統計モデリング入門 2015 (d)

モデル選択と検定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

北大環境科学院の講義 http://goo.gl/76c4i

2015–07–15

ファイル更新時刻: 2015–07–14 16:48

今日のハナシ I

today's example: seed number data, again
1. **前回と同じ例題: 種子数データ**
   植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

model selection using AIC
2. **AIC を使ったモデル選択**
   badness of fit
   あてはまりの悪さ: deviance

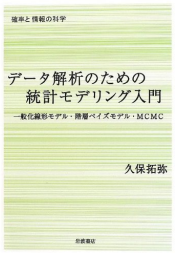
statistical test
3. **統計学的な検定**
   and its asymmetricity
   そして，その非対称性

今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

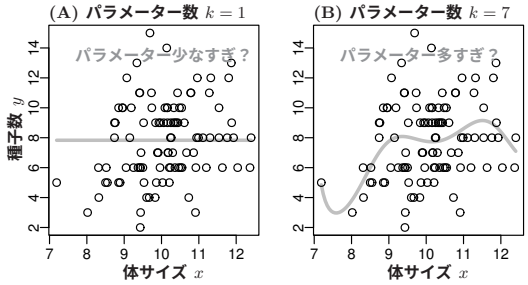
今日はおもに「第 4 章 GLM のモデル選択」と「第 5 章 GLM の尤度比検定と検定の非対称性」の内容を説明します.

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

http://goo.gl/Ufq2



パラメーター数は多くても少なくてもヘン?



What is the **"best?"** parameter number k?

today's example: seed number data, again

1. 前回と同じ例題: 種子数データ

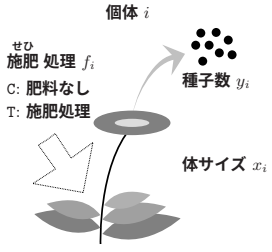
植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

まずはデータの概要を調べる

body size x and fertilization f change seed number y?

個体サイズと実験処理の効果を調べる例題

- response variable / 応答変数 : seed number / 種子数 $\{y_i\}$
- explanatory variable / 説明変数 :
  - body size / 体サイズ $\{x_i\}$
  - fertilization / 施肥処理 $\{f_i\}$



sample size / 標本数

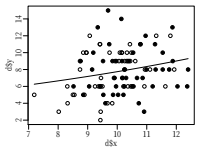
control
- **無処理** ($f_i = \mathtt{C}$): 50 sample ($i \in \{1, 2, \cdots 50\}$)

fertilization
- **施肥処理** ($f_i = \mathtt{T}$): 50 sample ($i \in \{51, 52, \cdots 100\}$)

a statistical model for this example

この例題のための統計モデル

ポアソン回帰のモデル

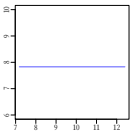


- probability distribution / Poisson distribution
  確率分布 : ポアソン分布
- linear predictor
  線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + \beta_3 f_i$
- link function / log link function
  リンク関数: **対数リンク関数**

4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (A) constant λ

$$\lambda_i = \exp(\beta_1)$$



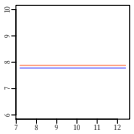
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> logLik(glm(y ~ 1, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -237.64 (df=1)
```


4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (B) f model

$$\lambda_i = \exp(\beta_1 + \beta_3 f_i)$$



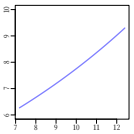
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> logLik(glm(y ~ f, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -237.63 (df=2)
```


4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (C) x model

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



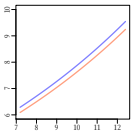
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> logLik(glm(y ~ x, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -235.39 (df=2)
```


4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (D) x + f model

$$\lambda_i = \exp(\beta_1 + \beta_2 x_i + \beta_3 f_i)$$

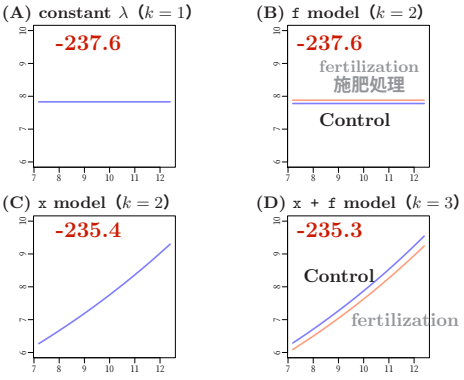


あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> logLik(glm(y ~ x + f, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -235.29 (df=3)
```


k increases $\rightarrow \log L^*$ increases

パラメーター数が多いとあてはまりが良い



model selection using AIC
2. AIC を使ったモデル選択

badness of fit
あてはまりの悪さ: deviance

badness of prediction
そして予測の悪さ: AIC

output
R の glm() は deviance を 出力

```
> glm(y ~ x + f, data = d, family = poisson)

Call:  glm(formula = y ~ x + f, family = poisson, data = d)

Coefficients:
(Intercept)            x           fT
     1.2631       0.0801      -0.0320

Degrees of Freedom: 99 Total (i.e. Null);  97 Residual
Null Deviance:      89.5
Residual Deviance: 84.8          AIC: 477
```

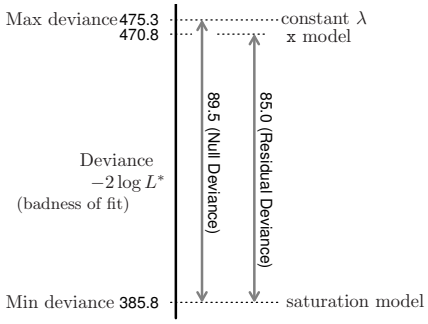
Residual Deviance? Null Deviance? AIC?

deviance $D = -2 \times \log L^*$

- Maximum log likelihood $\log L^*$: goodness of fit
- Deviance $D = -2 \log L^*$: badness of fit

model	k	$\log L^*$	Deviance $-2 \log L^*$	Residual deviance
constant λ	1	-237.6	475.3	89.5
f	2	-237.6	475.3	89.5
x	2	-235.4	470.8	85.0
x + f	3	-235.3	470.6	84.8
saturation	100	-192.9	385.8	0.0

Null deviance, Residual deviance, ...



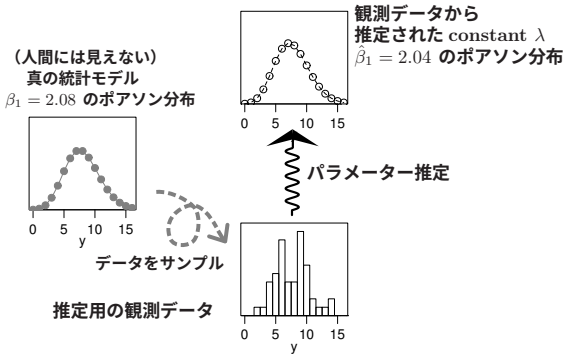
badness of prediction
予測の悪さ : AIC $= -2 \log L^* + 2k$

Look for a model of the smallest AIC
AIC 最小のモデルを選ぶ

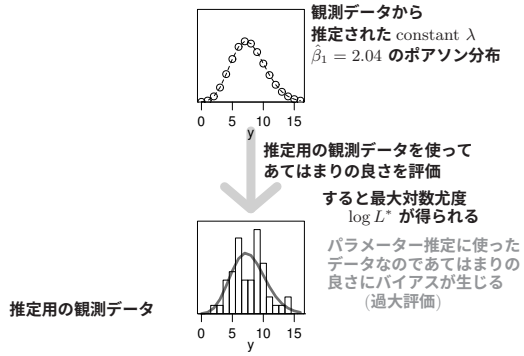
model	k	$\log L^*$	Deviance $-2 \log L^*$	Residual deviance	AIC
constant λ	1	-237.6	475.3	89.5	477.3
f	2	-237.6	475.3	89.5	479.3
x	**2**	**-235.4**	**470.8**	**85.0**	**474.8**
x + f	3	-235.3	470.6	84.8	476.6
saturation	100	-192.9	385.8	0.0	585.8

AIC: A (or Akaike) information criterion

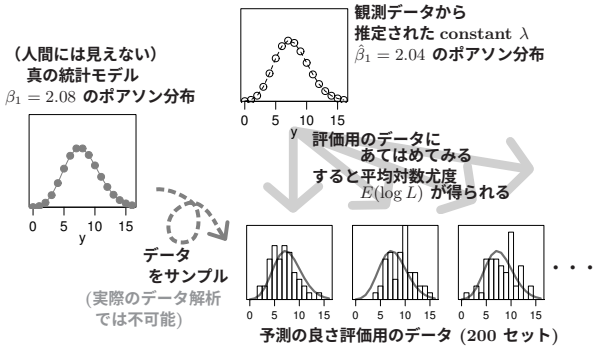
統計モデルによる推測って何だっけ?



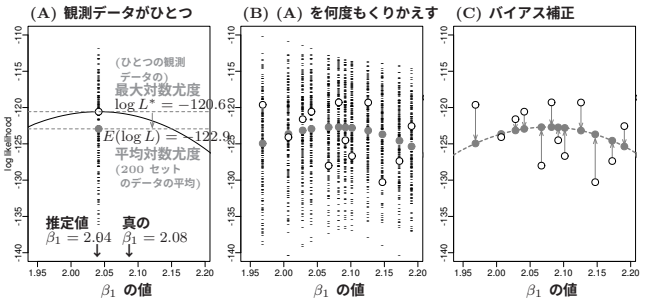
推定に使ったデータであてはまりを評価している?



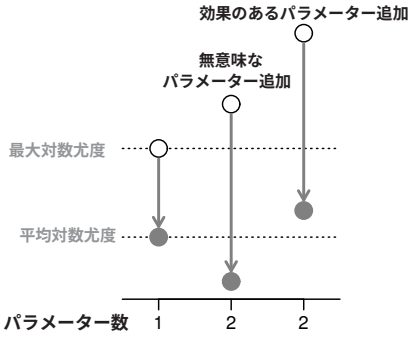
重要なこと: 「新データ」があてはまるかどうか



シミュレイションで予測の良さを調べる



バイアス補正を図示してみる



statistical test

3. 統計学的な検定

and its asymmetricity

そして，その非対称性

likelihood ratio test

ここでは 尤度比検定 を紹介

model selection statistical test

モデル選択 と 統計学的検定 は

totally different in their objectives

その目的がぜんぜんちがう

Objective
目的?
model selection
モデル選択:
Look for a model of better prediction
よい予測をするモデルの探索

statistical test rejection of null hypothesis
統計学的検定: **帰無仮説の排除**
described later
(あとで説明)

But their procedures are similar
しかしモデル選択と検定の手順は途中まで同じ

統計モデルの検定	AIC によるモデル選択

解析対象のデータを確定

⇓

データを説明できるような統計モデルを設計

(帰無仮説・対立仮説) (単純モデル・複雑モデル)

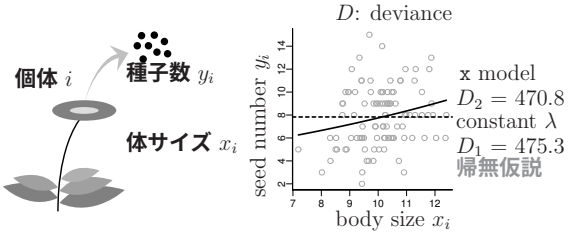
⇓

ネストした統計モデルたちのパラメーターの 最尤(さいゆう) 推定計算

⇓ ⇓

帰無仮説棄却の危険率を評価 モデル選択規準 AIC の評価

The same example, again
また同じ例題



neglect fertilization treatment
(施肥処理は無視!)

test statistics
検定統計量 $\Delta D_{1,2}$

difference in deviance $\Delta D_{1,2} = D_1 - D_2 = \mathbf{4.51} \approx 4.5$

likelihood ratio? — $\log \frac{L_1^*}{L_2^*} = \log L_1^* - \log L_2^*$

model	k	$\log L^*$	Deviance $-2\log L^*$	
constant λ	1	-237.6	$D_1 = 475.3$	null hypothesis 帰無仮説
x	2	-235.4	$D_2 = 470.8$	alternative hypothesis 対立仮説

asymmetricity in test Null hypothesis is junk
検定の非対称性: **帰無仮説はゴミあつかい**
... yet we are focusing only on null hypothesis
……にもかかわらず，帰無仮説だけをしつこく調べる

objective null hypothesis rejection
検定の目的: 帰無仮説 の 棄却

observerd
観察された逸脱度差 $\Delta D_{1,2} = 4.5$ は……

↓帰無仮説は	「めったにない差」(帰無仮説を棄却)	「よくある差」(棄却できない)
真のモデルである	第一種の過誤	(問題なし)
真のモデルではない	(問題なし)	第二種の過誤

↓ is ...	significant (Reject)	not significant (Not reject)
TRUE	Type I error	(no problem)
NOT true	(no problem)	Type II error

asymmetricity in test evaluating only Type-I error
検定の非対称性: **第一種の過誤だけに注目**

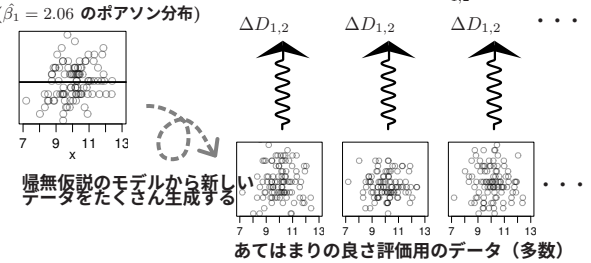
generate $\Delta D_{1,2}$ distribution bootstrap likelihood test
$\Delta D_{1,2}$ の分布を生成 : ブートストラップ尤度比検定

Suppose null hypothesis is TRUE!

帰無仮説 が真のモデルであるとしよう!

帰無仮説が真の統計モデル
ということにしてしまう
($\hat{\beta}_1 = 2.06$ のポアソン分布)

評価用データに constant λ と x model
をあてはめて逸脱度差 $\Delta D_{1,2}$ の分布を予測



帰無仮説のモデルから新しい
データをたくさん生成する

あてはまりの良さ評価用のデータ（多数）

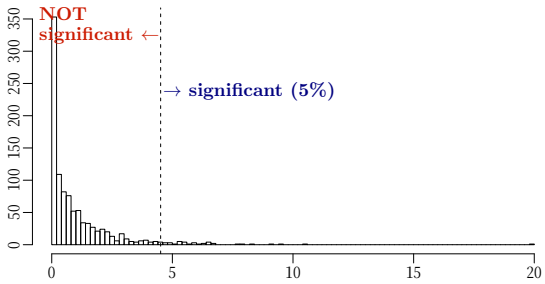
How to generate $\Delta D_{1,2}$ under  is TRUE?

```
> d$y.rnd <- rpois(100, lambda = mean(d$y))
> fit1 <- glm(y.rnd ~ 1, data = d, family = poisson)
> fit2 <- glm(y.rnd ~ x, data = d, family = poisson)
> fit1$deviance - fit2$deviance
```

- `rpois()` による (generation of random numbers) ポアソン乱数の生成 (virtual data) (架空データ)
- 架空データを使って (fitting GLM to the virtual data) `glm()` あてはめ

You must define "rejection region" in advance
あらかじめ棄却域を決めておく

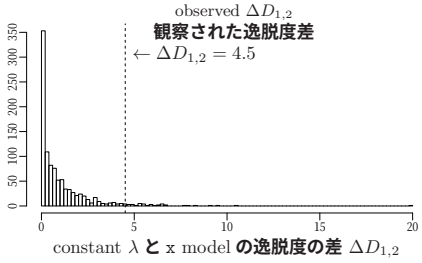
say, 5%?
たとえば 5% とか?



A random $\Delta D_{1,2}$ generator in R

```
get.dd <- function(d) # データの生成と逸脱度差の評価
{
  n.sample <- nrow(d) # データ数
  y.mean <- mean(d$y) # 標本平均
  d$y.rnd <- rpois(n.sample, lambda = y.mean)
  fit1 <- glm(y.rnd ~ 1, data = d, family = poisson)
  fit2 <- glm(y.rnd ~ x, data = d, family = poisson)
  fit1$deviance - fit2$deviance # 逸脱度の差を返す
}
pb <- function(d, n.bootstrap)
{
    replicate(n.bootstrap, get.dd(d))
}
```


Generated distribution of $\Delta D_{1,2} = D_1 - D_2$



constant λ と x model の逸脱度の差 $\Delta D_{1,2}$

(R code is in the next page)

Probability$\{\Delta D_{1,2} \geq 4.5\} = \frac{38}{1000} = 0.038$

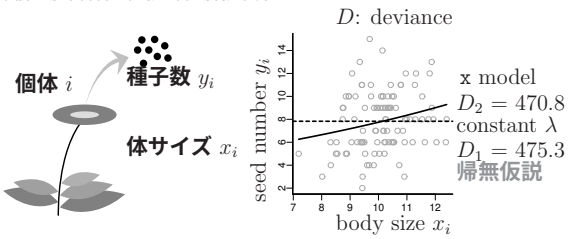
```
> source("pb.R") # reading "pb.R" text file
> dd12 <- pb(d, n.bootstrap = 1000)
> hist(dd12, 100) # to plot histogram
> abline(v = 4.5, lty = 2)
> sum(dd12 >= 4.5)
[1] 38
```

so-called "P-value" is 0.038.

In this case, (null hypothesis) 帰無仮説  is rejected

So we can state that (alternative hypothesis) 対立仮説  can be accepted.

x model is better than constant λ.



In case that $P > 0.05$ ...?

No conclusion
何も結論できない ……

You can NOT state that constant λ is better
λ **一定のモデルが良いとは言えない**

Null hypothesis is never accepted
asymmetricity in test
検定の非対称性 : **帰無仮説**  **はけっして受容されない**