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: 2015–07–15 13:46

今日のハナシ I

today's example: seed number data, again

❶ **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

❷ AIC **を使ったモデル選択**

badness of fit

あてはまりの悪さ: deviance

statistical test

❸ **統計学的な検定**

and its asymmetricity

そして，その非対称性

model selection　　statistical test

❹ **モデル選択　と 統計学的な検定**

misunderstanding

のさまざまな　　誤解

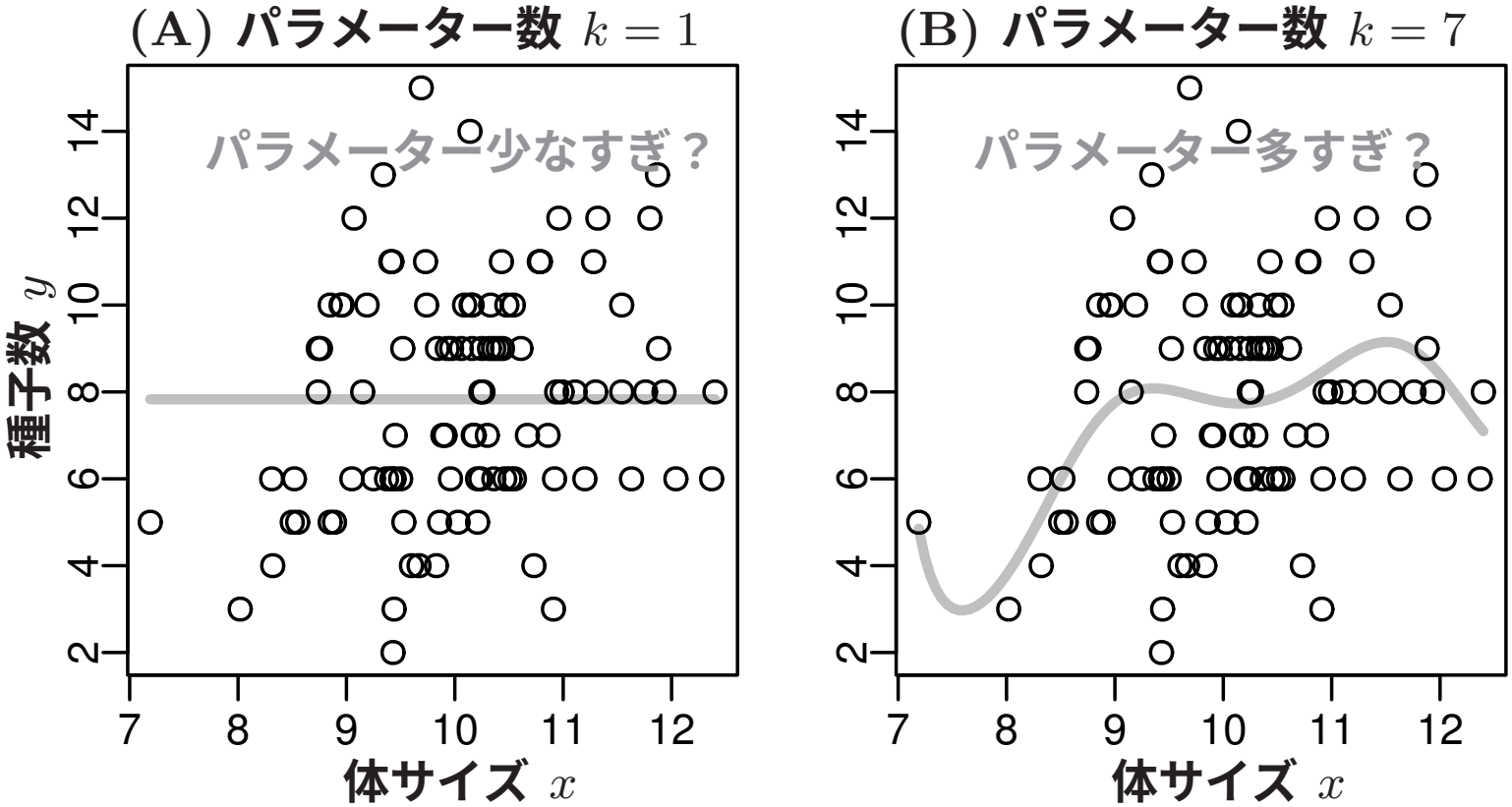
今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

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

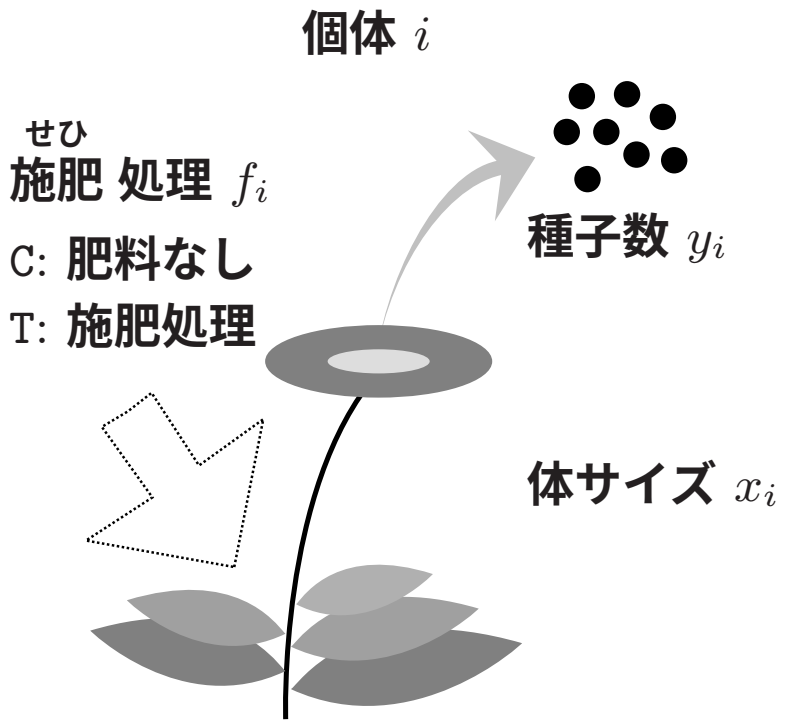
植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

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 seed number
  応答変数 : **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

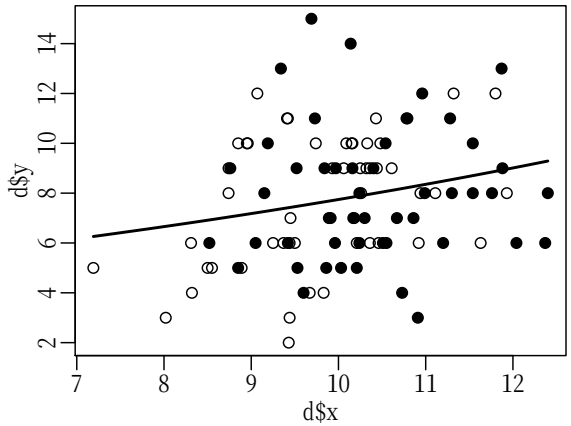
- 確率分布 : ポアソン分布

linear predictor

- 線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + \beta_3 f_i$

link function　log link function

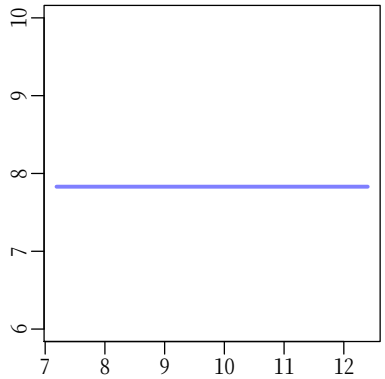
- リンク関数: 対数リンク関数



4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (A) constant λ

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



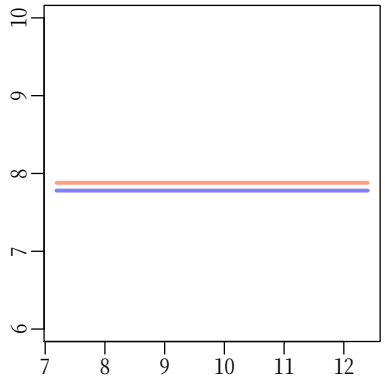
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> 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

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



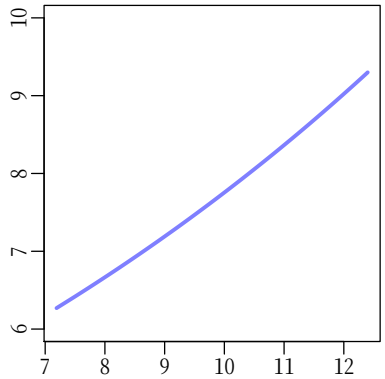
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> 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

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



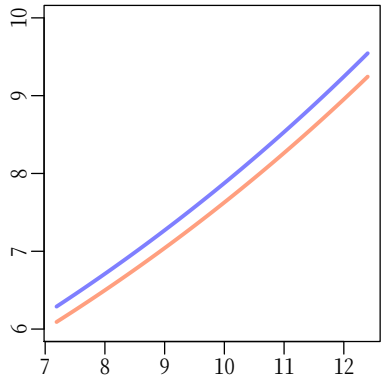
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> 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

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



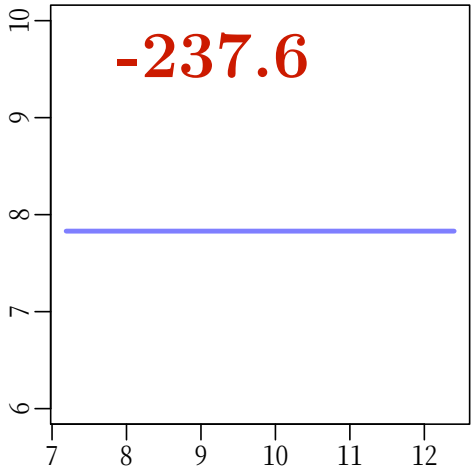
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

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

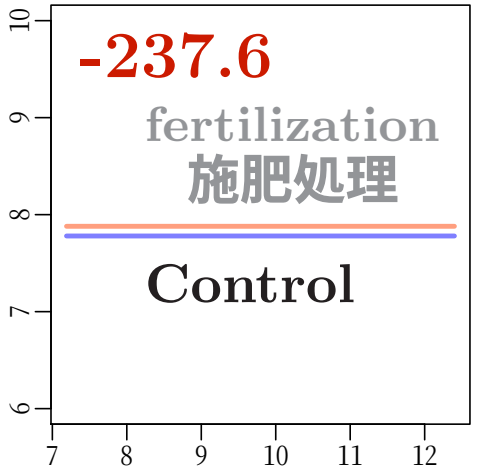
k increases $\rightarrow$ $\log L^*$ increases

パラメーター数が多いとあてはまりが良い

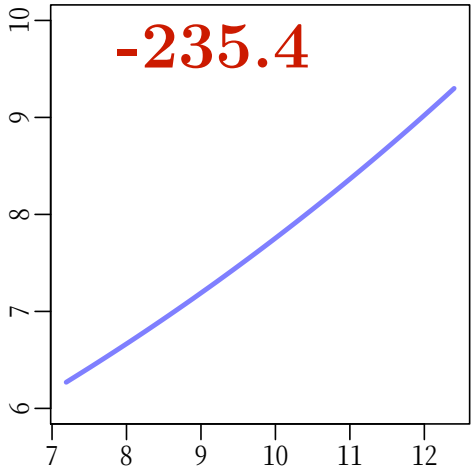
(A) constant λ ($k = 1$)



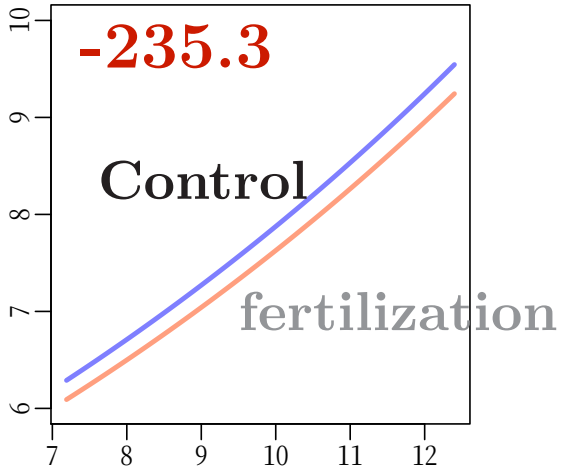
(B) f model ($k = 2$)



(C) x model ($k = 2$)



(D) x + f model ($k = 3$)



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
```

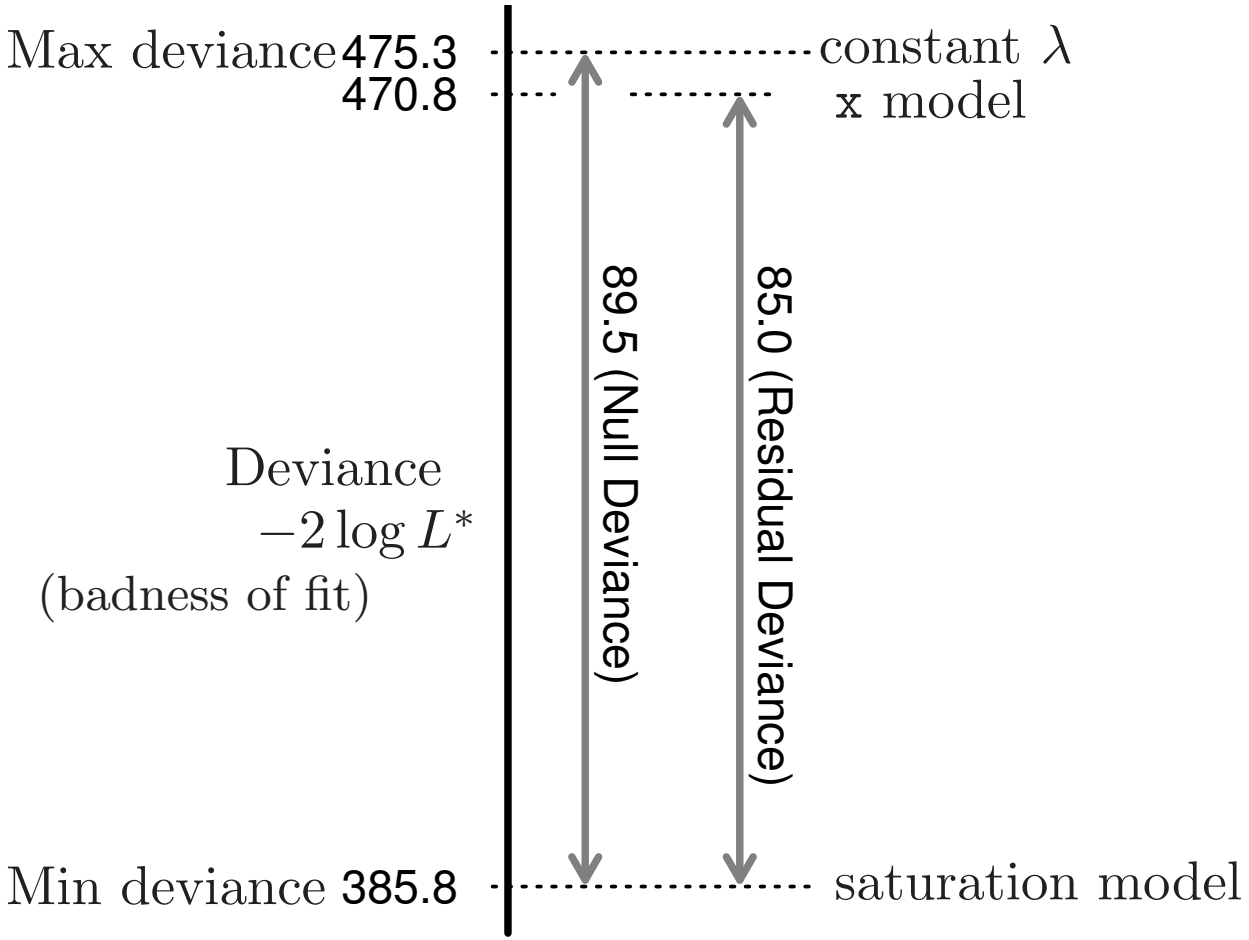
Residual Deviance? Null Deviance? AIC?

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 : $\mathrm{AIC} = -2\log L^* + 2k$

Look for a model of the smallest AIC

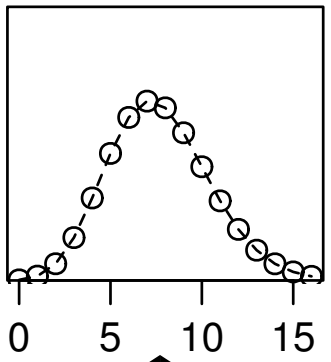
AIC 最小のモデルを選ぶ

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

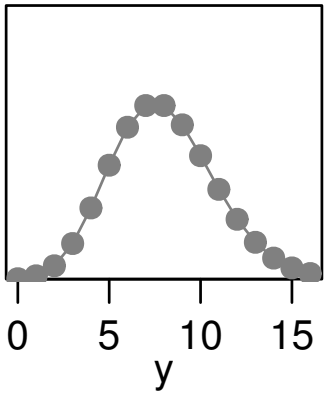
統計モデルによる推測って何だっけ?

観測データから
推定された constant λ
$\hat{\beta}_1 = 2.04$ のポアソン分布



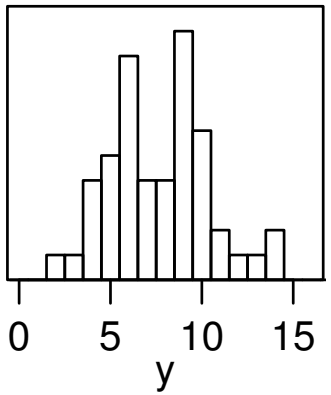
パラメーター推定

(人間には見えない)
真の統計モデル
$\beta_1 = 2.08$ のポアソン分布

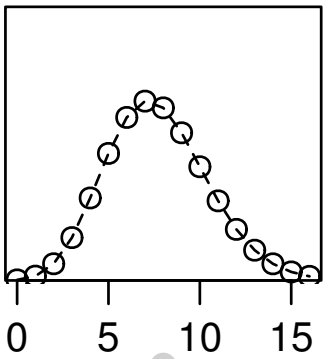


データをサンプル

推定用の観測データ



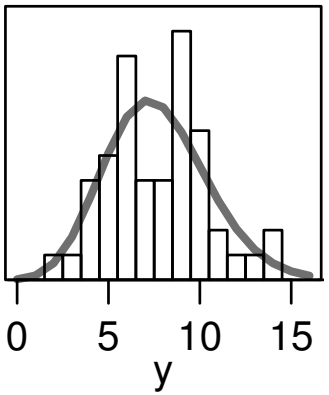
推定に使ったデータであてはまりを評価している?



観測データから
推定された constant λ
$\hat{\beta}_1 = 2.04$ のポアソン分布

推定用の観測データを使って
あてはまりの良さを評価

すると最大対数尤度
$\log L^*$ が得られる

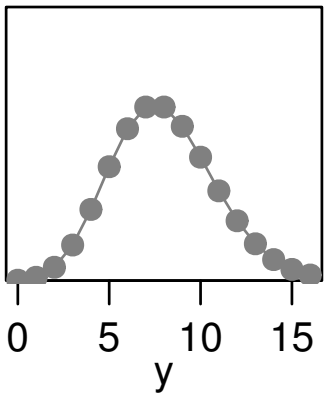


推定用の観測データ

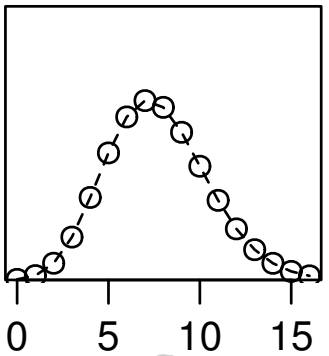
パラメーター推定に使った
データなのであてはまりの
良さにバイアスが生じる
(過大評価)

重要なこと: 新データがあてはまるかどうか

（人間には見えない）
真の統計モデル
$\beta_1 = 2.08$ のポアソン分布

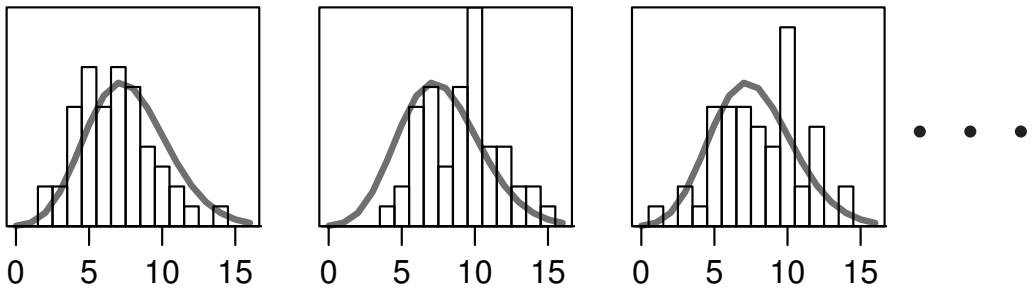


データ
をサンプル
(実際のデータ解析では不可能)



観測データから
推定された constant λ
$\hat{\beta}_1 = 2.04$ のポアソン分布

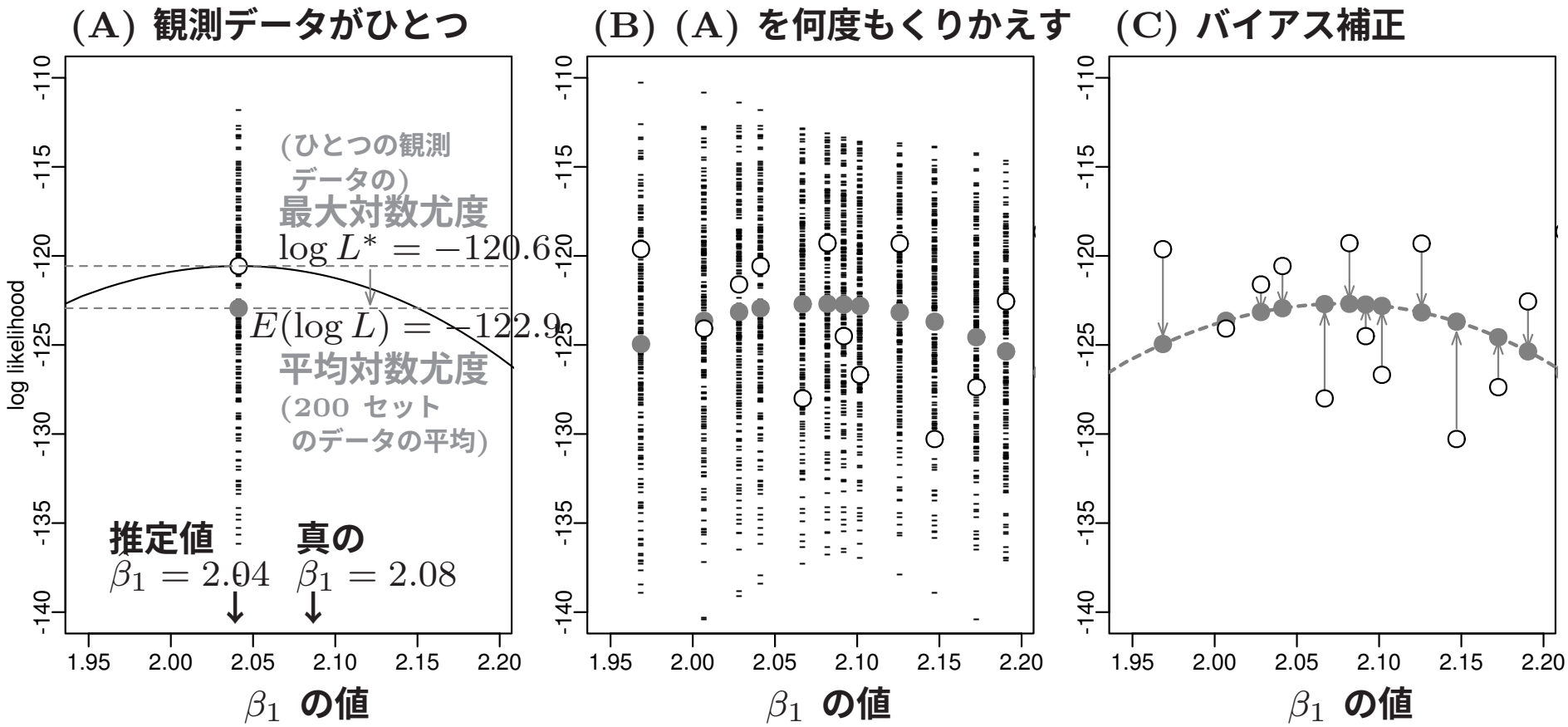
評価用のデータに
あてはめてみる
すると平均対数尤度
$E(\log L)$ が得られる



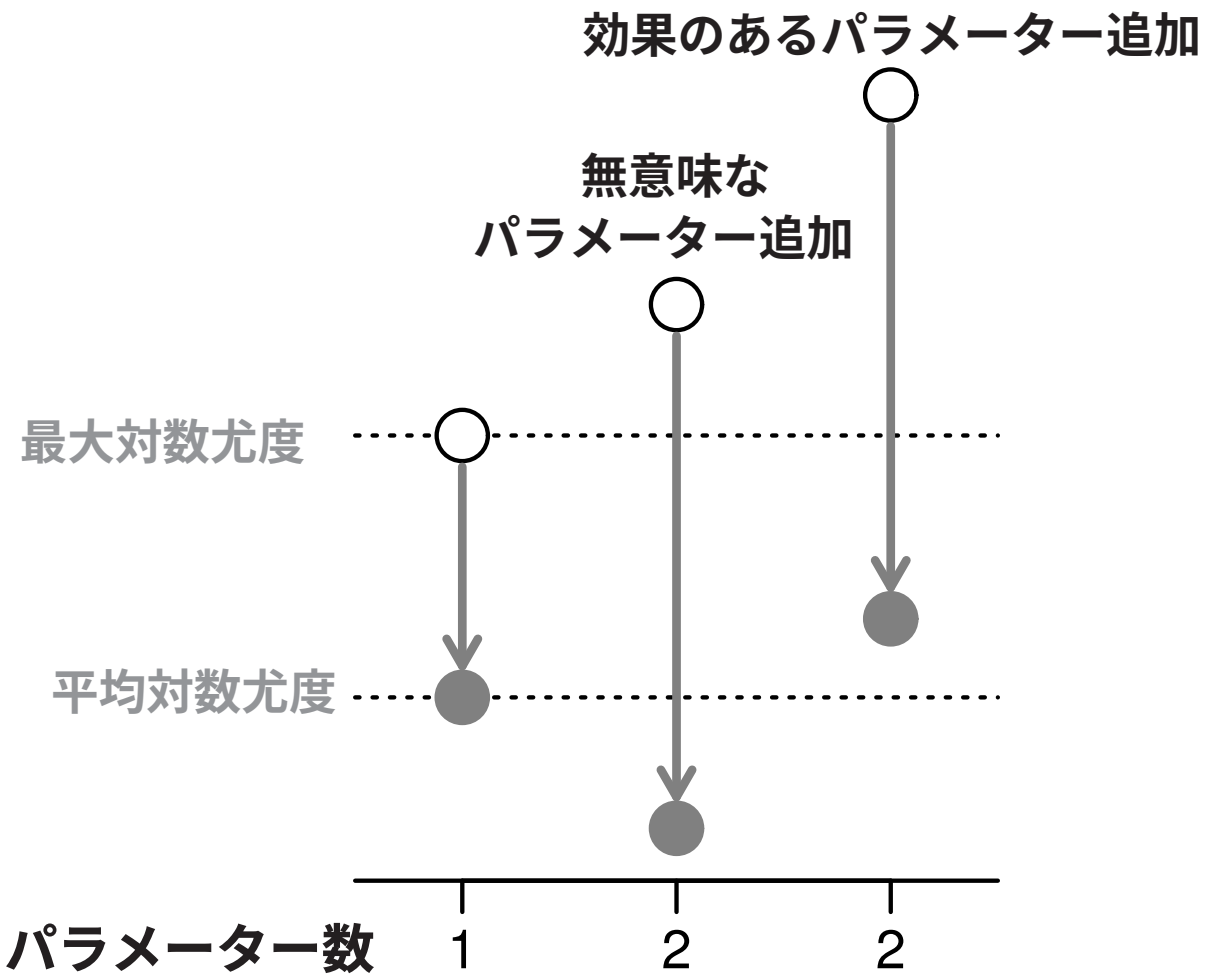
・・・

予測の良さ評価用のデータ (200 セット)

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

統計学的検定:

rejection of null hypothesis

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

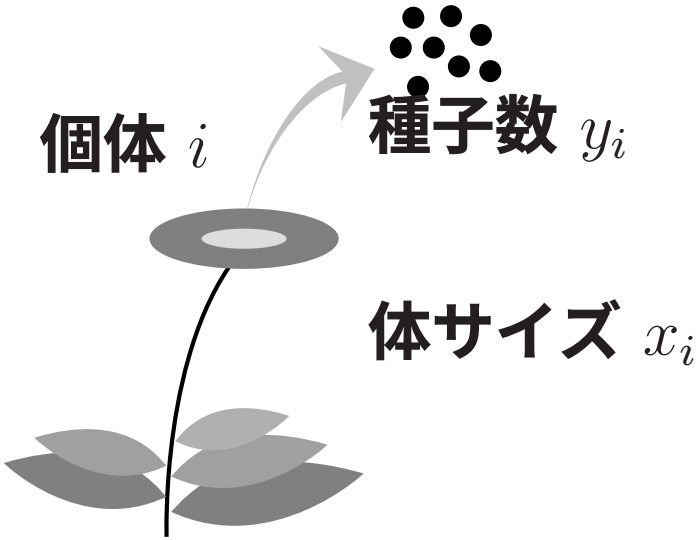
⇓ ⇓

帰無仮説棄却の危険率を評価 モデル選択規準 AIC の評価

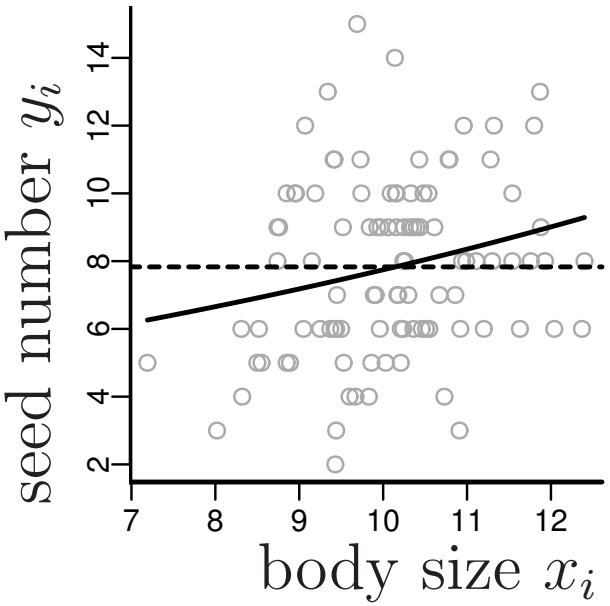
⇓ ⇓

帰無仮説棄却の可否を判断 予測の良いモデルを選ぶ

The same example, again
また同じ例題



D: deviance



x model
$D_2 = 470.8$
constant λ
$D_1 = 475.3$
帰無仮説

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

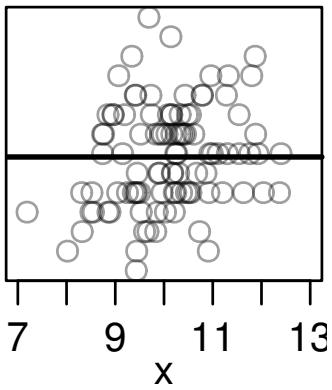
検定の非対称性: **第一種の過誤だけに注目**

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!

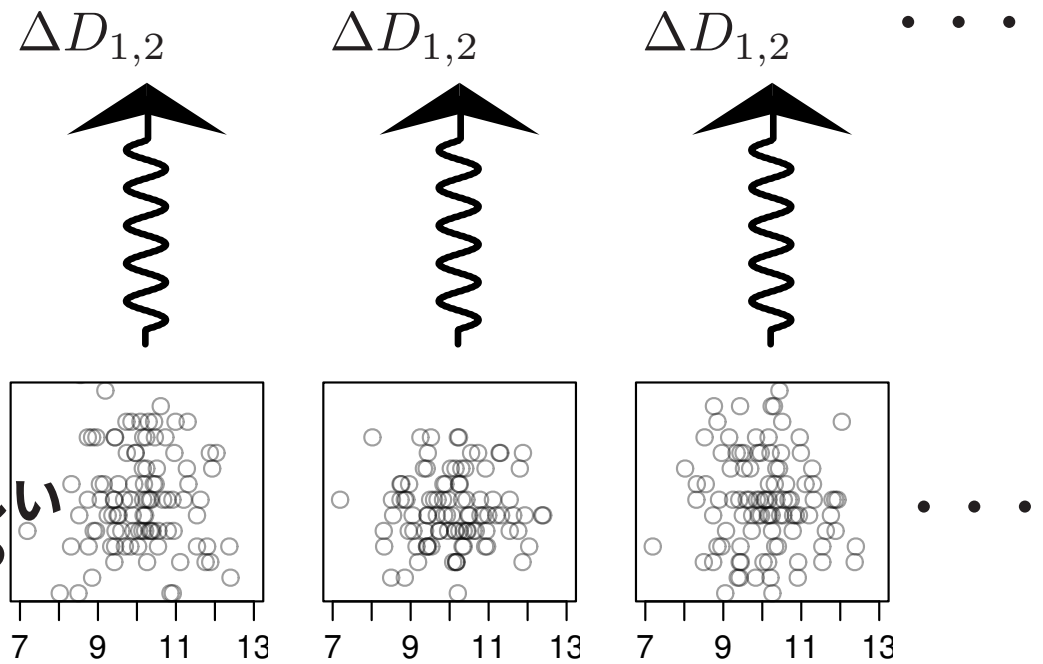
帰無仮説 が真のモデルであるとしよう!

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)



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

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



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
```

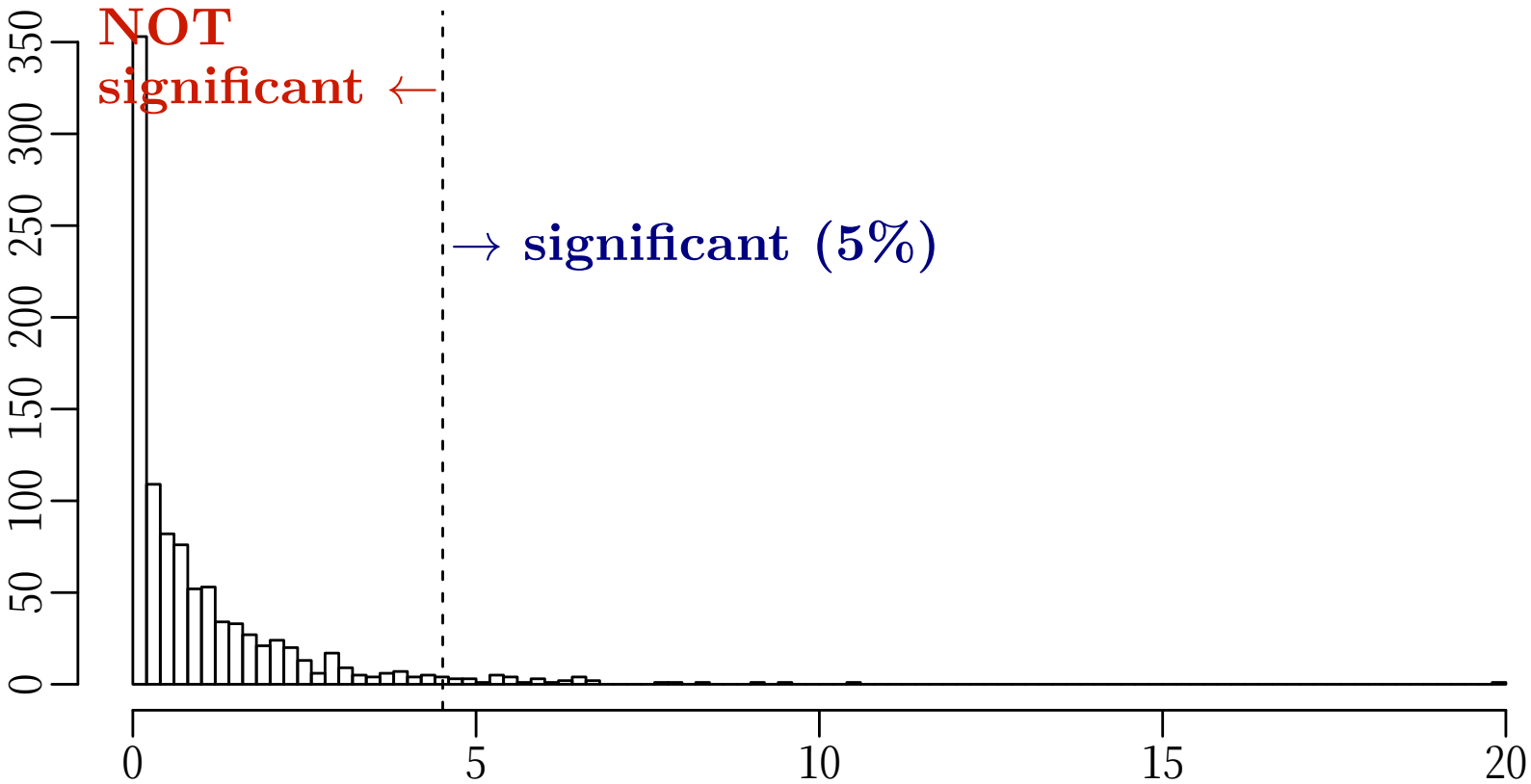
- rpois() による (generation of random numbers) ポアソン乱数の生成 (virtual data) (架空データ)
- 架空データを使って (fitting GLM to the virtual data) glm() あてはめ

You must define “rejection region” in advance

あらかじめ棄却域を決めておく

say, 5%?

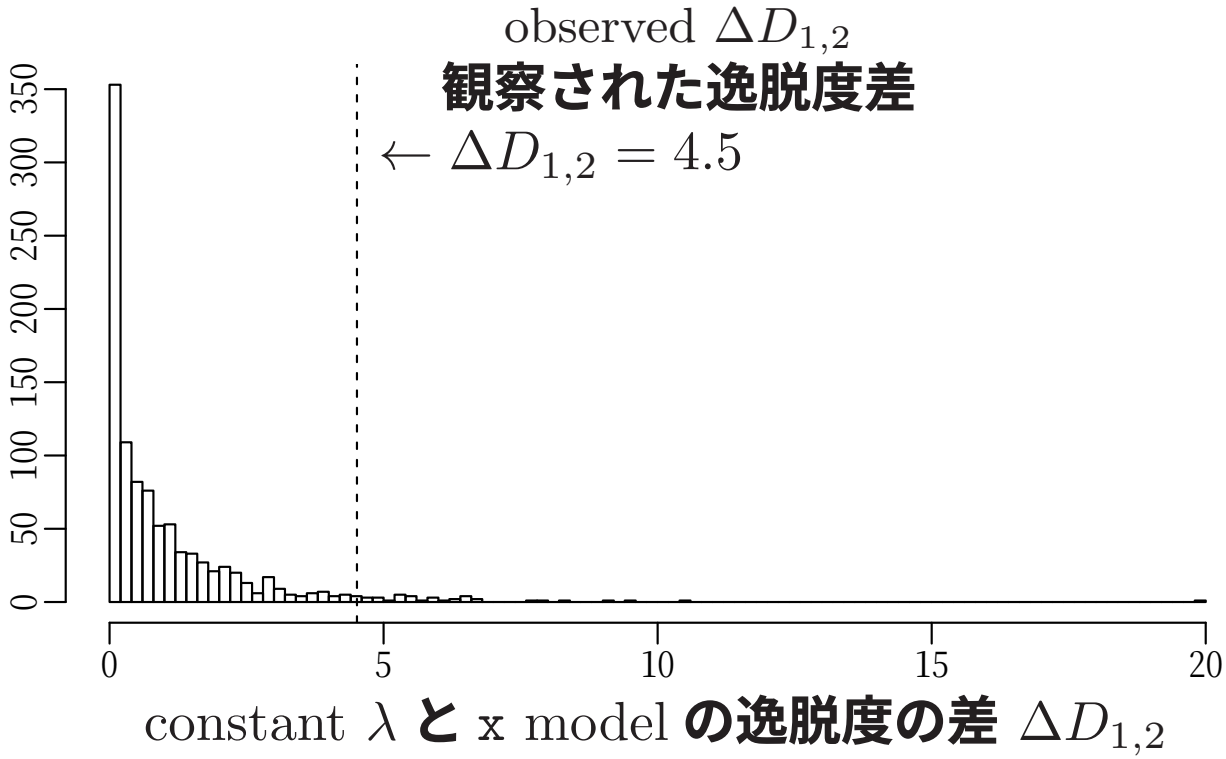
たとえば 5% とか?



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



(R code is in the next page)

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

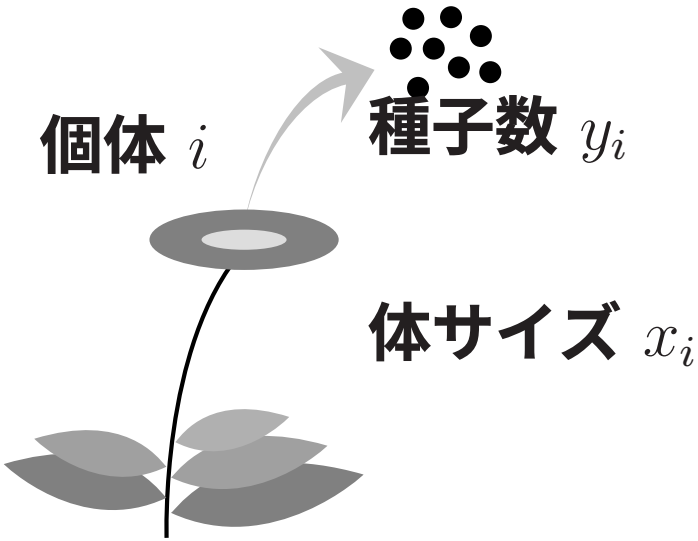
```
> source("pb.R") # reading "pb.R" text file
> dd12 <- pb(d, n.bootstrap = 1000)
> hist(dd12, 100) # to plot histogram
> abline(v = 4.5, lty = 2)
> sum(dd12 >= 4.5)
[1] 38
```

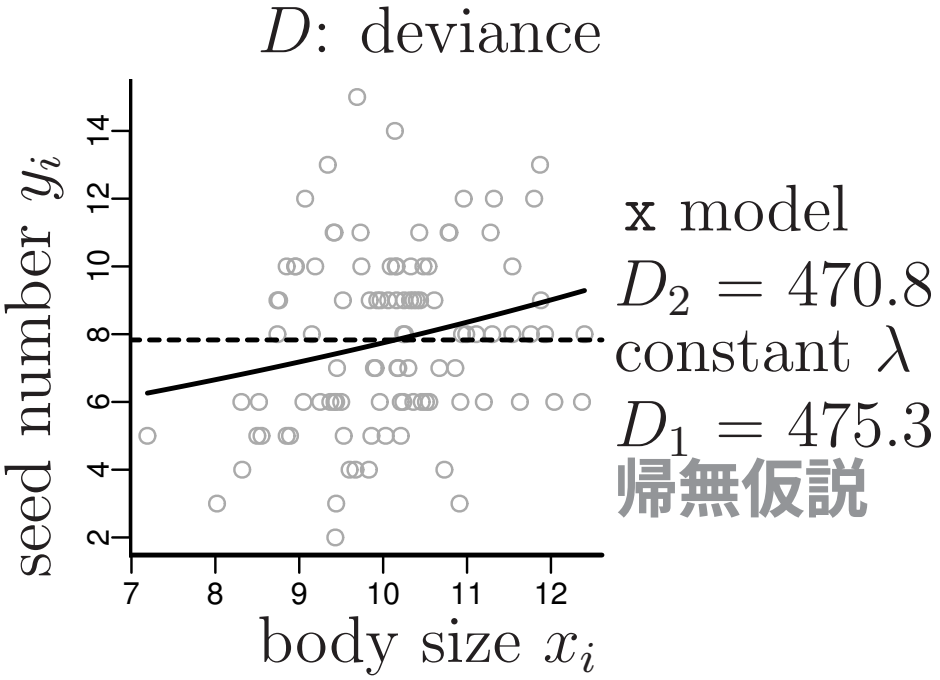
so-called "P-value" is 0.038.

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**

4. モデル選択 と 統計学的な検定

のさまざまな 誤解

とりあえず FAQ モデル選択

http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/ce/FaqModelSelection.html