統計モデリング入門 道総研 [06]

“割算” 回避のための統計モデル

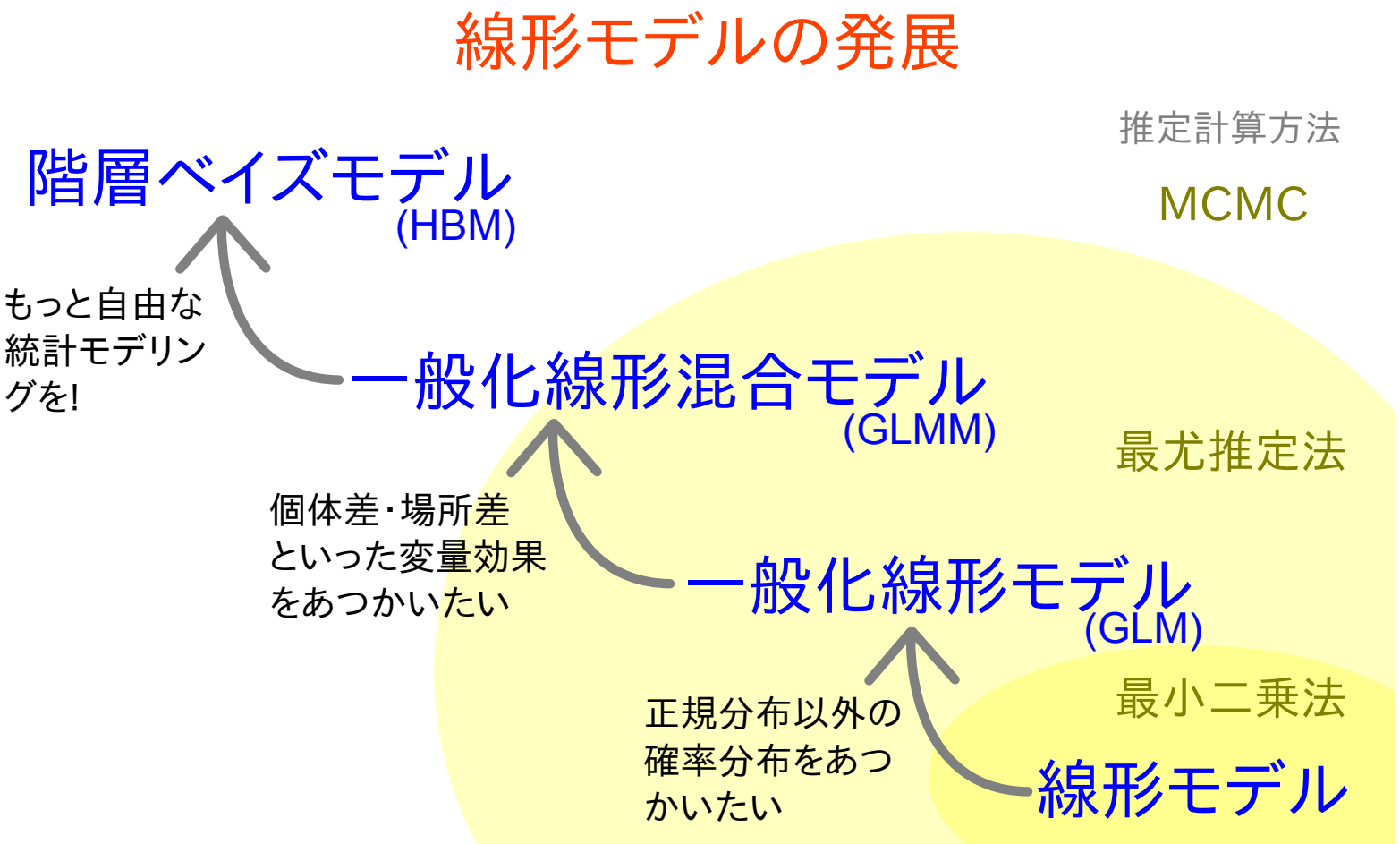
久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp, @KuboBook

道総研勉強会 http://goo.gl/HQbeoh

2015–11–16

ファイル更新時刻: 2015–11–12 22:11

この授業であつかう統計モデルたち



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だろう?

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)
- ……

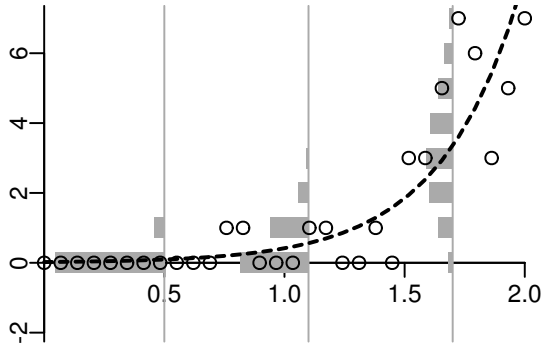
一般化線形モデルを作る

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?

ポアソン回帰のモデル

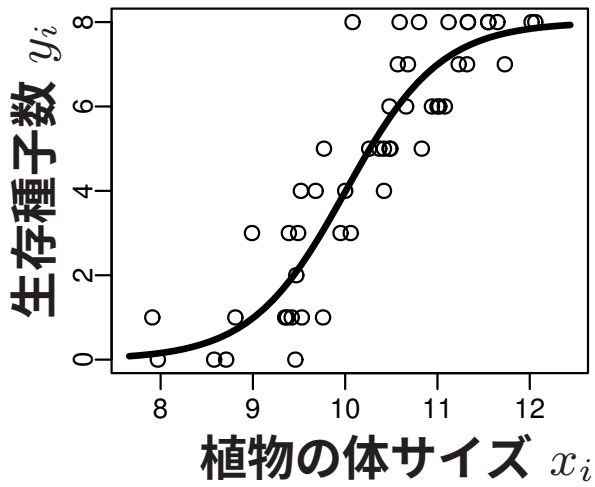
- **確率分布**: **ポアソン分布**
- **線形予測子**: $\mathrm{e.g.,}\ \beta_1 + \beta_2 x_i$
- **リンク関数**: **対数リンク関数**



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**: $\mathrm{e.g.,}\ \beta_1 + \beta_2 x_i$
- **リンク関数**: logit **リンク関数**



この時間に説明したいこと

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. “N 個のうち k 個が生きてる” タイプのデータ
   - $y_i \in \{0, 1, 2, \cdots, 8\}$
3. ロジスティック回帰の部品
   - 二項分布 binomial distribution と logit link function
4. 何でも　割算」するな!
   - 脱」割算の offset 項わざ

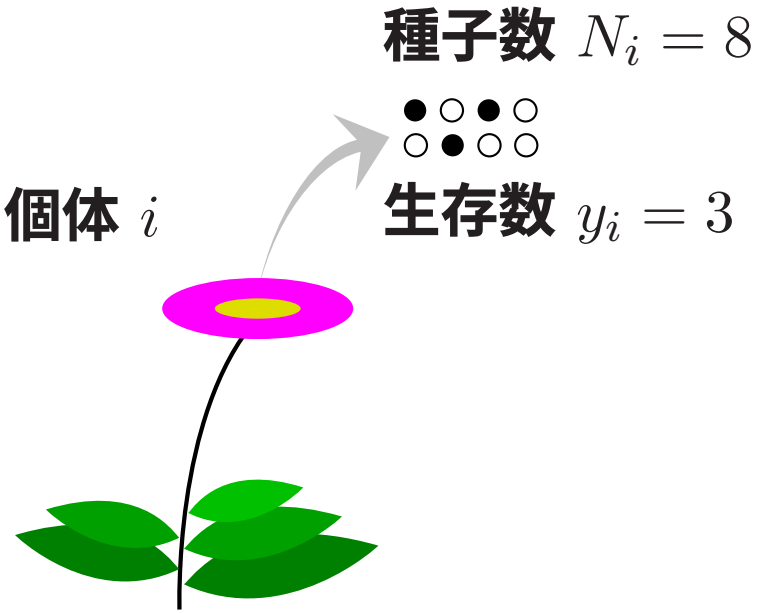
1. “N 個のうち k 個が生きてる”タイプのデータ

上限のあるカウントデータ

ポアソン分布ではなく二項分布で

例題: 植物の種子の生存確率

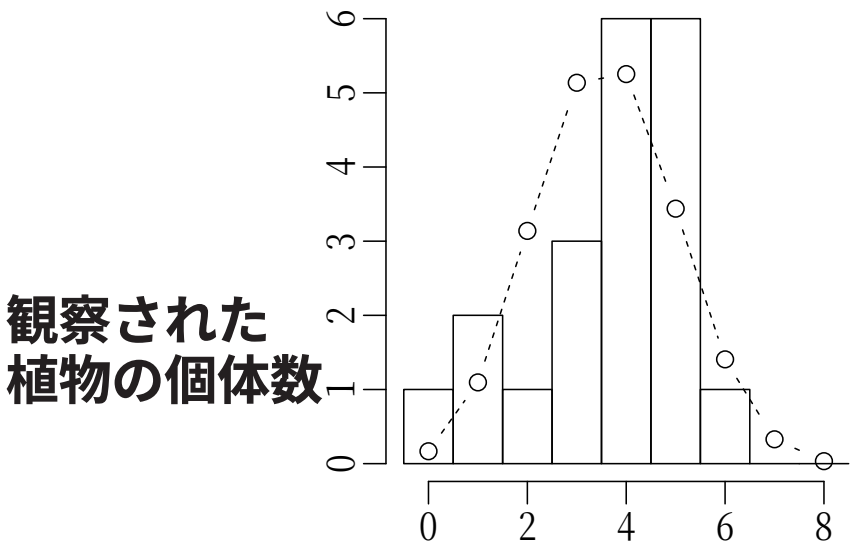
- 架空植物の種子の生存を調べた
- **種子**: 生きていれば発芽する
  - どの個体でも 8 個 の種子を調べた
- **生存確率**: ある種子が生きている確率



- データ: 植物 20 個体，合計 160 種子の生存の有無を調べた
- 73 種子が生きていた — このデータを統計モデル化したい

たとえばこんなデータが得られたとしましょう

個体ごとの生存数	0	1	2	3	4	5	6	7	8
観察された個体数	1	2	1	3	6	6	1	0	0



これは個体差なしの均質な集団

生存確率 q と二項分布の関係

- 生存確率を推定するために**二項分布** という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率

$$p(y_i \mid q) = \binom{N_i}{y_i} q^{y_i} (1-q)^{N_i - y_i},$$

- ここで仮定していること
  - **個体差はない**
  - つまり **すべての個体で同じ生存確率** q

尤度（ゆうど）: 20 個体ぶんのデータが観察される確率

- 観察データ $\{y_i\}$ が確定しているときに
- パラメータ q は値が自由にとりうると考える
- 尤度 は 20 個体ぶんのデータが得られる確率の積，パラメータ q の関数として定義される

$$L(q|\{y_i\}) = \prod_{i=1}^{20} p(y_i \mid q)$$

個体ごとの生存数	0	1	2	3	4	5	6	7	8
観察された個体数	1	2	1	3	6	6	1	0	0

対数尤度方程式と最尤推定

- この尤度 $L(q \mid \text{データ})$ を最大化するパラメータの推定量 $\hat{q}$ を計算したい
- 尤度を対数尤度になおすと

$$\log L(q \mid \text{データ}) = \sum_{i=1}^{20} \log \binom{N_i}{y_i} + \sum_{i=1}^{20} \{y_i \log(q) + (N_i - y_i) \log(1-q)\}$$

- この対数尤度を最大化するように未知パラメーター q の値を決めてやるのが**最尤推定**

最尤推定（MLE）とは何か

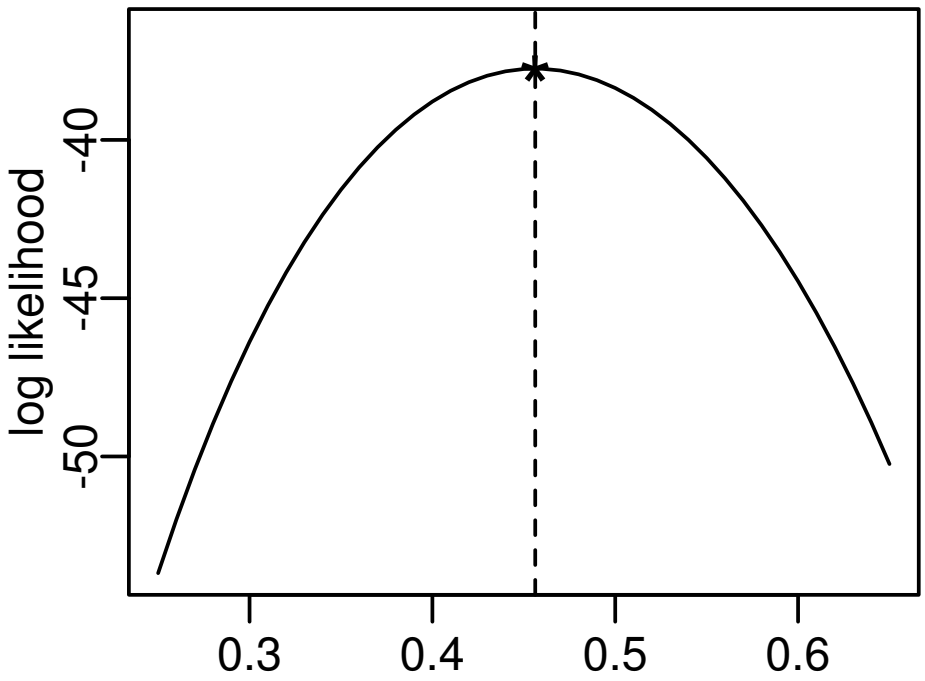
- **対数尤度 $L(q \mid$ データ$)$ が最大になるパラメーター q の値をさがしだすこと**

- **対数尤度 $\log L(q \mid$ データ$)$ を q で偏微分して 0 となる $\hat{q}$ が対数尤度最大**

$$\partial \log L(q \mid \text{データ}) / \partial q = 0$$

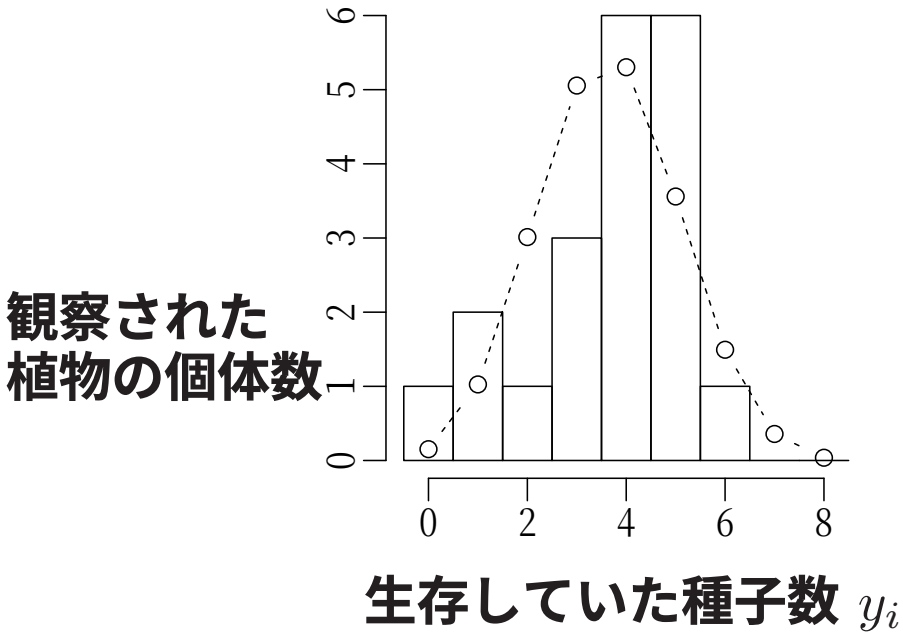
- **生存確率 q が全個体共通の場合の最尤推定量・最尤推定値は**

$$\hat{q} = \frac{\text{生存種子数}}{\text{調査種子数}} = \frac{73}{160} = 0.456 \text{ ぐらい}$$



二項分布で説明できる 8 種子中 y_i 個の生存

$\hat{q} = 0.46$ **なので** $\binom{8}{y} 0.46^y \ 0.54^{8-y}$



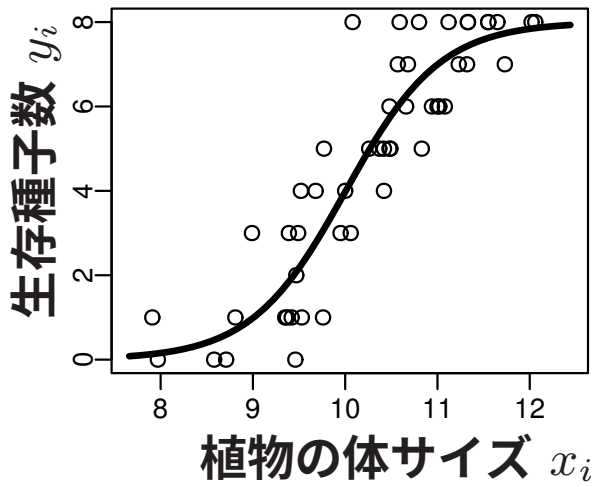
2. “N 個のうち k 個が生きてる” タイプのデータ

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

GLM のひとつである logistic 回帰モデルを指定する

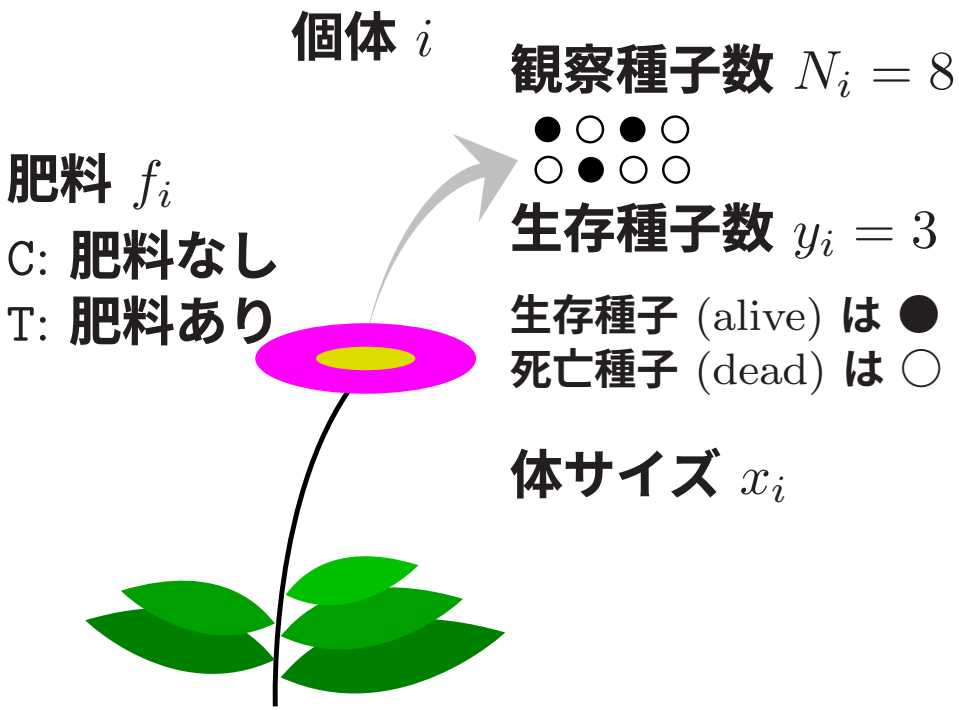
ロジスティック回帰のモデル

- **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**



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/2014/Fig/binomial/data4a.csv")
```

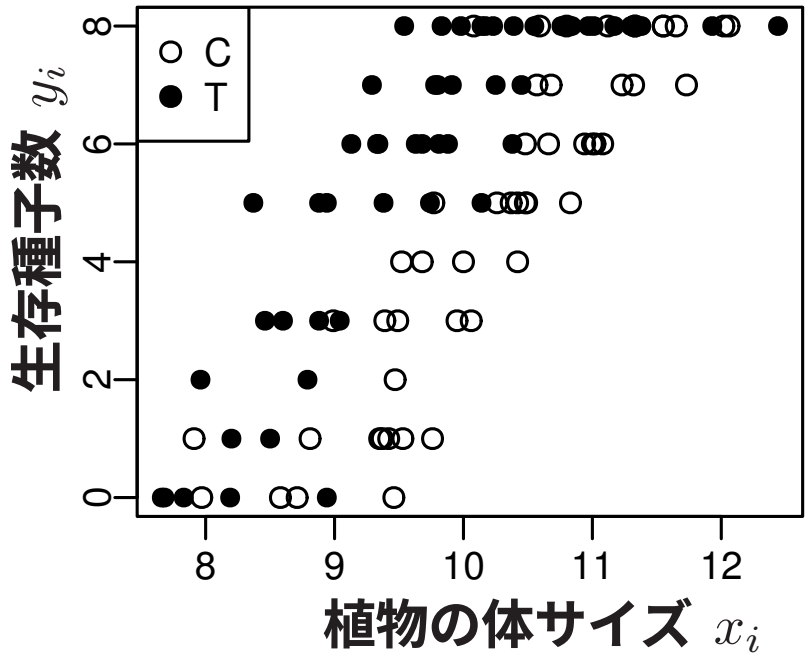
データは d と名付けられた data frame (表みたいなもの) に格納される

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?

3. ロジスティック回帰の部品

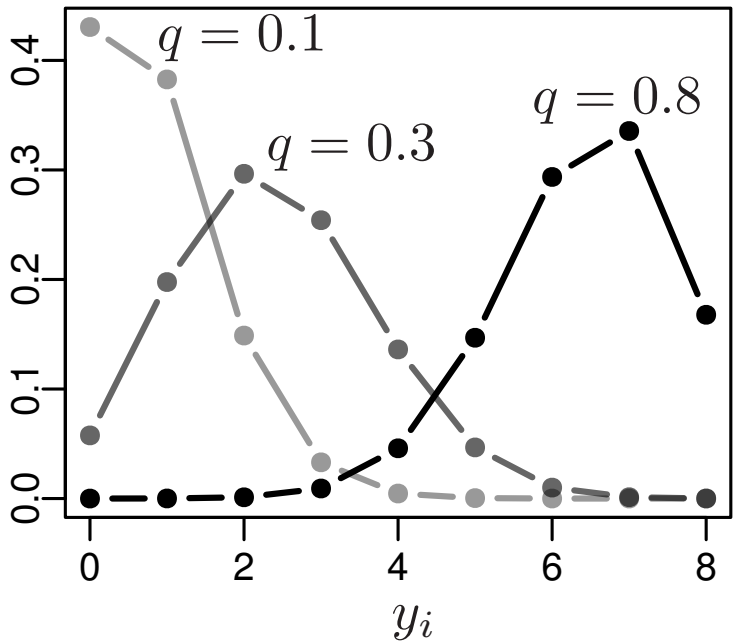
二項分布 binomial distribution と logit link function

二項分布: N 回のうち y 回，となる確率

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

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

確率 $p(y_i \mid 8, q)$

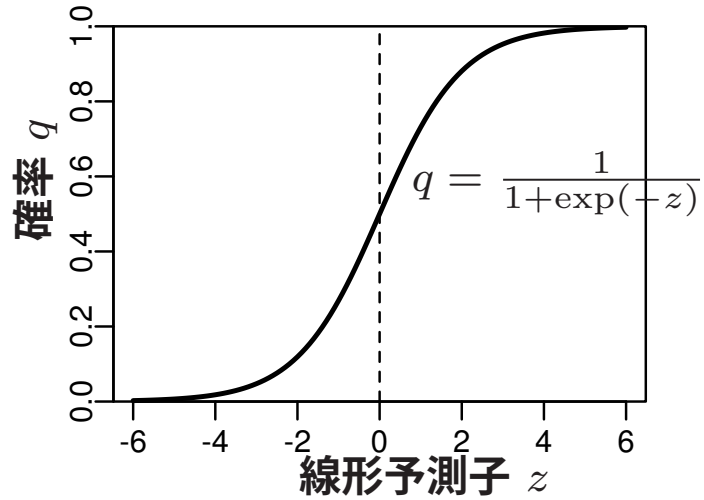


ロジスティック曲線とはこういうもの

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

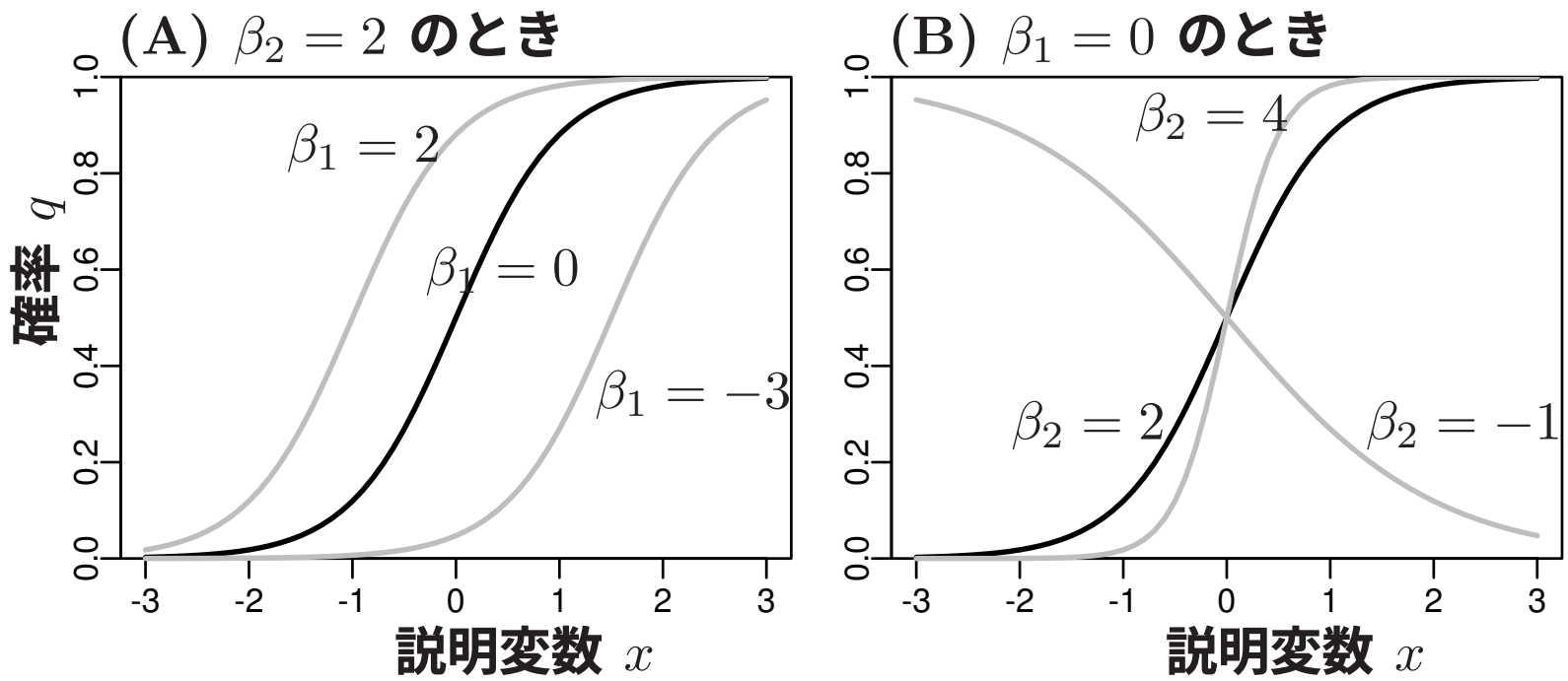
$$q_i = \mathrm{logistic}(z_i) = \frac{1}{1 + \exp(-z_i)}$$

```
> 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**

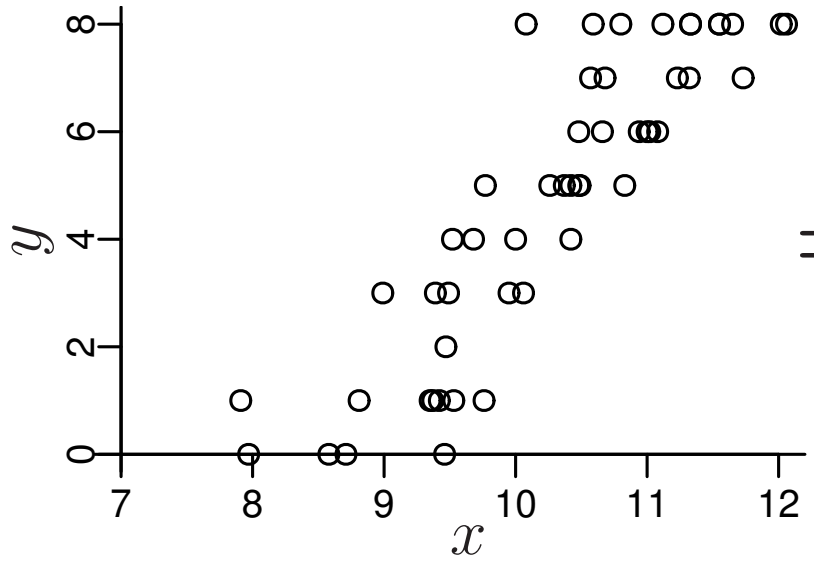
$$\text{logit}(q) = \log \frac{q}{1-q} = \beta_1 + \beta_2 x$$

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

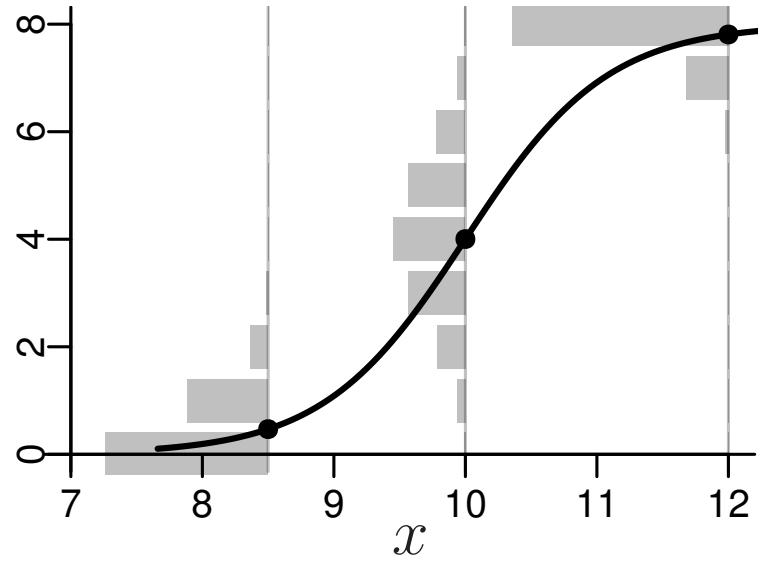
logit is the inverse function of logistic function, vice versa

R でロジスティック回帰 — β_1 と β_2 の最尤推定

(A) 例題データの一部（f_i =C）

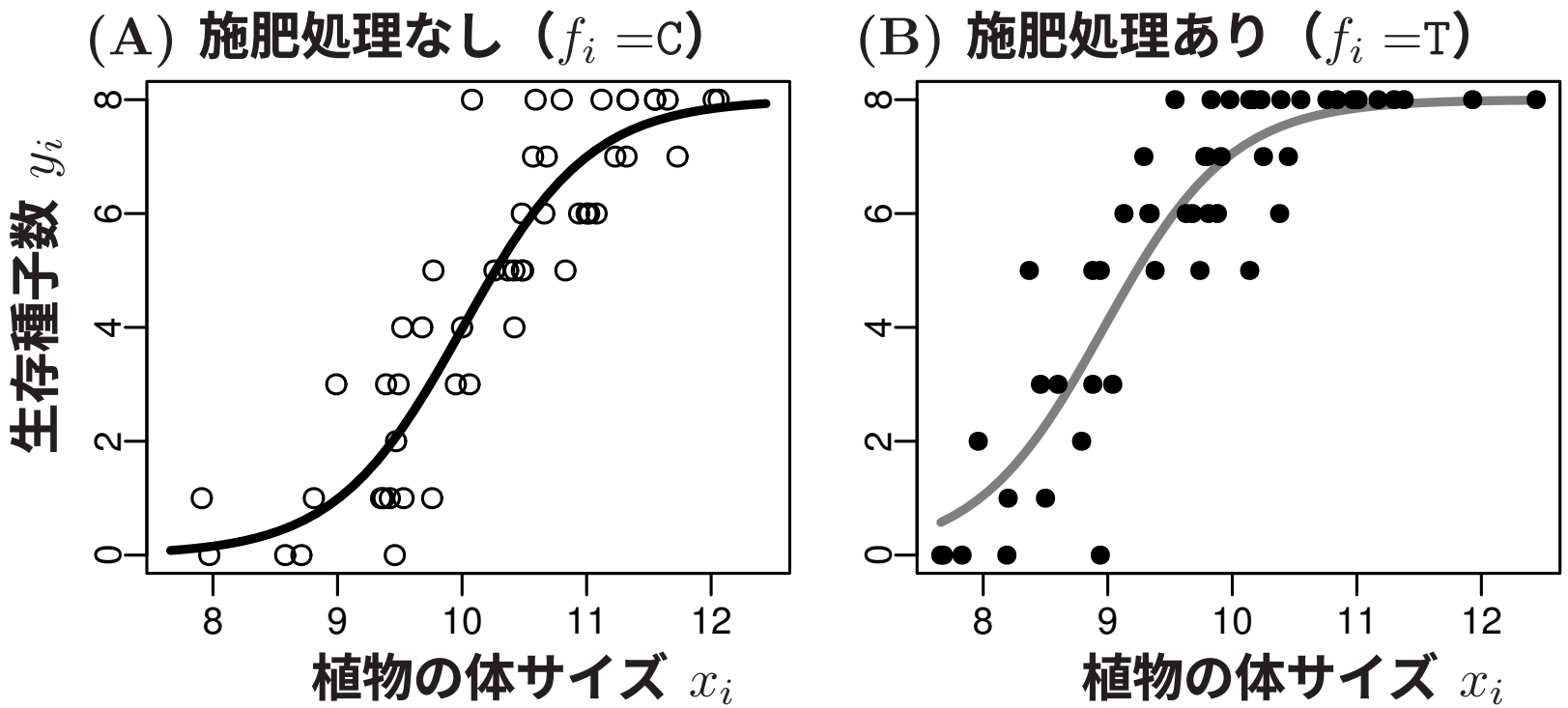


(B) 推定されるモデル




```
> 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



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**

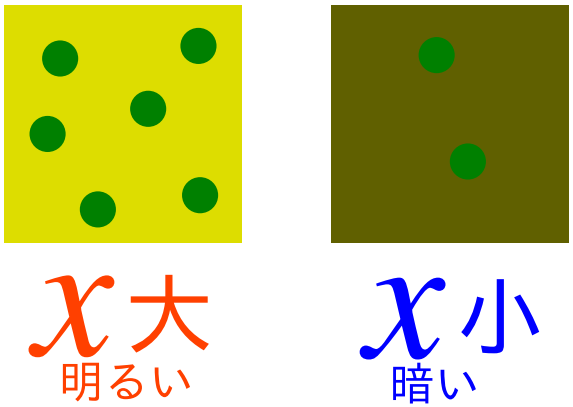
    対策: **offset 項わざ — このあと解説!**

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

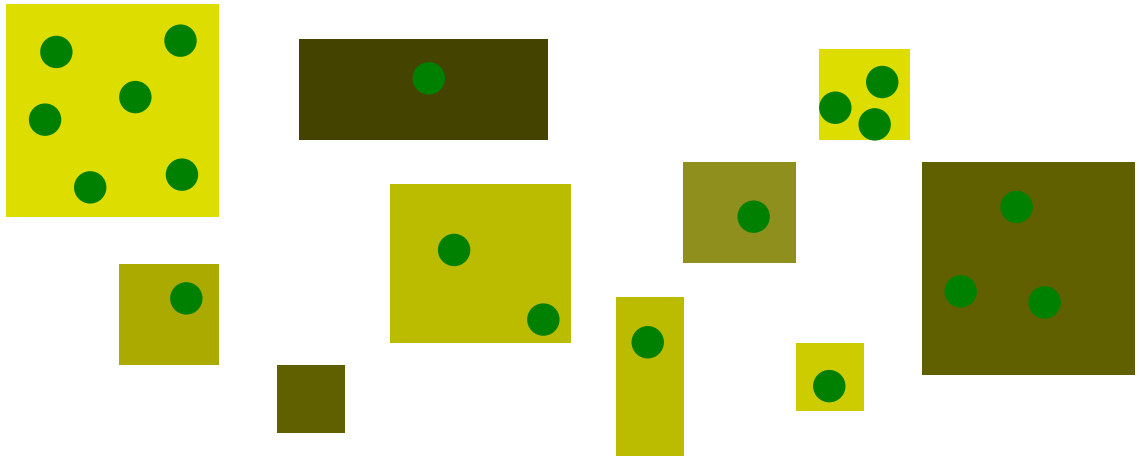
offset 項の例題: 調査区画内の個体密度

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



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?!



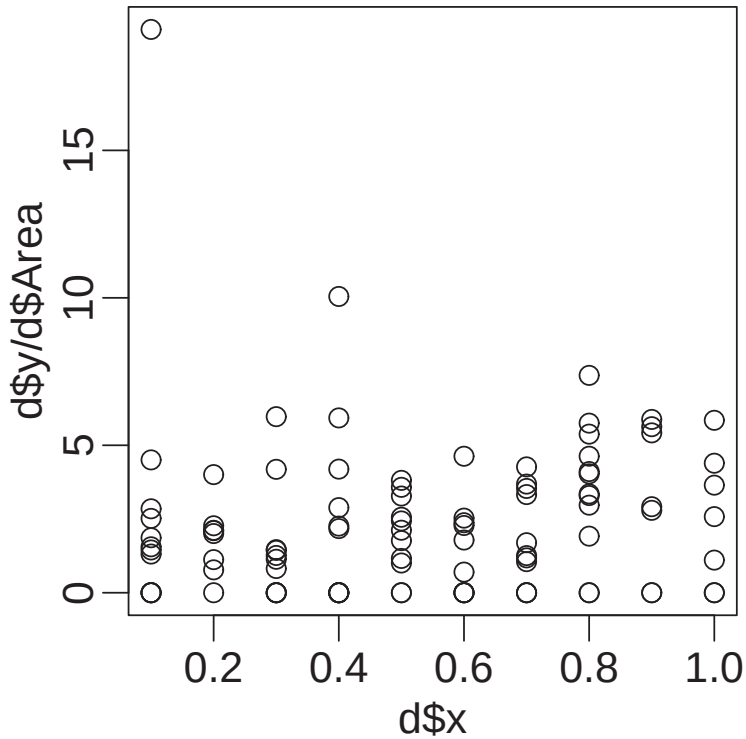
- 明るさ x と面積 A を同時に考慮する必要あり
- ただし**密度 $=$ 個体数 / 面積**といった割算値解析はやらない!
- `glm()` の `offset` 項わざでうまく対処できる
- ともあれその前に観測データを図にしてみる

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

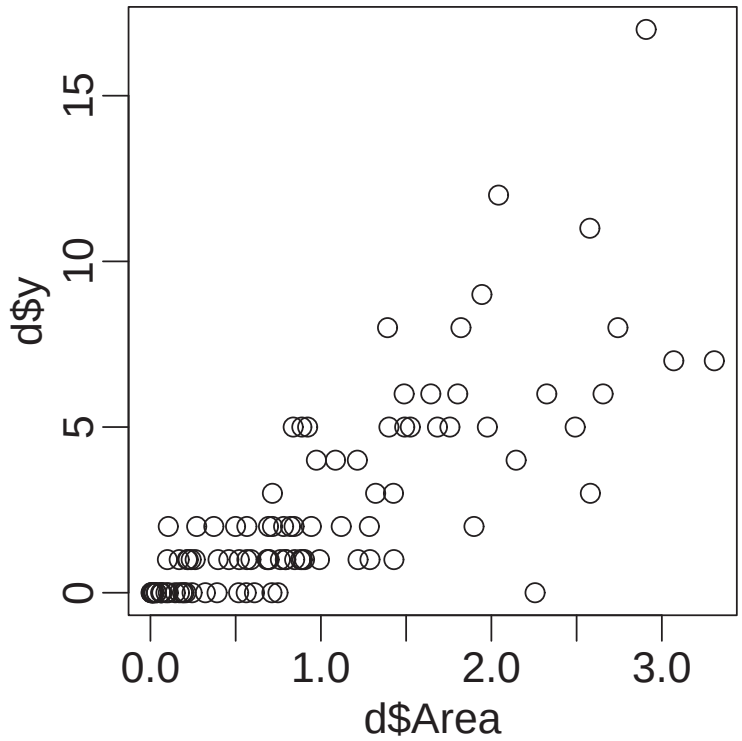
```
> plot(d$x, d$y / d$Area)
```



いまいちよくわからない ……

面積 A vs 個体数 y の図

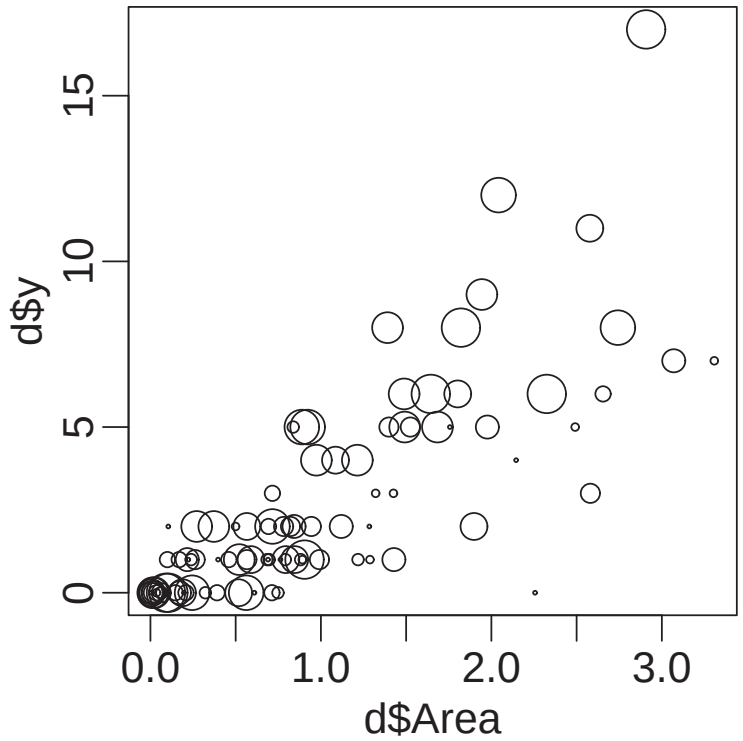
```
> plot(d$Area, d$y)
```



面積 A とともに区画内の個体数 y が増大するようだ

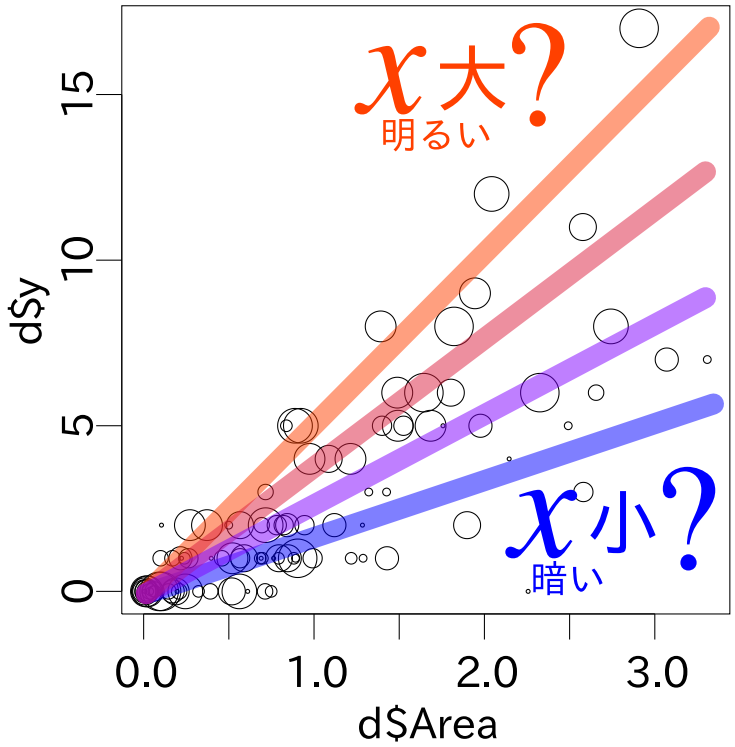
明るさ x の情報（マルの大きさ）も図に追加

```
> 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



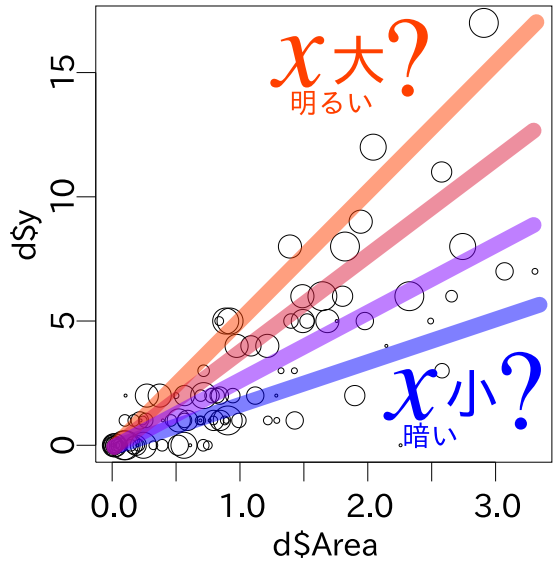
- 区画内の個体数 y の平均は面積 $\times$ 密度
- 密度は明るさ x で変化する

平均個体数 = 面積 × 密度モデル

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**



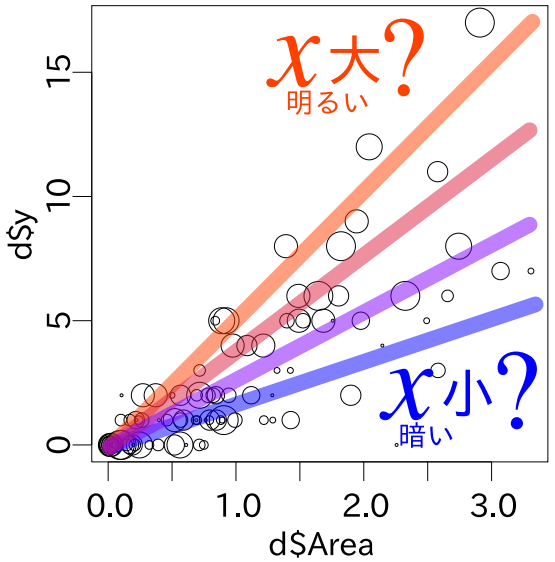
$$\lambda_i = A_i \exp(\beta_1 + \beta_2 x_i)$$

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 ~ x
- offset **項の指定** : log(Area)

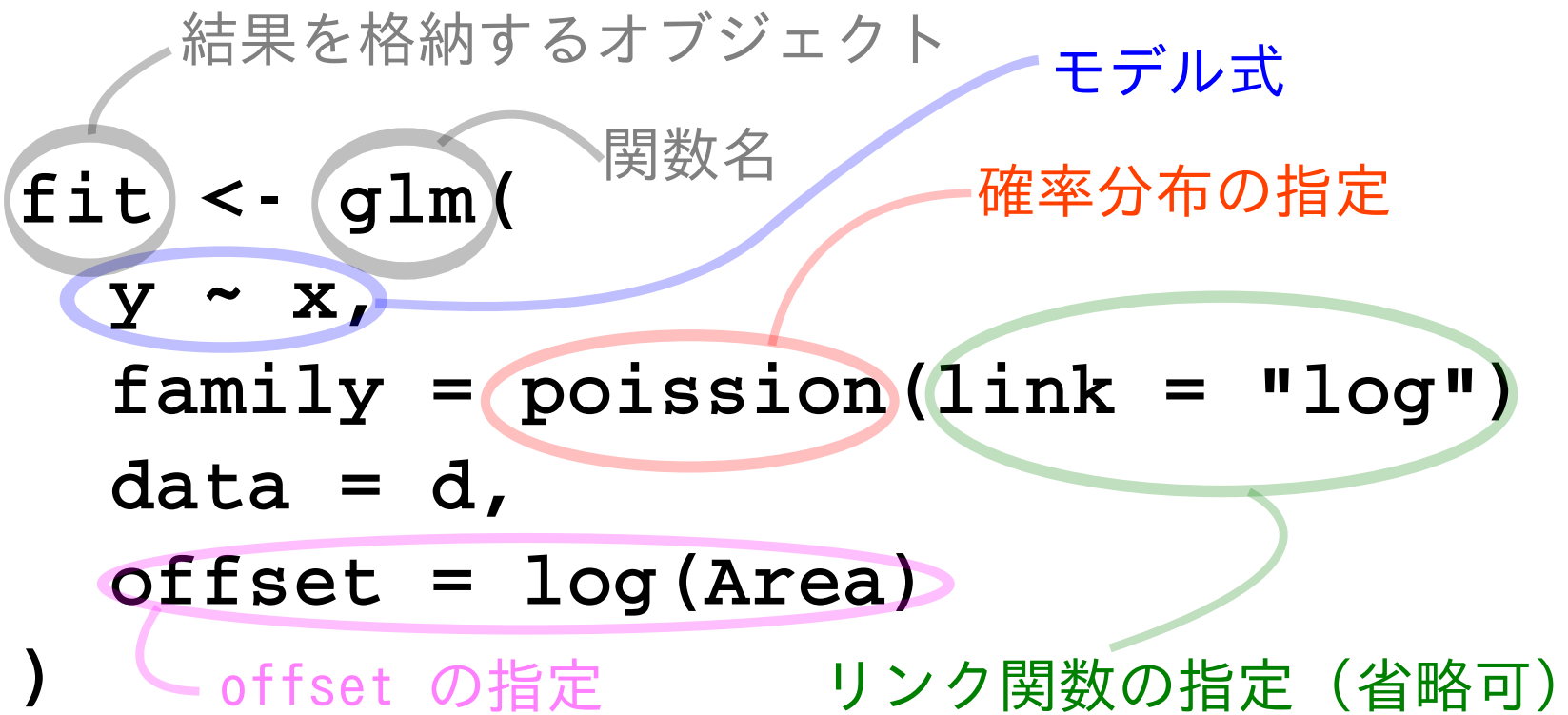


- **線形予測子** $z = \beta_1 + \beta_2\ \mathrm{x} +$ log(Area)

  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 $\lambda = \exp(z) = \exp(\beta_1 + \beta_2\ \mathrm{x} +$ 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

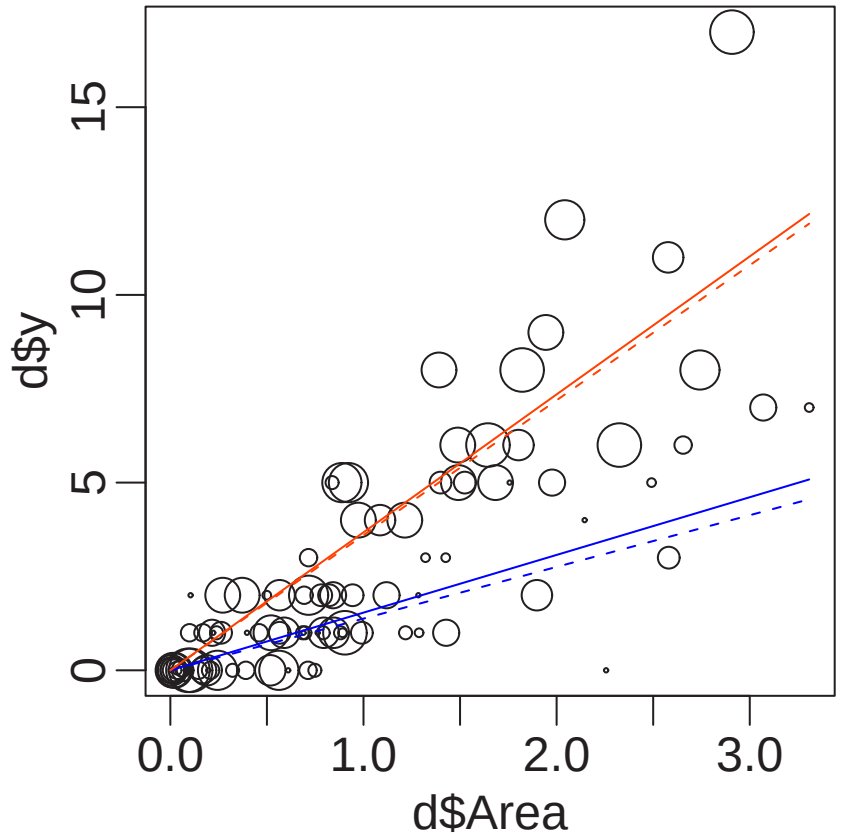
```
> fit <- glm(y ~ x, family = poisson(link = "log"), data = d,
  offset = log(Area))
> print(summary(fit))

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
```

推定結果にもとづく予測を図にしてみる



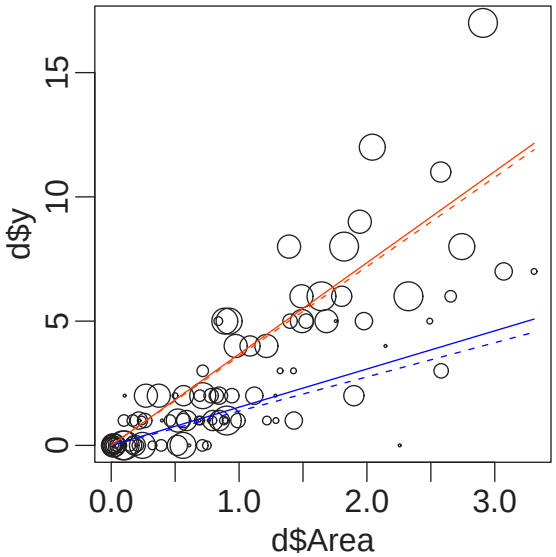
$x = 0.9$
light environment

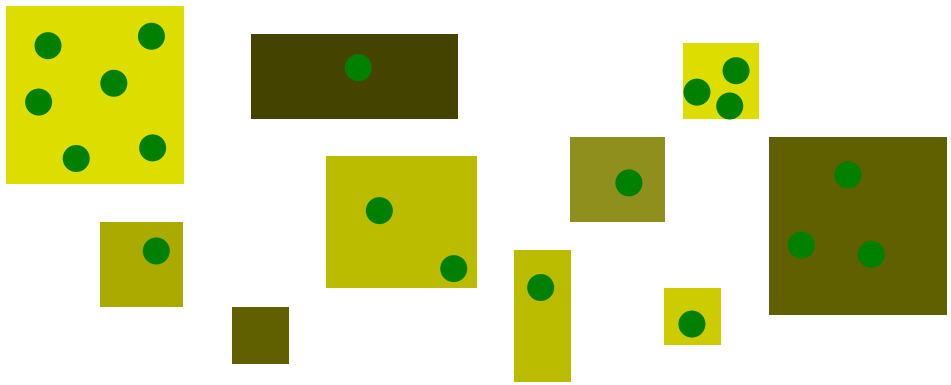
$x = 0.1$
dark environment

- 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(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 項わざ — 統計モデリングの工夫!**