統計モデリング入門 筑波大 (大塚) 集中講義 [02]

統計モデル・確率分布・最尤推定

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

筑波大集中講義 http://goo.gl/HvRhXn

2015–02–28

ファイル更新時刻: 2015–02–27 12:49

統計モデルの重要な部品：確率分布

- データ解析をするために**統計モデル**が必要
- 統計モデルの部品として**“データにあった” 確率分布**が必要
- 確率分布は**パラメーター**などを指定する必要がある
- **パラメーターの値**はデータに基づいて決めたい

この時間に説明したいこと

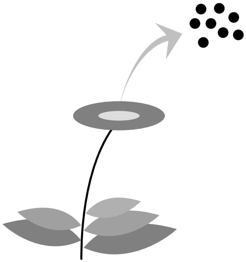
1. **例題: 種子数の統計モデリング**
   まあ，かなり単純な例から始めましょう
2. **確率分布って何?**
   経験分布と理論分布
3. **ポアソン分布のパラメーターの最尤推定（さいゆうすいてい）**
   もっとももっともらしい推定?
4. **統計モデルの要点**
   乱数発生・推定・予測

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

R でデータをあつかいつつ

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

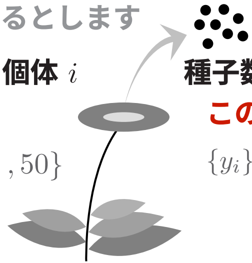
現実のデータはどれも授業で使うには難しすぎる……

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
```

統計ソフトウェア R

統計学の勉強には良い統計ソフトウェアが必要！

- 無料で入手できる
- 内容が完全に公開されている
- 多くの研究者が使っている
- 作図機能が強力

この教科書でも R を
使って問題を解決する
方法を説明しています

R でデータの様子をながめる

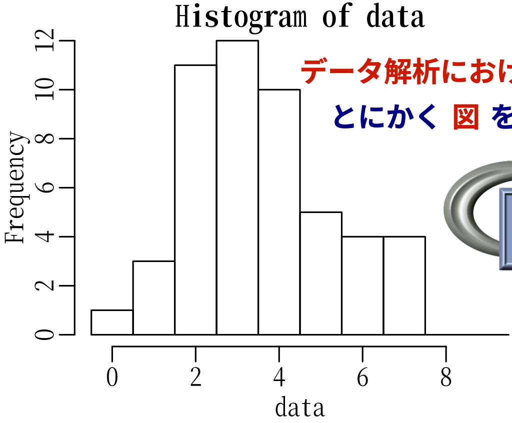
の `table()` **関数を使って種子数の頻度を調べる**

```
> 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** ⋯⋯)

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))
```

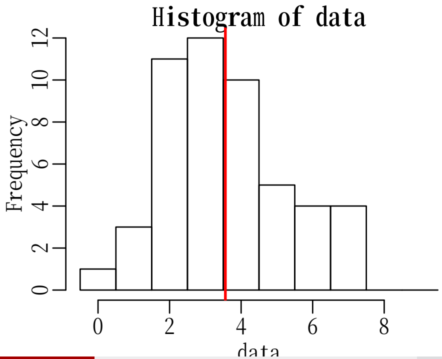


データ解析における最重要事項

とにかく 図 を描く!

標本平均という統計量

```
> mean(data)
[1] 3.56
> abline(v = mean(data), col = "red")
```



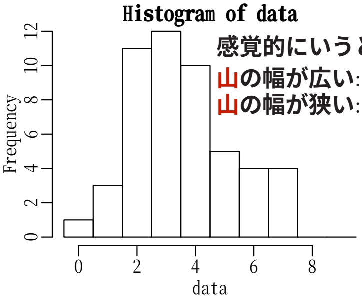
ばらつきの統計量

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

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

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

2. 確率分布って何?

経験分布と理論分布

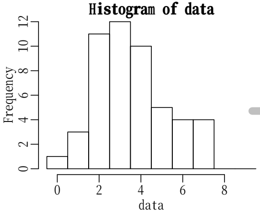
統計モデルの部品である **確率分布** には

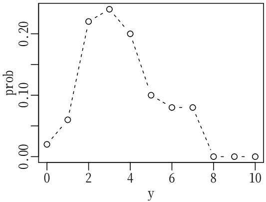
“データそのまま” な **経験分布** と

数式で定義される**理論的な分布** がある

“データそのまま” な経験分布

```
> data.table <- table(factor(data, levels = 0:10))
> cbind(y = data.table, prob = data.table / 50)
    y  prob
0   1  0.02
1   3  0.06
2  11  0.22
3  12  0.24
4  10  0.20
5   5  0.10
6   4  0.08
7   4  0.08
8   0  0.00
9   0  0.00
10  0  0.00
```





- 確率分布とは **発生する事象** と **発生する確率** の対応づけ
- “たまたま手もとにある” データから “発生確率” を決める確率分布が**経験分布**

なるほど**経験分布**は "直感的" かもしれないが……

- データが変わると確率分布が変わる?
- 種子数 $y = \{0, 1, 2, \cdots\}$ となる確率が，個々におたがい無関係に決まる?
- パラメーターは $\{p_0, p_1, p_2, \cdots, p_{99}, p_{100}, \cdots\}$ 無限個ある?

道具として使うには，ちょっと不便かもしれない……

なにか理論的に導出された確率分布のほうが便利ではないか?

- 少数のパラメーターで分布の “カタチ” が決まる
- “なめらかに” 確率が変化する
- いろいろと数理的な道具が準備されている (パラメーター推定方法など)

確率分布(ポアソン分布)を数式で決めてしまう

種子数が y である確率は以下のように決まる,と考えている

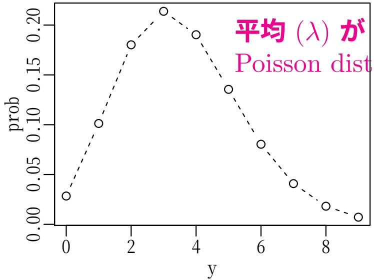
$$p(y \mid \lambda) = \frac{\lambda^y \exp(-\lambda)}{y!}$$

- $y!$ **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**

数式で決められたポアソン分布?

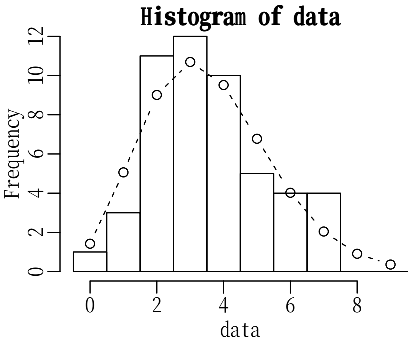
とりあえず R で作図してみる

```
> 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)
```



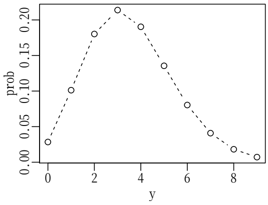

```
> # cbind で「表」作り
> cbind(y, prob)
      y       prob
 1    0 0.02843882
 2    1 0.10124222
 3    2 0.18021114
 4    3 0.21385056
 5    4 0.19032700
 6    5 0.13551282
 7    6 0.08040427
 8    7 0.04089132
 9    8 0.01819664
10    9 0.00719778
```

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
```

パラメーター λ はポアソン分布の平均




```
> # 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

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

どういう場合にポアソン分布を使う?

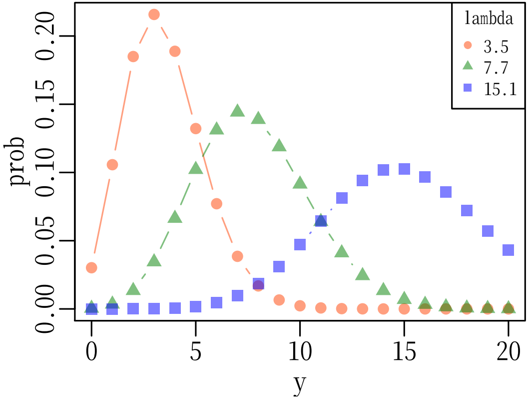
統計モデルの部品としてポアソン分布が選んだ理由:

- **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）**
- **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**
- **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**

ポアソン分布の λ を変えてみる

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

λ は平均をあらわすパラメーター



3. 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)

もっとももっともらしい推定?

尤度 (likelihood) とは何か?

- 最尤推定法では，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

なぜ確率のかけ算でよいのか?

各個体の y_i が独立にポアソン分布にしたがう，と仮定しているから

……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)

尤度 $L(\lambda)$ はパラメーター λ の関数

この例題の尤度:

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

尤度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**!)

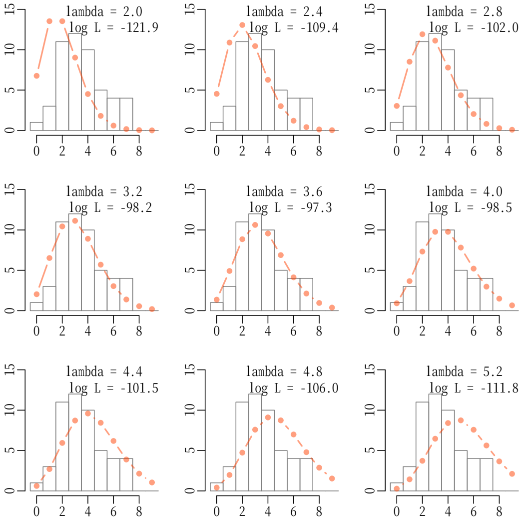
そこで，パラメーターの最尤推定では，対数尤度関数 (log likelihood function) **を使う**

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

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**

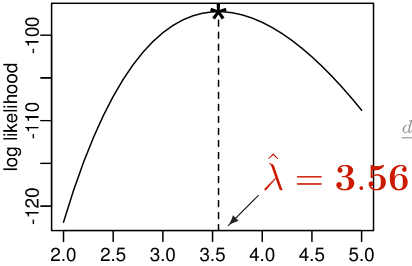
まずは，平均をあらわすパラメーター λ **を変化させていったときに，ポアソン分布のカタチと対数尤度がどのように変化するのかを調べてみましょう**

λ を変えるとあてはまりの良さが変わる



対数尤度を最大化する $\hat{\lambda}$ をさがす

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

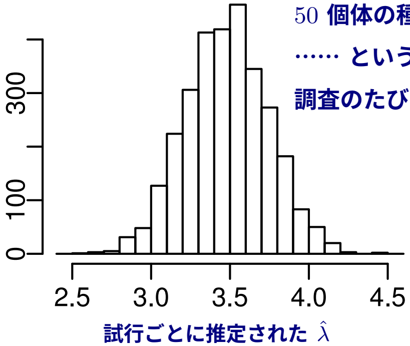


$\frac{d \log L}{d\lambda} = 0$ より

- **最尤推定量** (ML estimator): $\sum_i y_i / 50$ 　　標本平均値!
- **最尤推定値** (ML estimate): $\hat{\lambda} = 3.56$ **ぐらい**

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

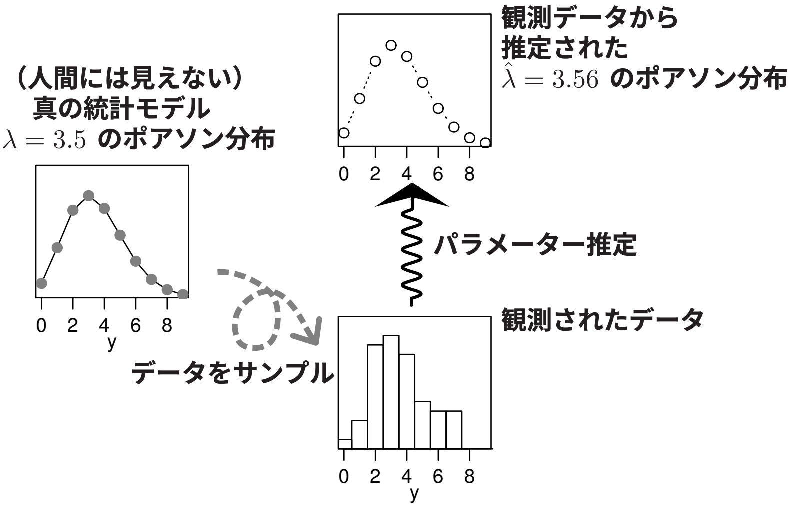
データは有限なので真の λ はわからない

4. 統計モデルの要点

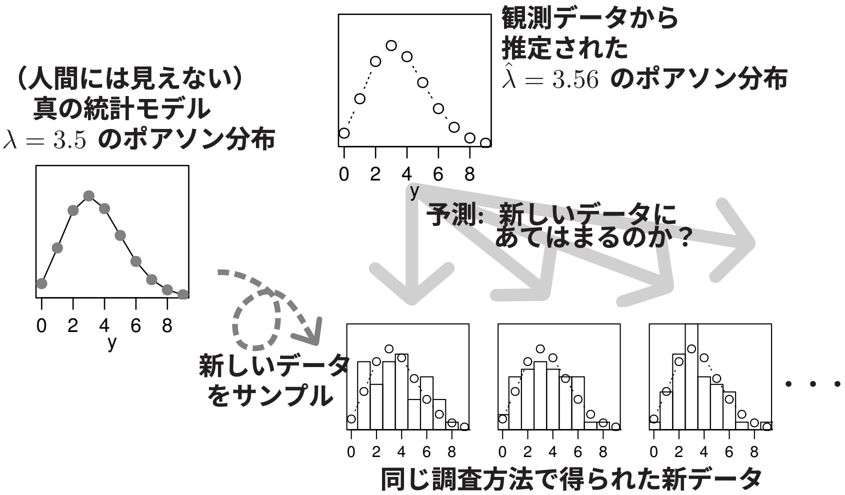
乱数発生・推定・予測

統計モデルとデータの対応づけ

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
0 2 4 6 8
y
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
0 2 4 6 8
パラメーター推定
観測されたデータ
0 2 4 6 8
y

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
0 2 4 6 8
y
観測データから
推定された
$\hat{\lambda} = 3.56$ のポアソン分布
0 2 4 6 8
y
予測: 新しいデータに
あてはまるのか？
新しいデータ
をサンプル
0 2 4 6 8
0 2 4 6 8
0 2 4 6 8
・・・
同じ調査方法で得られた新データ

この授業で登場する確率分布

- **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」**
- **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」**
- **正規分布**: $-\infty < y < \infty$ **の連続値をとるデータ**
- **その他あれこれ — ちょっと登場するだけ**

そんなに多くの確率分布は登場しません

いろいろな確率分布があるけれど……

- このセミナーでは多種多様な確率分布を**あつかいません**
- しかし **確率分布を混ぜあわせる** ことによって，自分で確率分布を作り出すことができます
- ハナシの後半に登場する GLMM や階層ベイズモデル