

一般化線形 (混合) モデル (2)

ロジスティック回帰と GLMM

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

大阪大学「データ科学特論 I」<http://goo.gl/RrHZeY>

2013-08-27

ファイル更新時刻: 2013-08-27 08:29

この時間のハナシ I

- ① “ N 個のうち k 個が生きてる” タイプのデータ
上限のあるカウントデータ
- ② ロジスティック回帰の部品
二項分布 binomial distribution と logit link function
- ③ ちょっとだけ交互作用項 について
線形予測子の中の複雑な項
- ④ 何でも「割算」するな!
「脱」割算の offset 項わざ
- ⑤ GLM では説明できない種子データ
「ばらつき」が大きすぎる!
- ⑥ 過分散と個体差
観測されていない個体差がもたらす過分散
- ⑦ 一般化線形混合モデル
個体差をあらわすパラメーターを追加

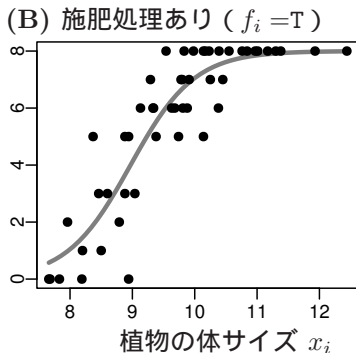
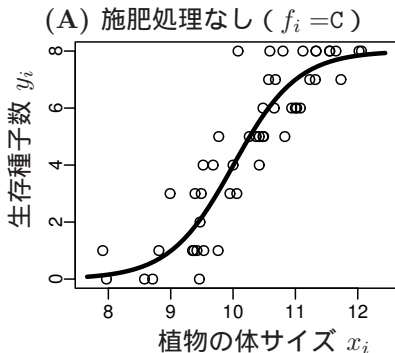
この時間のハナシ II

⑧ 一般化線形混合モデルの最尤推定

個体差 r_i を積分して消す尤度方程式

⑨ 現実のデータ解析には GLMM が必要

個体差・場所差を考えないといけないから

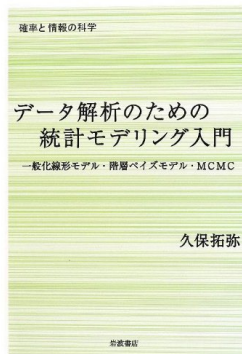


今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

<http://goo.gl/Ufq2>

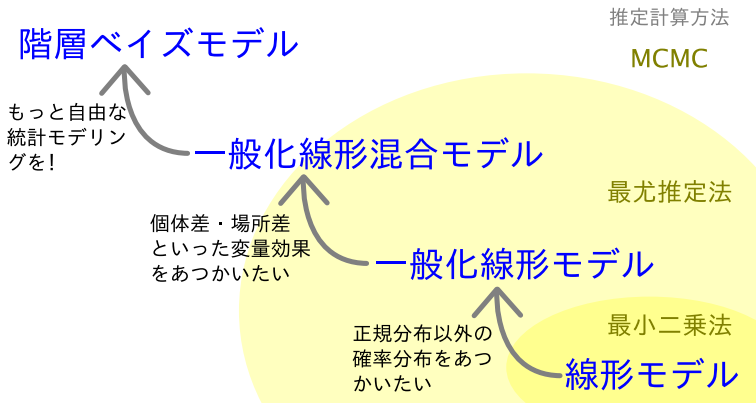
今日はおもに「**第 6-7 章**」の内容を説明します。

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



この授業であつかう統計モデルたち

線形モデルの発展



データの特徴にあわせて線形モデルを改良・発展させる

一般化線形モデルって何？

一般化線形モデル (GLM)

- ポアソン回帰 (Poisson regression)
- **ロジスティック回帰 (logistic regression)**
- 直線回帰 (linear regression)
-

一般化線形モデルを作る

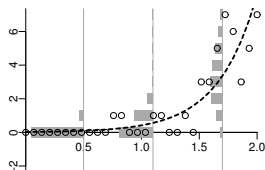
一般化線形モデル (GLM)

- 確率分布は?
- 線形予測子は?
- リンク関数は?

GLM のひとつである**ポアソン回帰**モデルを指定する

ポアソン回帰のモデル

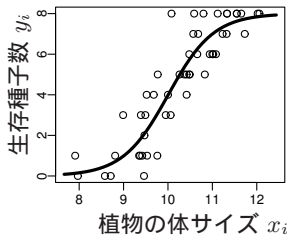
- 確率分布: **ポアソン分布**
- 線形予測子: e.g., $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- リンク関数: **対数リンク関数**



GLM のひとつである **logistic 回帰モデル** を指定する

ロジスティック回帰のモデル

- 確率分布: 二項分布
- 線形予測子: e.g., $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- リンク関数: logit リンク関数



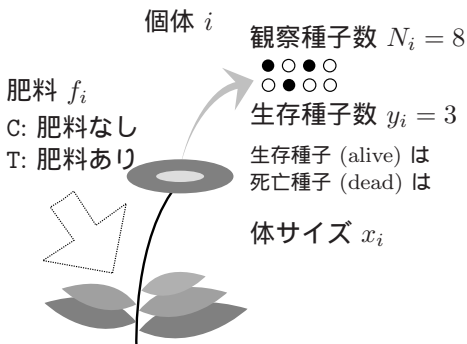
1. “ N 個のうち k 個が生きてる” タイプのデータ

上限のあるカウントデータ

$$y_i \in \{0, 1, 2, \dots, 8\}$$

またいつもの例題? ちょっとちがう

8 個の種子のうち y 個が **発芽可能** だった! というデータ



データファイルを読みこむ

data4a.csv は CSV (comma separated value) format file なので ,
R で読みこむには以下のようにする:

```
> d <- read.csv("data4a.csv")
```

or

```
> d <- read.csv(  
+ "http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/stat/2013/Fig/binomial/data4a.csv")
```

データは `d` と名付けられた data frame (「表」みたいなもの) に格納される

data frame d を調べる

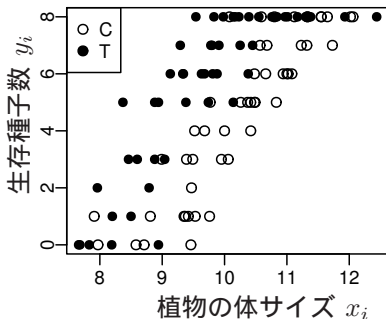
```
> summary(d)
```

	N	y	x	f
Min.	:8	Min. :0.00	Min. : 7.660	C:50
1st Qu.:	:8	1st Qu.:3.00	1st Qu.: 9.338	T:50
Median :	:8	Median :6.00	Median : 9.965	
Mean :	:8	Mean :5.08	Mean : 9.967	
3rd Qu.:	:8	3rd Qu.:8.00	3rd Qu.:10.770	
Max.	:8	Max. :8.00	Max. :12.440	

まずはデータを図にしてみる

```
> plot(d$x, d$y, pch = c(21, 19)[d$f])
```

```
> legend("topleft", legend = c("C", "T"), pch = c(21, 19))
```



今回は施肥処理 がきいている？

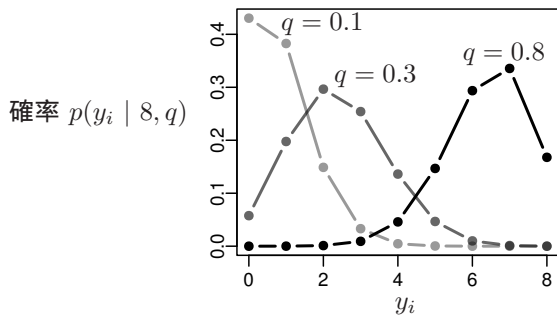
2. ロジスティック回帰の部品

二項分布 binomial distribution と logit link function

二項分布: N 回のうち y 回, となる確率

$$p(y | N, q) = \binom{N}{y} q^y (1 - q)^{N-y}$$

$\binom{N}{y}$ は「 N 個の観察種子の中から y 個の生存種子を選び出す場合の数」

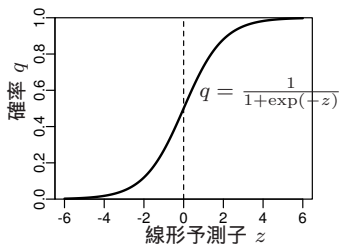


ロジスティック曲線とはこういうもの

ロジスティック関数の関数形 (z_i : 線形予測子, e.g. $z_i = \beta_1 + \beta_2 x_i$)

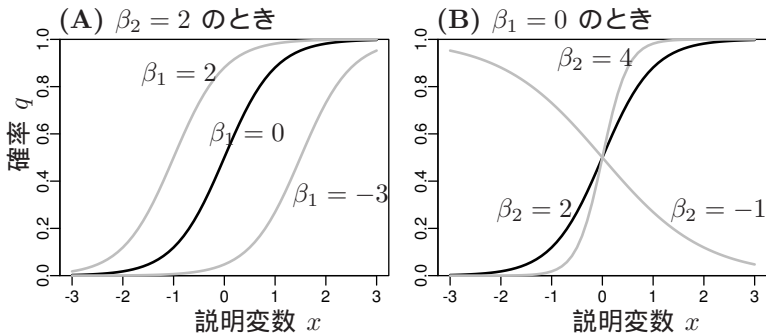
$$q_i = \text{logistic}(z_i) = \frac{1}{1 + \exp(-z_i)}$$

```
> logistic <- function(z) 1 / (1 + exp(-z)) # 関数の定義  
> z <- seq(-6, 6, 0.1)  
> plot(z, logistic(z), type = "l")
```



パラメーターが変化すると.....

黒い曲線は $\{\beta_1, \beta_2\} = \{0, 2\}$. (A) $\beta_2 = 2$ と固定して β_1 を変化させた場合 .
 (B) $\beta_1 = 0$ と固定して β_2 を変化させた場合 .



パラメーター $\{\beta_1, \beta_2\}$ 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

logit link function

- logistic 関数

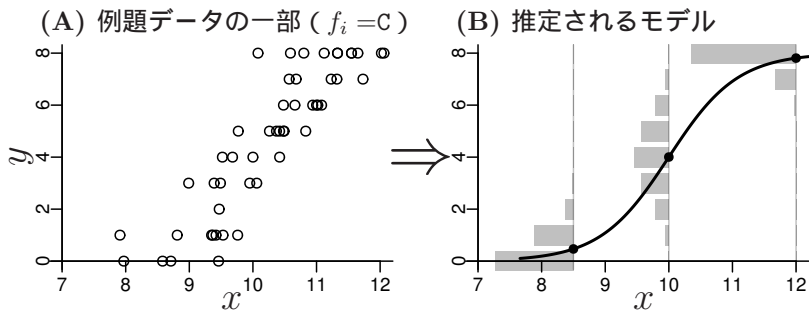
$$q = \frac{1}{1 + \exp(-(\beta_1 + \beta_2 x))} = \text{logistic}(\beta_1 + \beta_2 x)$$

- logit 変換

$$\text{logit}(q) = \log \frac{q}{1 - q} = \beta_1 + \beta_2 x$$

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

logit is the inverse function of logistic function, vice versa

R でロジスティック回帰 — β_1 と β_2 の最尤推定

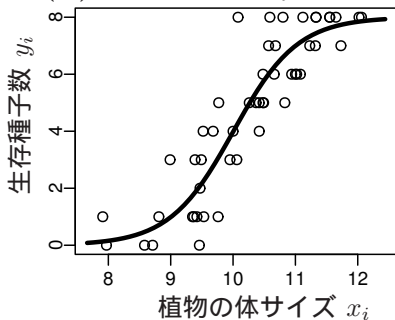
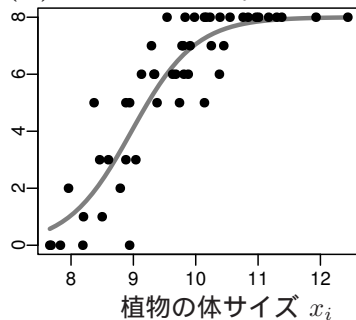
```
> glm(cbind(y, N - y) ~ x + f, data = d, family = binomial)
```

```
...
```

```
Coefficients:
```

(Intercept)	x	fT
-19.536	1.952	2.022

統計モデルの予測: 施肥処理によって応答が違う

(A) 施肥処理なし ($f_i = C$)(B) 施肥処理あり ($f_i = T$)

3. ちょっとだけ交互作用項 について

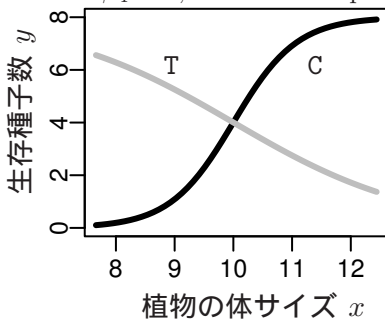
線形予測子の中の複雑な項

ロジスティック回帰を例に

交互作用項とは何か?

$$\text{logit}(q) = \log \frac{q}{1-q} = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 f + \beta_4 x f$$

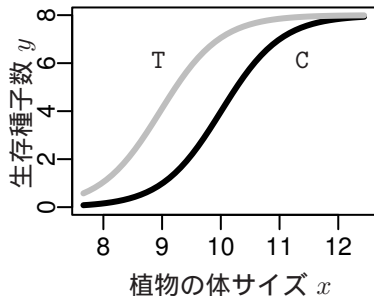
... in case that $\beta_4 < 0$, sometimes it predicts ...



この例題データの場合，交互作用はない

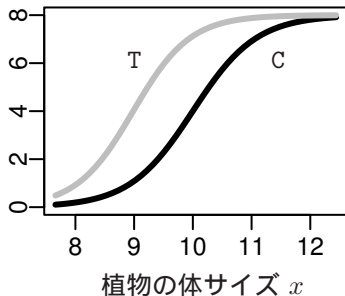
$$\text{glm}(y \sim x + f, \dots)$$

(A) 交互作用のないモデル



$$\text{glm}(y \sim x + f + x:f, \dots)$$

(B) 交互作用のあるモデル



差がほとんどない

4. 何でも「割算」するな!

「脱」割算の offset 項わざ

ポアソン回帰を強めてみる

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」と言ってもよいのか?
- 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はどこにもない

避けられるわりざん

- 避けられる割算値

- 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

- 密度などの指数

例: 人口密度, specific leaf area (SLA) など

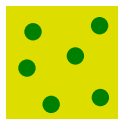
対策: offset 頂わざ — このあと解説!

避けにくいわりざん

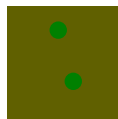
- 避けにくい割算値
 - 測定機器が内部で割算した値を出力する場合
 - 割算値で作図せざるをえない場合があるかも

offset 項の例題: 調査区画内の個体密度

- 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 $\{0.1, 0.2, \dots, 1.0\}$ の 10 段階で観測した



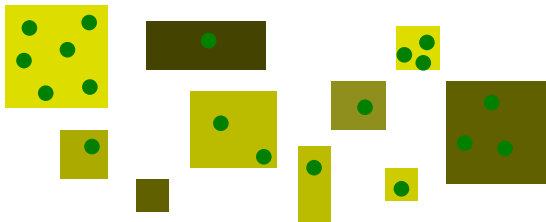
x 大
明るい



x 小
暗い

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

「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` 頂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

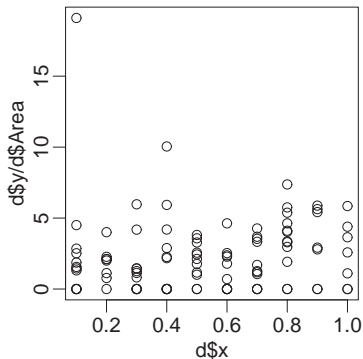
R の data.frame: 面積 Area, 明るさ x, 個体数 y

```
> 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

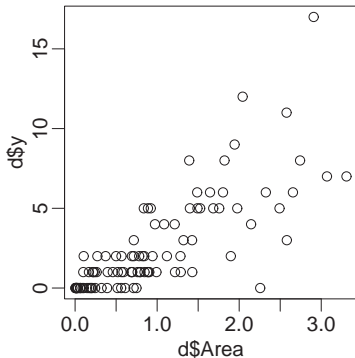
```
> plot(d$x, d$y / d$Area)
```



いまいちよくわからない

面積 A vs 個体数 y の図

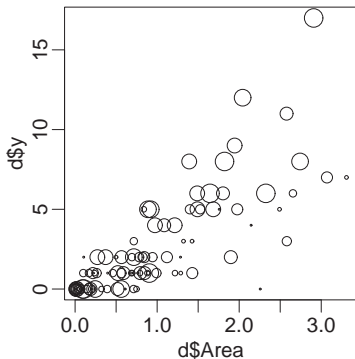
```
> plot(d$Area, d$y)
```



面積 A とともに区画内の個体数 y が増大するようだ

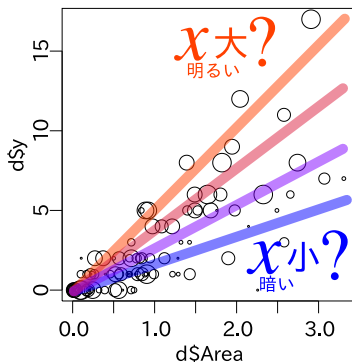
明るさ x の情報 (マルの大きさ) も図に追加

```
> 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 \times 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

- 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:

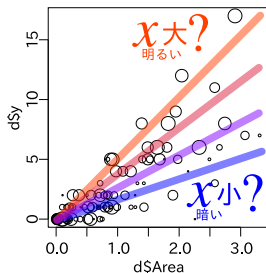
$$y_i \sim \text{Pois}(\lambda_i)$$

- 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

$$\lambda_i = A_i \exp(\beta_1 + \beta_2 x_i)$$

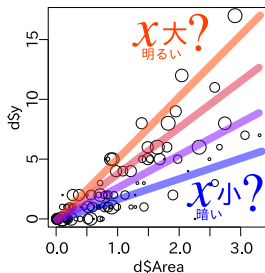
つまり $\lambda_i = \exp(\beta_1 + \beta_2 x_i + \log(A_i))$ となるので
 $\log(\lambda_i) = \beta_1 + \beta_2 x_i + \log(A_i)$ 線形予測子は右辺のようになる

このとき $\log(A_i)$ を offset 項とよぶ (係数 β がない)



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: $y \sim x$
- offset 項の指定: $\log(\text{Area})$
 - 線形予測子 $z = \beta_1 + \beta_2 x + \log(\text{Area})$
 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 $\lambda = \exp(z) = \exp(\beta_1 + \beta_2 x + \log(\text{Area}))$
 - 応答変数 は平均 λ のポアソン分布に従う:



glm() 関数の指定

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

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

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:

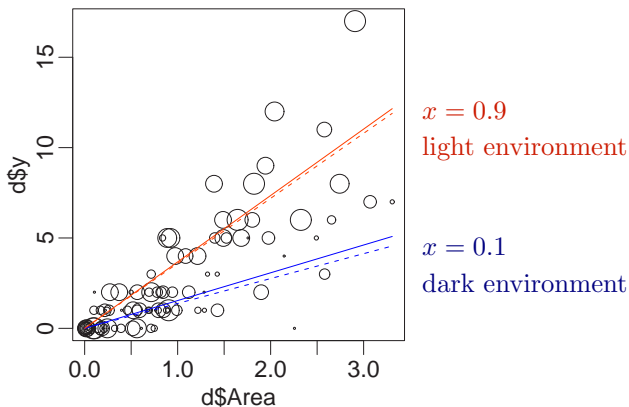
```
glm(formula = y ~ x, family = poisson(link = "log"), data = d,  
  offset = log(Area))
```

(... 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

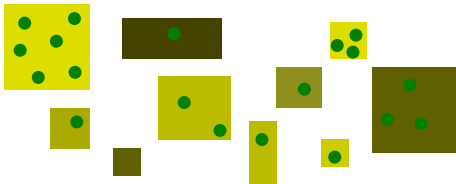
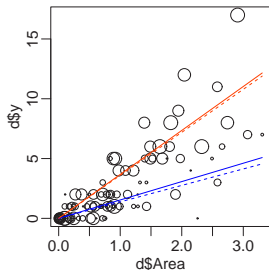
推定結果にもとづく予測を図にしてみる



- 実線は `glm()` の推定結果にもとづく予測
- 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 $\exp(\text{線形予測子})$ として定式化する



統計モデルを工夫してわりざんやめよう

- 避けられる割算値

- 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

- 密度などの指数

例: 人口密度, specific leaf area (SLA) など

対策: offset 頂わざ — 統計モデリングの工夫!

5. GLM では説明できない種子データ

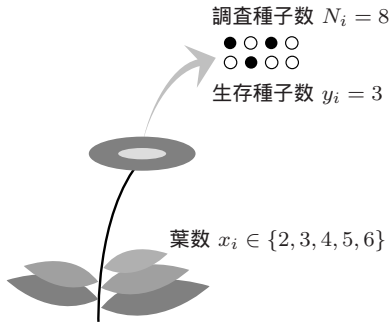
「ばらつき」が大きすぎる!

過分散 (overdispersion) とは何か?

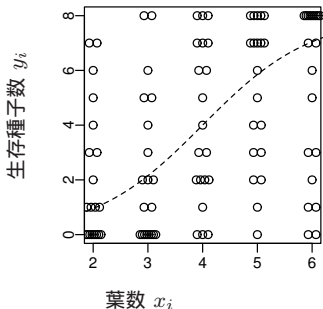
今日の例題：種子の生存確率

前回と同じ?!

(A) 個体 i で観測されたデータ



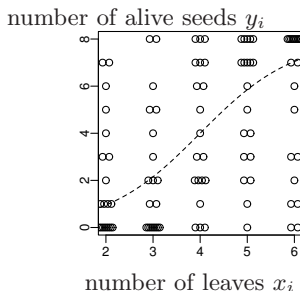
(B) 全 100 個体の x_i と y_i



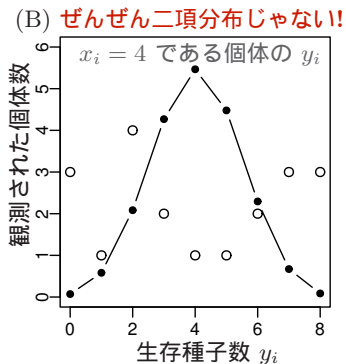
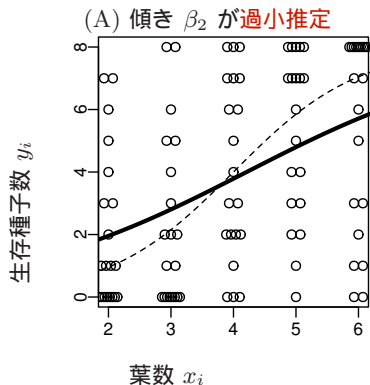
“ N 個中の y 個” というデータ → ロジスティック回帰?

ロジスティック回帰のモデル

- 確率分布: 二項分布
- 線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- リンク関数: logit リンク関数



GLM では説明できないばらつき!



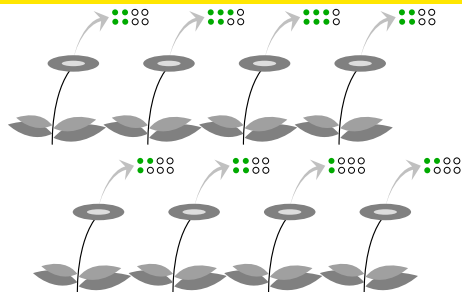
が観測されたデータの図示

6. 過分散と個体差

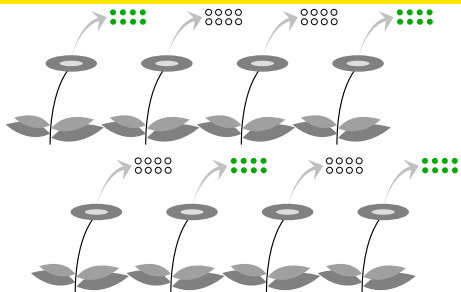
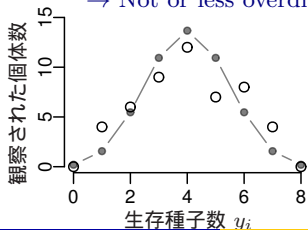
観測されていない個体差がもたらす過分散

観測されていない個体差って？

過分散 (overdispersion) とは何か?

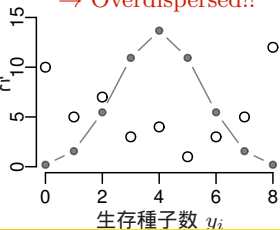


(A) 個体差のばらつきが小さい場合
→ Not or less overdispersed



(B) 個体差のばらつきが大きい場合
→ Overdispersed!!

が観測された
データの図示



ロジスティック回帰やポアソン回帰
といった GLM では
全サンプルの均質性を仮定している

GLM does not take into account individual differences

現実のカウントデータは ほとんど過分散

Almost all “real” data are overdispersed!

7. 一般化線形混合モデル

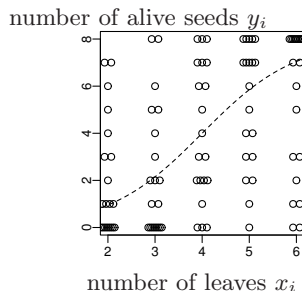
個体差をあらわすパラメーターを追加

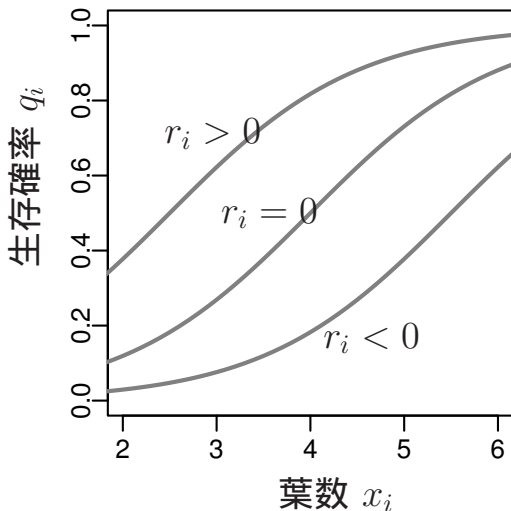
固定効果 と ランダム効果

ロジスティック回帰のモデルを改良する

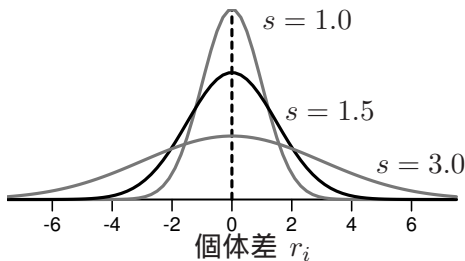
ロジスティック回帰のモデル

- 確率分布: 二項分布
- 線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$
- リンク関数: logit リンク関数



個体 i の個体差を r_i としてみよう

$\{r_i\}$ のばらつきは正規分布だと考えてみる

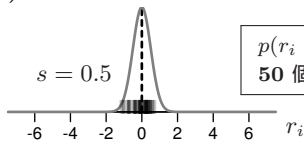


$$p(r_i | s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2s^2}\right)$$

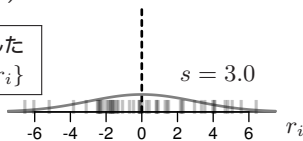
この確率密度 $p(r_i | s)$ は r_i の「出現しやすさ」をあらわしていると解釈すればよいでしょう。 r_i がゼロにちかい個体はわりと「ありがち」で、 r_i の絶対値が大きな個体は相対的に「あまりいない」。

個体差 r_i の分布と過分散の関係

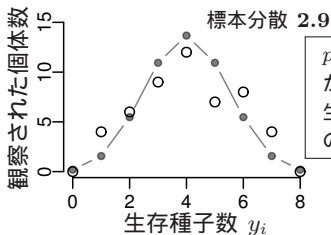
(A) 個体差のばらつきが小さい場合 (B) 個体差のばらつきが大きい場合



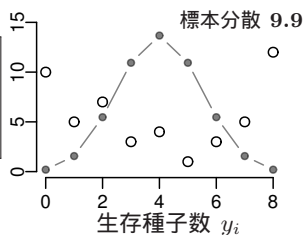
$p(r_i | s)$ が生成した
50 個体ぶんの $\{r_i\}$



確率 $q_i = \frac{1}{1 + \exp(-r_i)}$
の二項乱数を発生させる



$p(y_i | q_i)$
が生成した
生存種子数
の一例



ちょっと乱数を使った数値実験をしてみましょう

```
> # defining logistic function
> logistic <- function(z) { 1 / (1 + exp(-z)) }
> # random numbers following binomial distribution
> rbinom(100, 8, prob = logistic(0))
> # random numbers following Gaussssian distribution
> rnorm(100, mu = 0, sd = 0.5)
> r <- rnorm(100, mu = 0, sd = 0.5)
> # random numbers following ... ?
> rbinom(100, 8, prob = logistic(0 + r))
```


固定効果 と ランダム効果

Generalized Linear Mixed Model (GLMM)
で使う Mixed な 線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$

- fixed effects: $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- random effects: $+r_i$

fixed? random? よくわからん.....?

あとづけメモ: どうでもいい用語説明

伝統的な訳語としては

fixed effects — 母数効果

random effects — 変量効果

なんだかよくわかりませんね

あとづけメモ: 混合モデル補足

データのばらつきが正規分布である混合モデルは
線形混合モデル (linear mixed model, LMM)

random effects は「独立とみなせないデータ」
の「ずれ」をあらわす —

- 個体差の例: 同じ個体から複数のデータをとっている, など
- グループ差の例: 市内の小学校で共通テストをやったときの「学校差」

global parameter, local parameter と分類してみる？

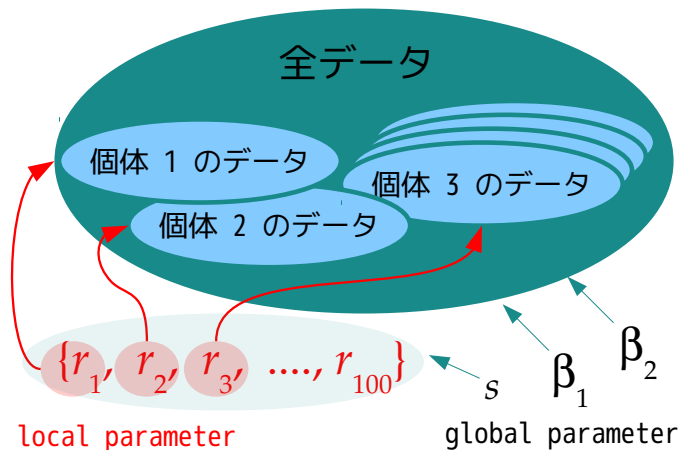
Generalized Linear Mixed Model (GLMM)

で使う線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$

- fixed effects: $\beta_1 + \beta_2 x_i$
 - global parameter — 全個体を説明
- 全個体のばらつき s も global parameter
- random effects: $+r_i$
 - local parameter — 個体 i に関する説明

(注) global/local parameter は久保の造語

統計モデルの大域的・局所的なパラメーター



データのどの部分を説明しているのか?

8. 一般化線形混合モデルの最尤推定

個体差 r_i を積分して消す尤度方程式

「積分する」とは分布を混ぜること

個体差 r_i は最尤推定できない

local parameters: $\{r_1, r_2, \dots, r_{100}\}$

全 100 個体に対して, 個体ごとにいちいち r_i の値を最尤推定すると飽和モデルの推定になってしまう

```
> d <- read.csv("data.csv")
```

```
> head(d)
```

```
  N y x id
1  8 0 2  1
2  8 1 2  2
3  8 2 2  3
4  8 4 2  4
5  8 1 2  5
6  8 0 2  6
```

尤度関数の中で r_i を積分してしまえばよい

データ y_i のばらつき — 二項分布

$$p(y_i | \beta_1, \beta_2) = \binom{8}{y_i} q_i^{y_i} (1 - q_i)^{8 - y_i}$$

個体差 r_i のばらつき — 正規分布

$$p(r_i | s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2s^2}\right)$$

個体 i の尤度 — r_i を消す

$$L_i = \int_{-\infty}^{\infty} p(y_i | \beta_1, \beta_2, r_i) p(r_i | s) dr_i$$

全データの尤度 — β_1, β_2, s の関数

$$L(\beta_1, \beta_2, s) = \prod_i L_i$$

global parameter と local parameter

Generalized Linear Mixed Model (GLMM)
で使う Mixed な 線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$

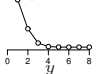
- global parameter は最尤推定できる
 - fixed effects: β_1, β_2
 - 全個体のばらつき: s
- local parameter は最尤推定できない
 - random effects: $\{r_1, r_2, \dots, r_{100}\}$

個体差 r_i について積分する
ということは
二項分布と正規分布をまぜ
あわせること

個体差 r ごとに異なる
二項分布

$$r = -2.20$$

$$q = 0.10$$



⋮

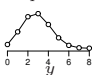
$$p(r) = 0.10$$



×

$$r = -0.60$$

$$q = 0.35$$



⋮

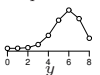
$$p(r) = 0.13$$



×

$$r = 1.00$$

$$q = 0.73$$



⋮

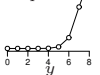
$$p(r) = 0.13$$



×

$$r = 2.60$$

$$q = 0.93$$



⋮

$$p(r) = 0.09$$



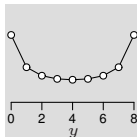
×

⋮

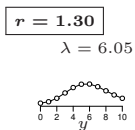
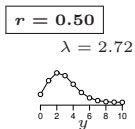
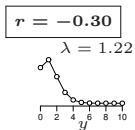
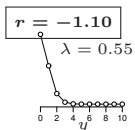
二項分布と正規分布のまぜあわせ

積分

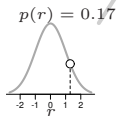
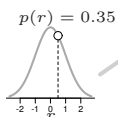
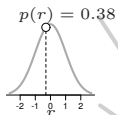
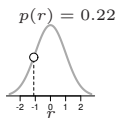
集団全体をあらわす
混合された分布



個体差 r ごとに異なる
ポアソン分布

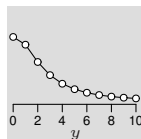


集団内の r の分布
重み $p(r | s)$



ポアソン分布と正規分布のませあわせ

積分 集団全体をあらわす
混合された分布



glmmML package を使って GLMM の推定

```
> install.packages("glmmML") # if you don't have glmmML
> library(glmmML)
> glmmML(cbind(y, N - y) ~ x, data = d, family = binomial
+ cluster = id)

> d <- read.csv("data.csv")
> head(d)
  N y x id
1 8 0 2  1
2 8 1 2  2
3 8 2 2  3
4 8 4 2  4
5 8 1 2  5
6 8 0 2  6
```

GLMM の推定値: $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{s}$

```
> glmmML(cbind(y, N - y) ~ x, data = d, family = binomial,
+ cluster = id)
...(snip)...
```

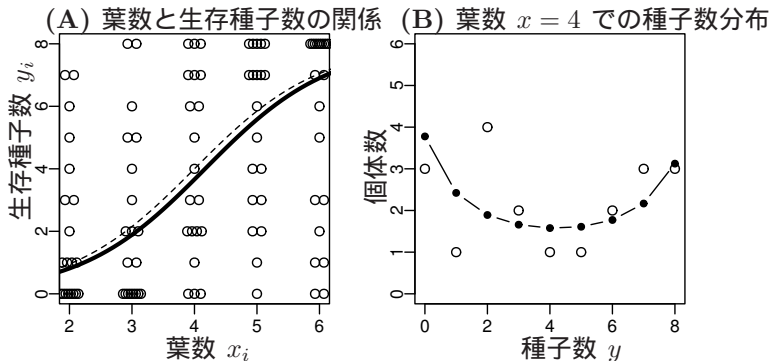
	coef	se(coef)	z	Pr(> z)
(Intercept)	-4.13	0.906	-4.56	5.1e-06
x	0.99	0.214	4.62	3.8e-06

```
Scale parameter in mixing distribution: 2.49 gaussian
Std. Error: 0.309
```

```
Residual deviance: 264 on 97 degrees of freedom AIC: 270
```

$$\hat{\beta}_1 = -4.13, \hat{\beta}_2 = 0.99, \hat{s} = 2.49$$

推定された GLMM を使った予測



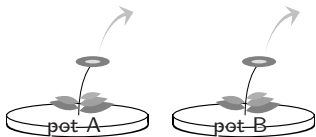
9. 現実のデータ解析には GLMM が必要

個体差・場所差を考えないといけないから

反復・擬似反復に注意しよう

個体差 + 場所差の GLMM I

(A) 個体・植木鉢が反復

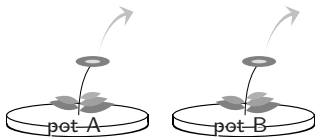


個体差も植木鉢差も
推定できない

$$\text{logit}q_i = \beta_1 + \beta_2 x_i \quad (\text{GLM})$$

q_i : 種子の生存確率

(B) 個体は擬似反復, 植木鉢は反復



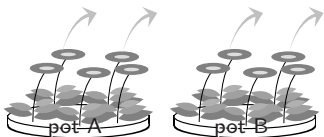
個体差は推定できる
植木鉢差は推定できない

$$\text{logit}q_i = \beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$$

より正確にいうと (A) (B) は個体差と植木鉢差の区別がつかない

個体差 + 場所差の GLMM II

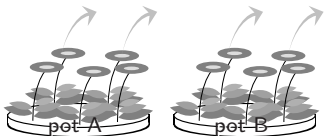
(C) 個体は反復，植木鉢は擬似反復



個体差は推定できない
植木鉢差は推定できる

$$\text{logit}q_i = \beta_1 + \beta_2 x_i + r_j$$

(D) 個体・植木鉢が擬似反復



個体差も植木鉢差も
推定できる

$$\text{logit}q_i = \beta_1 + \beta_2 x_i + r_i + r_j$$

複雑なモデルほど最尤推定は困難，しかも多くのデータが必要

GLMM まとめ

- 現実のデータ解析では個体差・場所差の効果を統計モデルに組みこまなければならない
- これらは歴史的には random effects とよばれてきた
- 実際のところは — 統計モデルには global parameter と local parameter があると考えればよい
- GLMM では global parameter を最尤推定する — local parameter は積分して消す
- local parameter が増えると (e.g. 個体差 + 場所差) パラメータ推定がたいへんになる — ということで