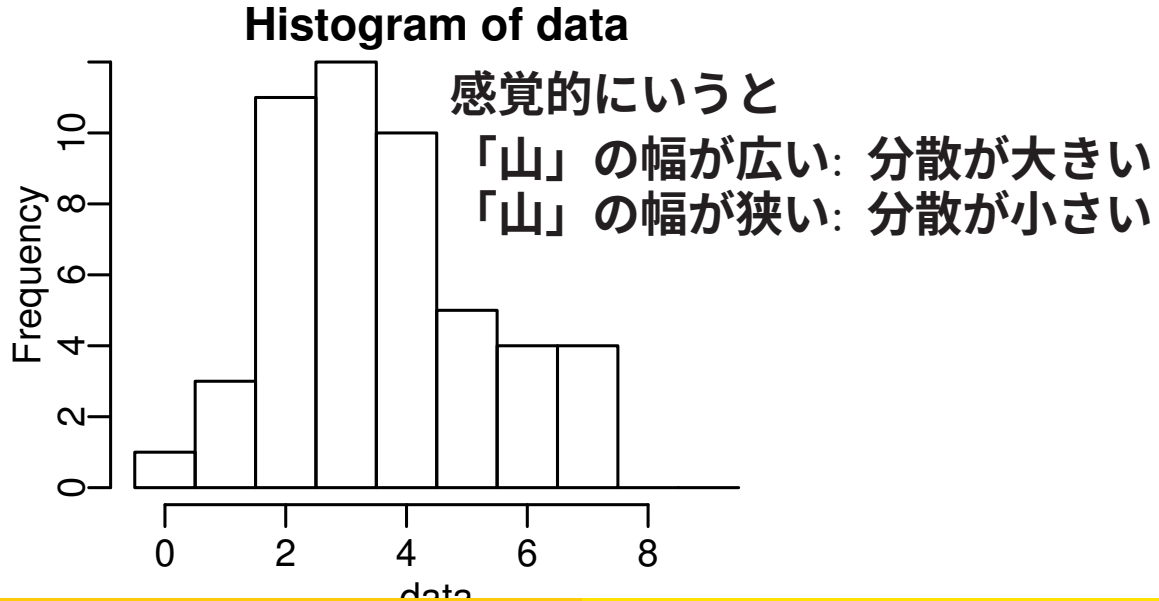
あるデータの **ばらつき** をあらわす標本統計量の例: sample variance **標本分散**

```
> var(data)
[1] 2.9861
```

sample standard deviation

標本標準偏差 とは標本分散の平方根 $(\mathrm{SD} = \sqrt{\mathrm{variance}})$

```
> sd(data)
[1] 1.7280
> sqrt(var(data))
[1] 1.7280
```



感覚的にいうと
「山」の幅が広い: 分散が大きい
「山」の幅が狭い: 分散が小さい

3. データと確率分布の対応

probability distribution, the core of statistical model

確率分布は統計モデルの重要な部品

PD approximates variety of data

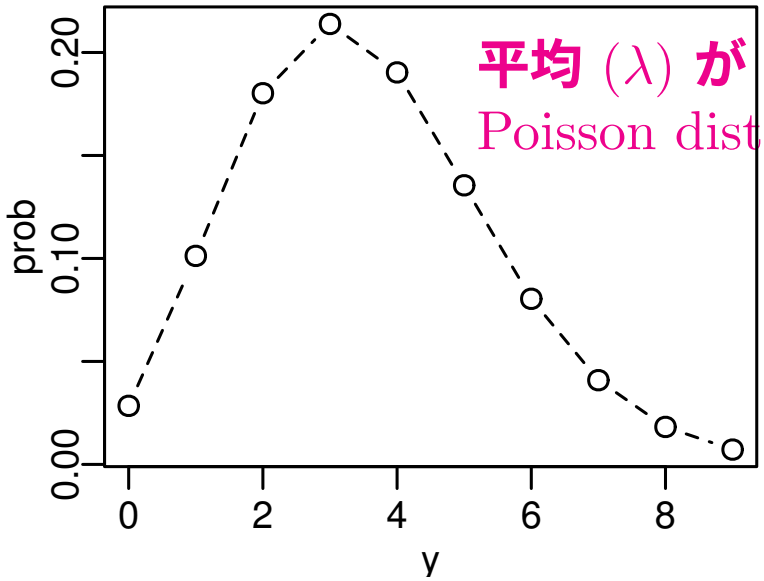
ばらついてる「データ」を近似する道具

the Poisson distribution

ポアソン分布とは何か?

とりあえず R で作図してみる

```
> y <- 0:9                                  # これは種子数（確率変数）
> prob <- dpois(y, lambda = 3.56)           # ポアソン分布の確率の計算
> plot(y, prob, type = "b", lty = 2)
```

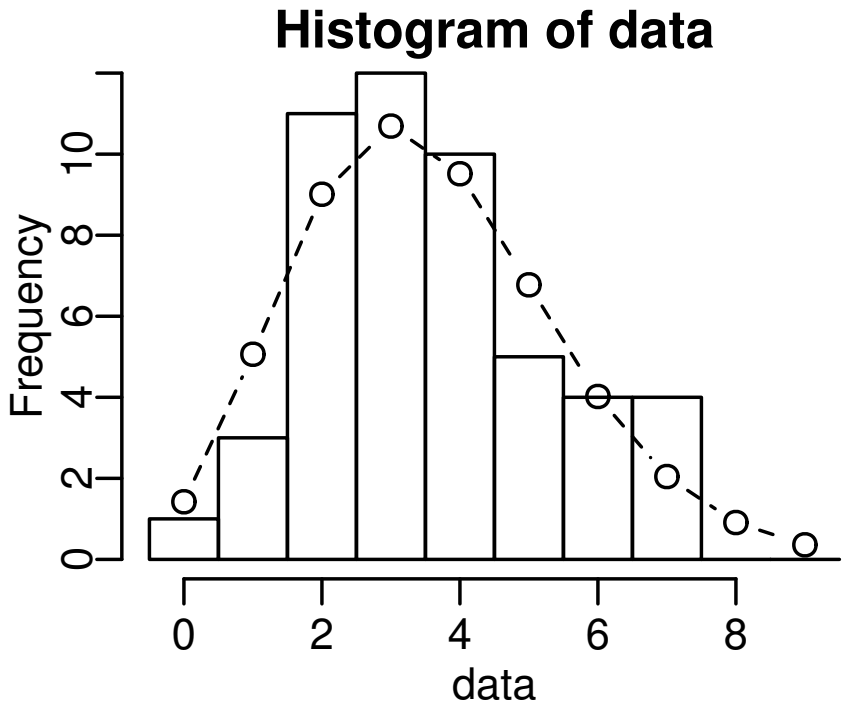


平均 (λ) が 3.56 である
Poisson distribution

```
> # cbind で「表」作り
> cbind(y, prob)
      y        prob
 1    0 0.02843882
 2    1 0.10124222
 3    2 0.18021114
 4    3 0.21385056
 5    4 0.19032700
 6    5 0.13551282
 7    6 0.08040427
 8    7 0.04089132
 9    8 0.01819664
10    9 0.00719778
```

the Poisson distribution represent data?

データとポアソン分布を重ね合わせる




```
> hist(data, seq(-0.5, 8.5, 0.5))      # まずヒストグラムを描き
> lines(y, prob, type = "b", lty = 2) # その「上」に折れ線を描く
```

the Poisson distribution

4. ポアソン分布って何?

平均を変えると分布のカタチが変わる

Parameter changes the shape of probability distribution

確率分布のカタチをきめるパラメーター

Mathematical expression of the Poisson distribution

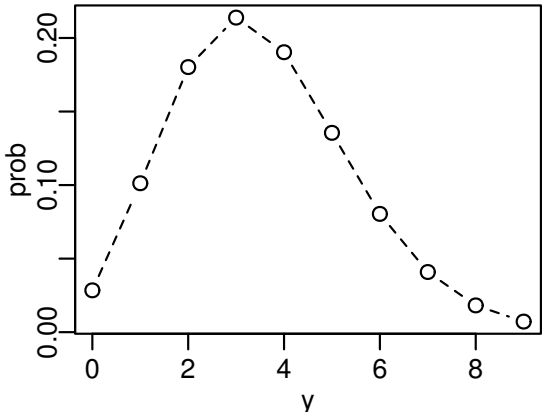
ポアソン分布を数式で表現してみる

種子数が y である $\overset{\text{probability}}{\text{確率}}$ は以下のように決まる，と考えている

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

- $y!$ は y の $\overset{\text{factorial}}{\text{階乗}}$ で，たとえば $4!$ は $1 \times 2 \times 3 \times 4$ をあらわしています．
- $\exp(-\lambda) = e^{-\lambda}$ のこと $(e = 2.718\cdots)$
- ここではなぜポアソン分布の確率計算が上のようになるのかは説明しません— まあ，こういうもんだと考えて先に進みましょう

Paramter λ, the mean of Poisson distribution




```
> # cbind で「表」作り
> cbind(y, prob)
    y        prob
1   0 0.02843882
2   1 0.10124222
3   2 0.18021114
4   3 0.21385056
5   4 0.19032700
6   5 0.13551282
7   6 0.08040427
8   7 0.04089132
9   8 0.01819664
10  9 0.00719778
```

- 平均 λ はポアソン分布の唯一のパラメーター
- 確率分布の平均は λ である（$\lambda \geq 0$）
- 分散と平均は等しい: $\lambda =$ 平均 $=$ 分散
- $y \in \{0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ \infty\}$ の値をとり，すべての y について和をとると 1 になる

$$\sum_{y=0}^{\infty} p(y \mid \lambda) = 1$$

In case that you use the Poisson distribution ...

どういう場合にポアソン分布を使う?

統計モデルの部品としてポアソン分布が選んだ理由:

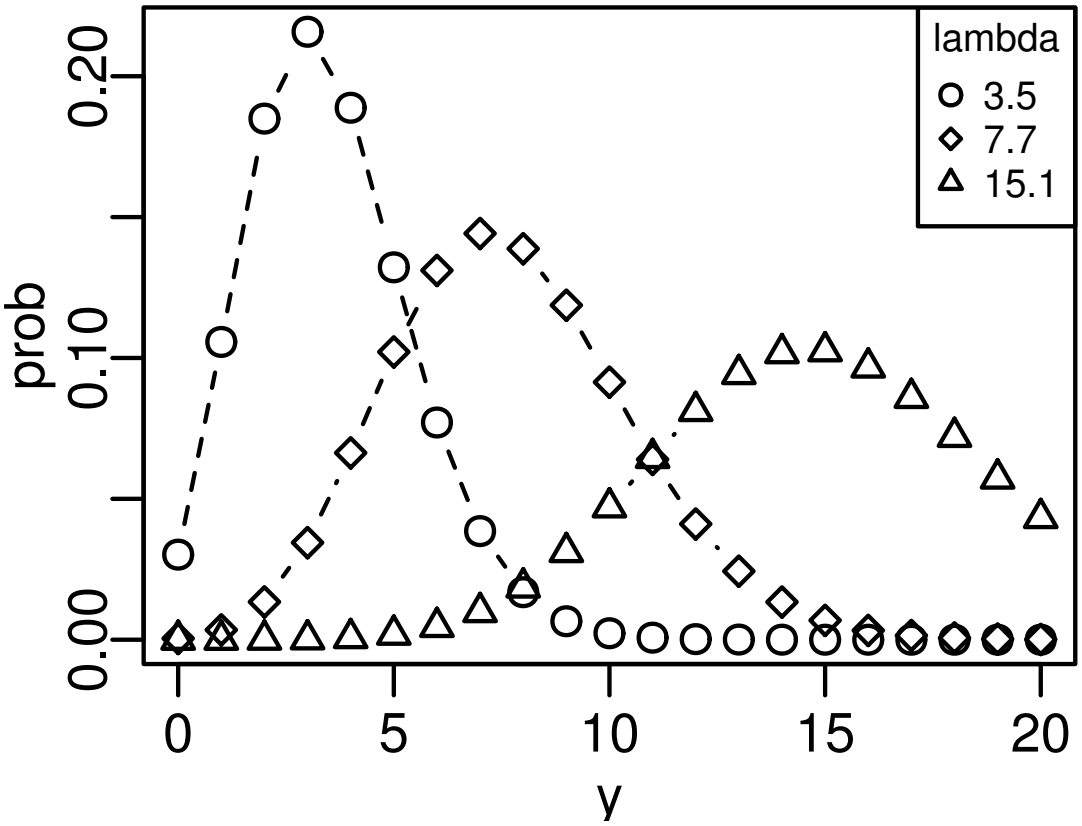
- **データに含まれている値 y_i が $\{0,\ 1,\ 2,\ \cdots\}$ といった非負の整数である（カウントデータ である）**
  $$\text{count data}$$
- **y_i に下限（ゼロ）はあるみたいだけど上限はよくわからない**
  $$\text{mean} \approx \text{variance}$$
- **この観測データでは 平均と分散がだいたい 等しい**
  - **この「だいたい等しい」があやしいのだけど，まあ気にしないことにしましょう**

λ changes the shape of distribution

ポアソン分布の λ を変えてみる

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

mean
λ は 平均 をあらわすパラメーター



suppose that each data point is sampled independently ...

各個体の y_i が独立にポアソン分布にしたがう

……ってどういう意味?

- 個体 1 の種子数は平均 λ のポアソン分布にしたがうと仮定する
  $\rightarrow$ 観測された種子数は $y_1 = 2$ だった
- 個体 2 の種子数は平均 λ のポアソン分布にしたがうと仮定する
  $\rightarrow$ 観測された種子数は $y_2 = 2$ だった
- 個体 3 の種子数は平均 λ のポアソン分布にしたがうと仮定する
  $\rightarrow$ 観測された種子数は $y_3 = 4$ だった
- —(以下,同様)—

といった意味 (他個体とは無関係,ということ)

このように仮定すると,全 50 個体のデータから全個体に共通する

λ は 3.56 ぐらいではないかなぁといった憶測が可能になる

— (つづく)

maximum likelihood estimation of parameter λ

5. ポアソン分布のパラメーターの 最尤推定(さいゆうすいてい)

もっともらしい推定?

"fitting" = "parameter estimation"

「あてはめる」ことは推定すること

尤度 (likelihood) とは何か?

- 最尤推定法 (maximum likelihood estimation) では，尤度 という「あてはまりの良さ」をあらわす統計量に着目
- 尤度は「データが得られる確率」をかけあわせたもの
- この例題の場合，パラメーター λ を変えると尤度が変わる
- もっとも「あてはまり」が良くなる λ を見つけたい
- たとえば，いまデータが 3 個体ぶん，たとえば，$\{y_1,\ y_2,\ y_3\} = \{2,\ 2,\ 4\}$，これだけだった場合，尤度はだいたい $0.180 \times 0.180 \times 0.19 = 0.006156$ といった値になる

likelihood $L(\lambda)$ depends on the value of mean, λ

尤度 $L(\lambda)$ はパラメーター λ の関数

この例題の尤度:

$$
\begin{aligned}
L(\lambda) &= (y_1\text{が } 2 \text{ である確率}) \times (y_2\text{が } 2 \text{ である確率}) \\
&\quad \times \cdots \times (y_{50}\text{が } 3 \text{ である確率}) \\
&= p(y_1 \mid \lambda) \times p(y_2 \mid \lambda) \times p(y_3 \mid \lambda) \times \cdots \times p(y_{50} \mid \lambda) \\
&= \prod_i p(y_i \mid \lambda) = \prod_i \frac{\lambda^{y_i} \exp(-\lambda)}{y_i!},
\end{aligned}
$$

evaluate not likelihood, but log likelihood!

尤度をあつかうのはしんどいので対数尤度を使う

尤度は確率 (あるいは確率密度) の積であり，あつかいがふべん (大量のかけ算!)

そこで，パラメーターの最尤推定では，**対数尤度関数** (log likelihood function) を使う

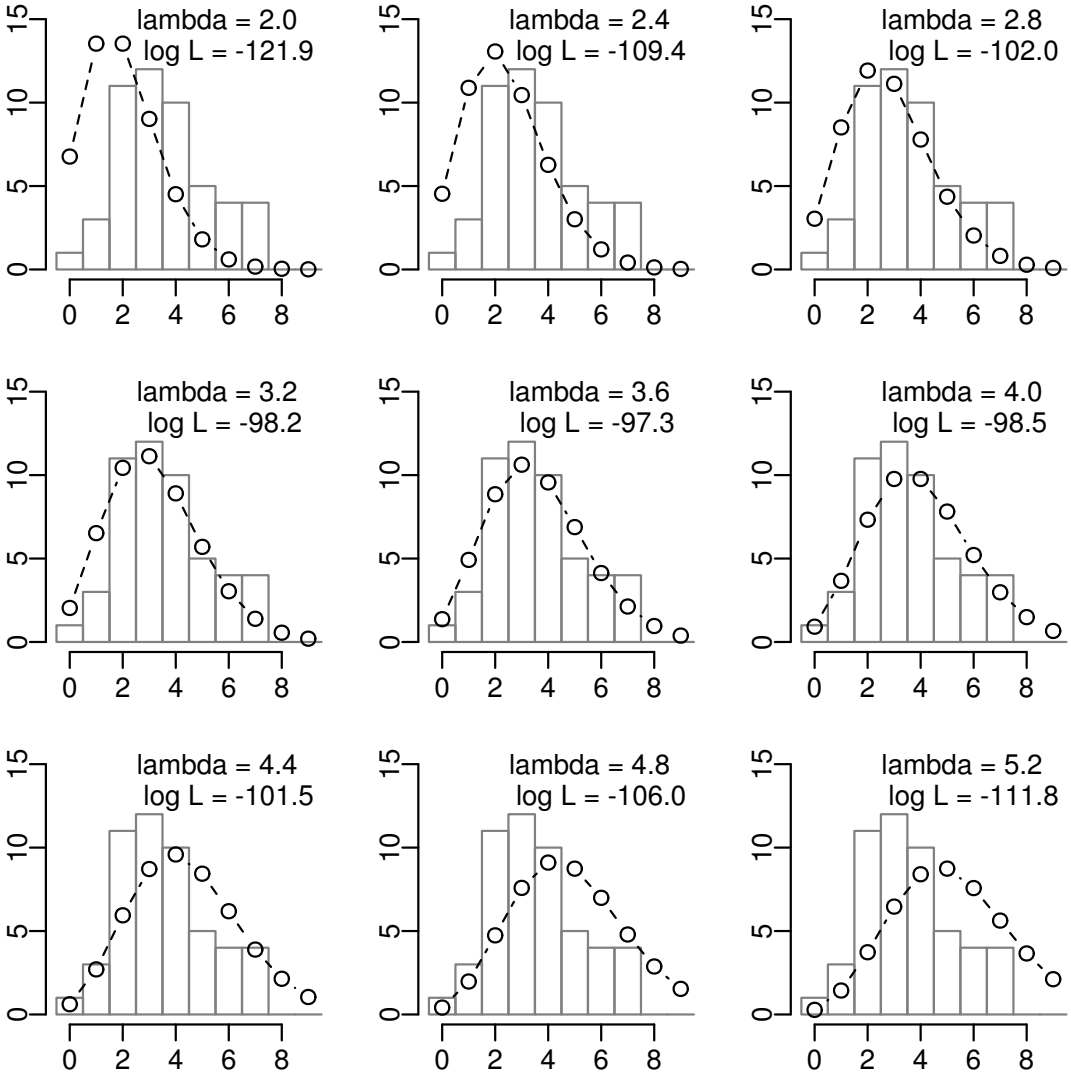
$$\log L(\lambda) = \sum_i \left(y_i \log \lambda - \lambda - \sum_k^{y_i} \log k \right)$$

対数尤度 $\log L(\lambda)$ の最大化は尤度 $L(\lambda)$ の最大化になるから

まずは，平均をあらわすパラメーター λ を変化させていったときに，ポアソン分布のカタチと対数尤度がどのように変化するのかを調べてみましょう

λ changes the log likelihood, i.e., goodness of fit

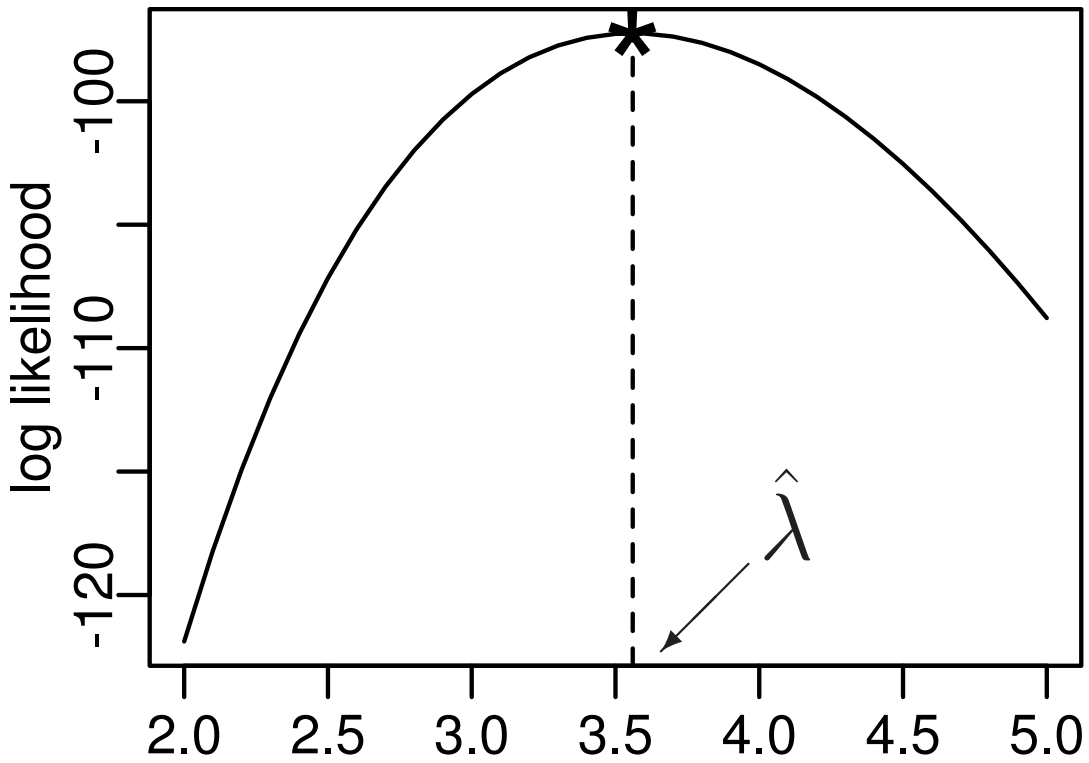
λ を変えるとあてはまりの良さが変わる



seek the maximum likelihood estimate, $\hat{\lambda}$

対数尤度を最大化する $\hat{\lambda}$ をさがす

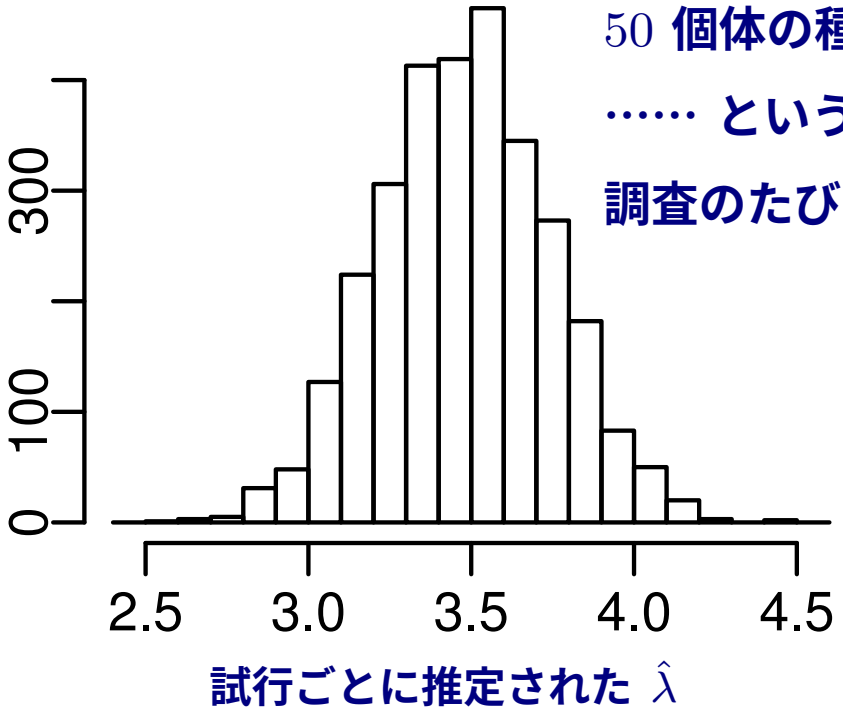
対数尤度 $\log L(\lambda) = \sum_i \left(y_i \log \lambda - \lambda - \sum_k^{y_i} \log k\right)$



no one knows "the true λ" based on finite size data

最尤推定を使っても「真の λ」は見つからない

「真の λ」が 3.5 の場合



50 個体の種子数を調べる

…… ということを 3000 回くりかえし

調査のたびに $\hat{\lambda}$ を最尤推定した

データは有限なので「真の λ」はわからない

the functions of statistical model

6. 統計モデルの要点

random number, estimation and prediction

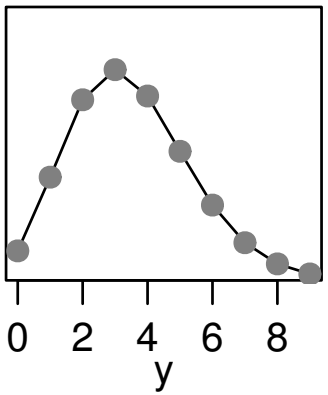
乱数発生・推定・予測

統計モデルとデータの対応づけ

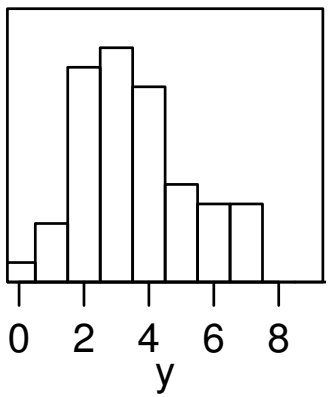
estimation

統計学における　推定

（人間には見えない）
真の統計モデル
$\lambda = 3.5$ のポアソン分布



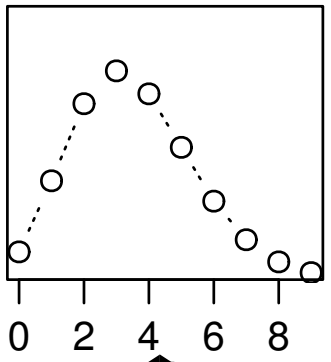
データをサンプル



観測されたデータ

パラメーター推定

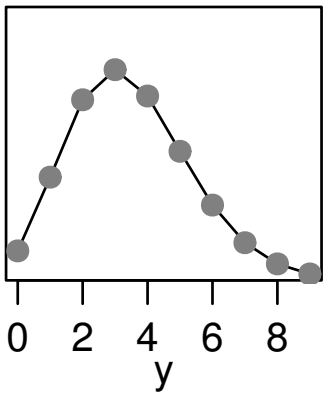
観測データから
推定された
$\hat{\lambda} = 3.56$ のポアソン分布



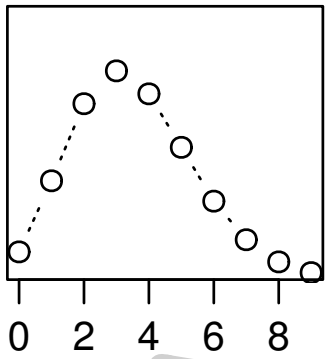
prediction

統計学における　予測

（人間には見えない）
真の統計モデル
$\lambda = 3.5$ のポアソン分布

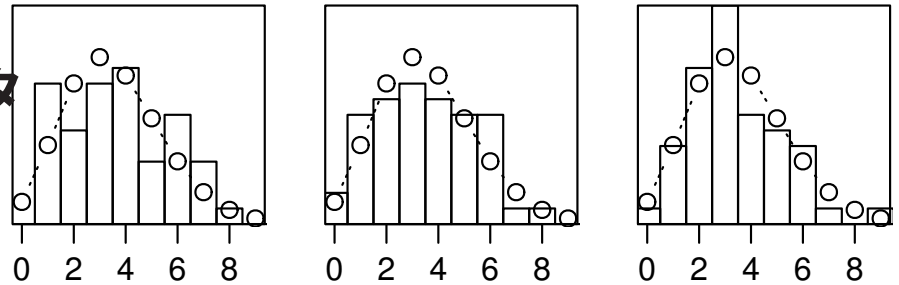


新しいデータ
をサンプル



観測データから
推定された
$\hat{\lambda} = 3.56$ のポアソン分布

予測: 新しいデータに
あてはまるのか？



・・・

同じ調査方法で得られた新データ

probability distributions appeared in the class

この授業で登場する確率分布

poisson distribution

- **ポアソン分布** ：$y \in \{0, 1, 2, 3, \cdots\}$ **となるデータ，「**y **回なにかがおこった」**

binomial distribution

- **二項分布** ：$y \in \{0, 1, 2, \cdots, N\}$ **となるデータ，「**N **個のうち** y **個で何かがおこった」**

normal distribution

- **正規分布** ：$-\infty < y < \infty$ **の連続値をとるデータ**

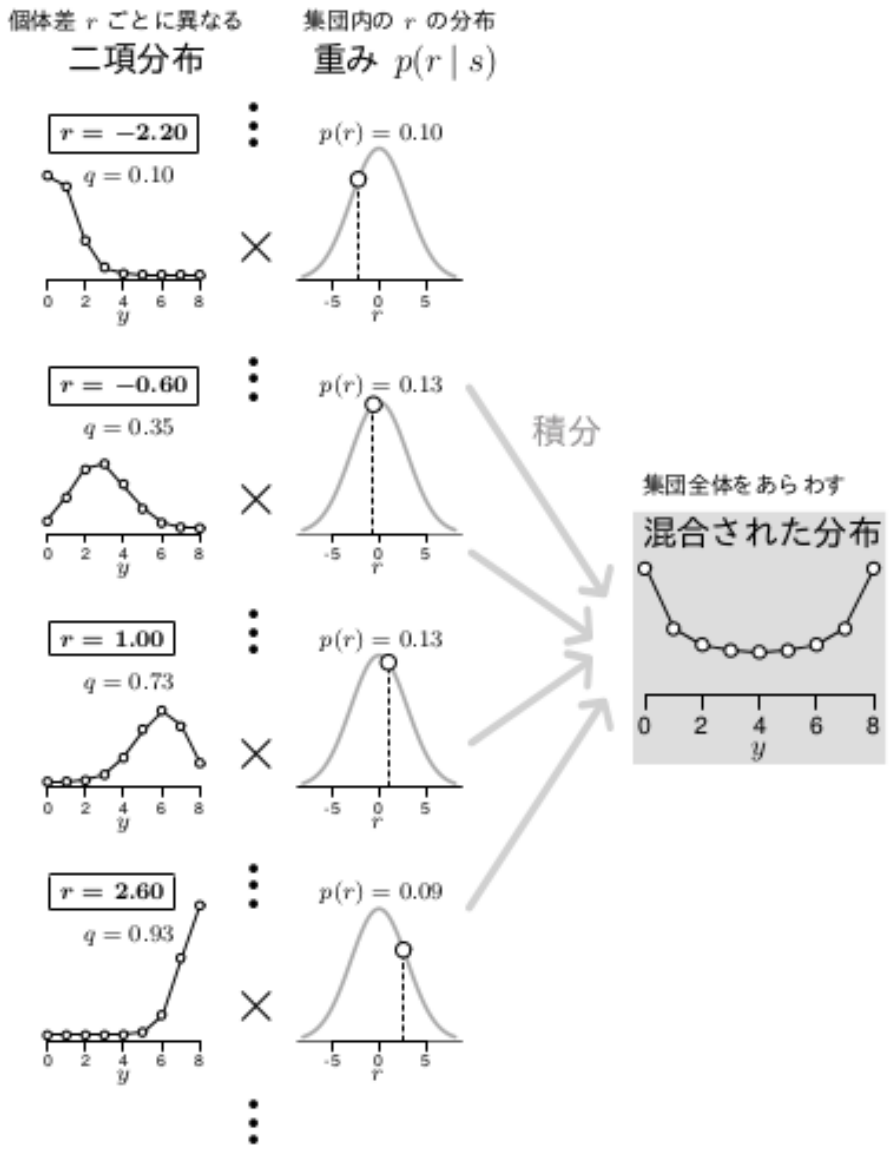
uniform gamma distributions

- **一様分布，ガンマ分布 — ちょっと登場するだけ**

you may not need so many probability distributions

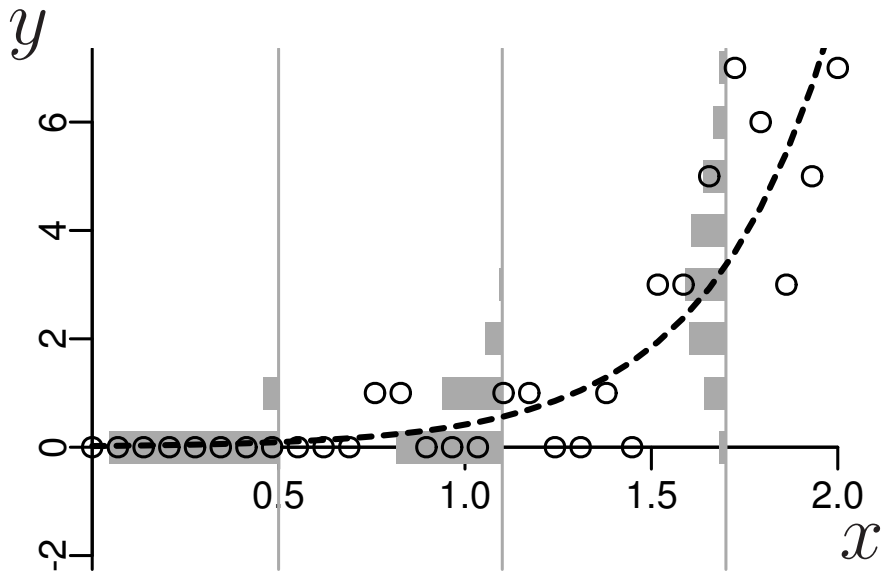
いろいろな確率分布があるけれど……

- この授業では多種多様な確率分布を**あつかいません**
- この授業**後半**では，「ポアソン分布と正規分布を混ぜる」「二項分布と正規分布を混ぜる」といった，**確率分布まぜワザ**を使って，現実にみられる複雑な分布を再現してみます



次回予告

The next topic



YES!

一般化線形モデルのひとつ: ポアソン回帰

Poisson Regression, a Generalized Linear Model (GLM)