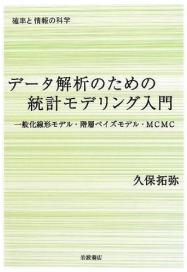
# 統計モデリング入門 2016 (a)

An Introduction to Statistical Modeling

観測されたパターンを説明する統計モデル

久保拓弥（北海道大・環境科学）
kubo@ees.hokudai.ac.jp



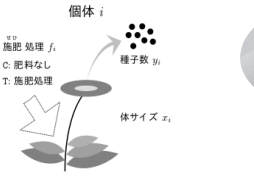




図 3.1 この例題に登場する架空植物の第 $i$ 番目の個体．この植物の体サイズ（個体の大きさ）$x_i$ と肥料をやる施肥処理 $f_i$ が種子数 $y_i$ にどう影響しているのかを知りたい．



この授業の目的:

「データにあわせて

統計モデルを作る」

…という考えかたに慣れる

「統計モデル」って何?

内容がわからなくてもソフトウェアにまるなげ

“人工知能”?

↑

その実態：機械学習?

↑

その部品の一部：「統計モデル」

…ぐらいの理解でよいかと…

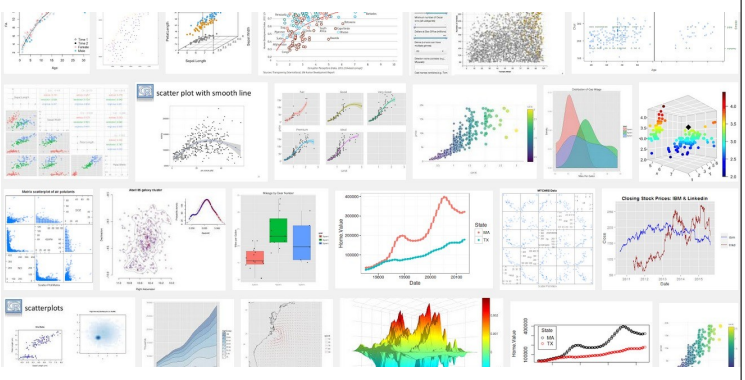


データ解析で

もっとも重要なことは?

統計モデル?…必ずしもそうではない

データを図示すること!!




google 画像検索の結果の一例

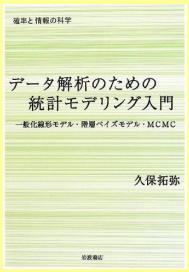
作図のないデータ解析はありえない!



じゃ，データ図示の授業やったら?

- うーむ…作図は art?
  - 自分の中では体系化されていない
  - ダメな作図は指摘できる
  - よい作図の方針はよくわからない
- 統計モデリングは science
  - 簡単なものから高度なものへステップアップ
  - 何がダメか, 比較的明瞭

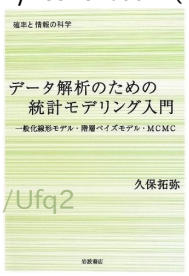
# 教科書とソフトウェア



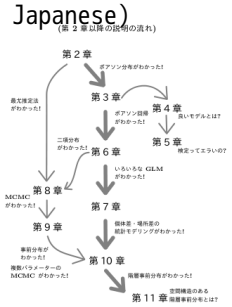

# この授業は「統計モデリング入門」にそった内容を説明します

my text book (in Japanese)

著者: 久保拓弥
出版社: 岩波書店
2012-05-18 刊行
価格 3990 円




http://goo.gl/Ufq2




割引販売 3000 円!!



# 「統計モデリング入門」のもとになった「講義のーと」もあります


授業 web page に「講義のーと」へのリンクがあります! http://goo.gl/82dgC



# 統計ソフトウェア R

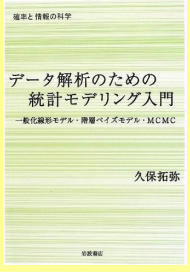
統計学の勉強には良い統計ソフトウェアが必要!

- 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

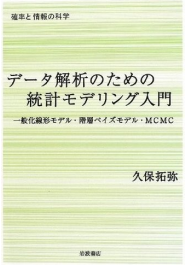



# 統計モデルとは何か?




# 「統計モデル」とは何か?

どんな統計解析においても
統計モデルが使用されている

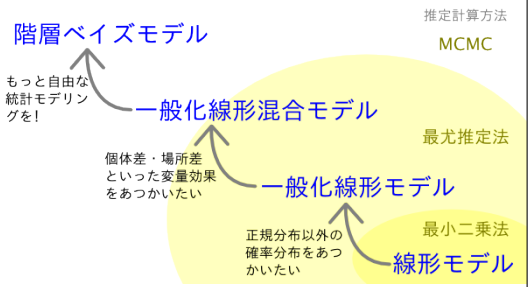



- 観察によってデータ化された現象を説明するために作られる
- 確率分布が基本的な部品であり，これはデータにみられるばらつきを表現する手段である
- データとモデルを対応づける手つづきが準備されていて，モデルがデータにどれぐらい良くあてはまっているかを定量的に評価できる

# 「統計モデリング入門」の主張

「何でも正規分布」じゃないだろ!

線形モデルの発展




# たとえばこんなデータがあったしましょう

An example
(次の時間の例題)

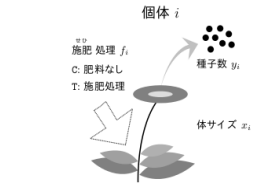
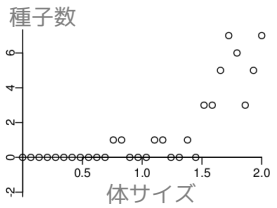



図 3.1 この例題に登場する架空植物の第 $i$ 番目の個体．この植物の体サイズ（個体の大きさ）$x_i$ と肥料をやる施肥処理 $f_i$ が種子数 $y_i$ にどう影響しているのかを知りたい．

number of seeds

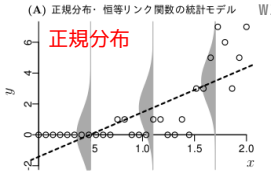


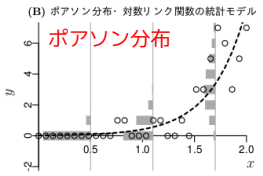

plant body size



# 一般化線形モデル - ばらつきをよく見る

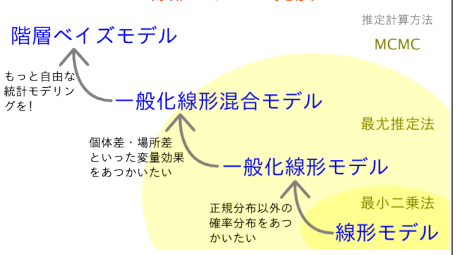
Don't use the normal distribution without seeing data!




3.9 回帰モデルと確率分布の関係．また別の架空データに対して GLM をあてはめた例．破線は $x$ とともに変化する平均値．グレイで

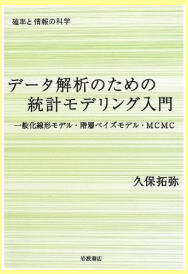
線形モデルの発展




0 個，1 個，2 個と数えられる種子数が「正規分布」なわけないだろ!!



# もともと誰のための教科書・講義?




あまり勉強しない「理系」院生のための…

# 「理系」院生の秘密：あまりよく考えない

内容がわからなくてもソフトウェアにまるなげ

- ブラックボックス統計解析
  - No “Blackbox” statistics!
- とにかく「ゆーい差」さえ出せばよいという発想(「理系」だけにありがちな思考?)

統計モデルを理解する

→「脱」ブラックボックス



# 9/18 の概要

(a) 09:30-10:45 統計モデリング講義の概要

(b) 10:55-12:10 確率分布と最尤推定

(c) 13:20-14:35 R 実習: data.frame 操作と作図

(d) 14:45-16:00 ポアソン回帰の GLM

(e) 16:10-17:25 モデル選択と検定

# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (b)

probability distribution and maximum likelihood estimation
確率分布と最尤推定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

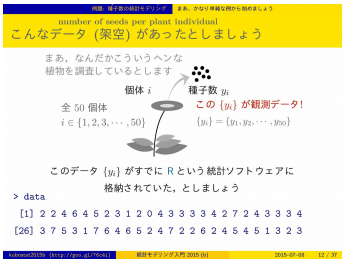
筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

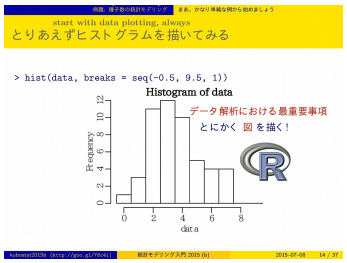
2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–08 17:19



# 単純化した例題






# カウントデータはポアソン分布を使って説明できないかを調べる

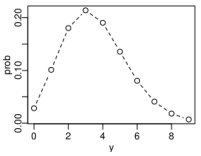



図 4 平均 $\lambda = 3.56$ のポアソン分布．種子数 y とその確率 prob の関係が示されている．図 3 の表を図にしたもの．R の plot() 関数の引数，type = "b" によって「丸と折れ線による図示」，lty = 2 によって「折れ線は破線で」と指示している．

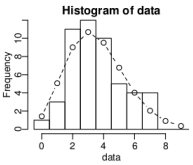



図 5 観測データと確率分布の対応をながめる．ヒストグラムは図 2 と同じ．それに重ねられている丸と破線は y 個の種子をもつ個体数の予測．平均 3.56 の図 4 のポアソン分布の確率分布に全個体数 50 をかけて得られる．



# さいゆう 最尤推定という考えかたを説明します

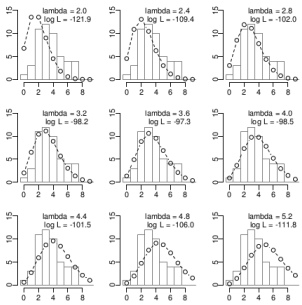
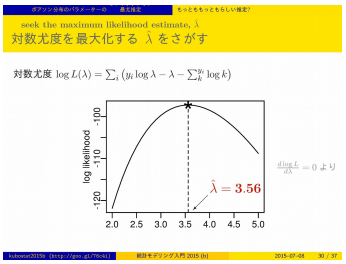



図 7 平均 λ（lambda）を変化させていったポアソン分布と，観測データへのあてはまりの良さ（対数尤度 logL）．すべてのヒストグラムは図 2 と同じ．






# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (c)

R の練習: 次の時間の例題データ

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

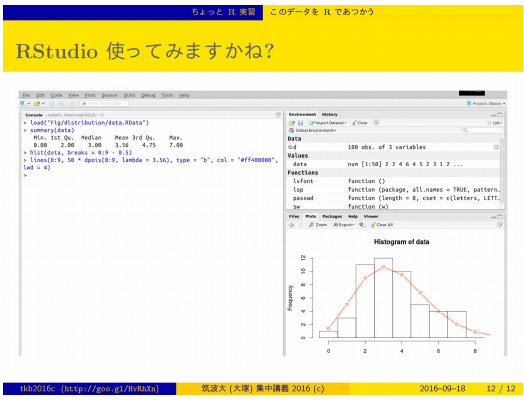
筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–09 17:27



# 統計ソフトウェア R の練習



# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (d)

Poisson regression, a generalized linear model (GLM)
一般化線形モデル: ポアソン回帰

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–08 17:40



## ここで登場する ---
## 「何でも正規分布」ではダメ！という発想

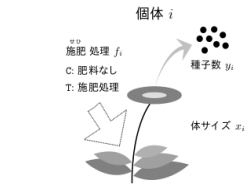



図 3.1 この例題に登場する架空植物の第 $i$ 番目の個体．この植物の体サイズ（個体の大きさ）$x_i$ と肥料をやる施肥処理 $f_i$ が種子数 $y_i$ にどう影響しているのかを知りたい．

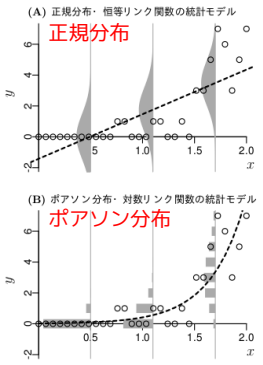



図 3.9 回帰モデルと確率分布の関係．また別の架空データに対して GLM をあてはめた例．破線は $x$ とともに変化する平均値．グレイで



## Free の統計ソフトウェア R で統計モデリング

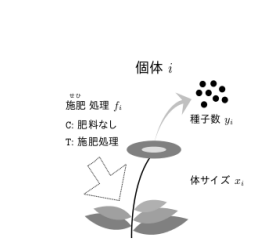



図 3.1 この例題に登場する架空植物の第 $i$ 番目の個体
体サイズ（個体の大きさ）$x_i$ と肥料をやる施肥処理
にどう影響しているのかを知りたい．

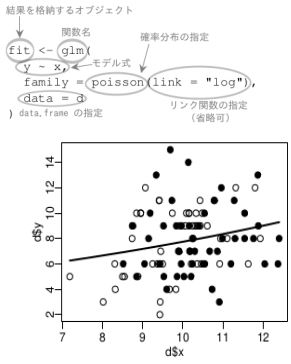



図 17 平均種子数 $\lambda$ の予測．図 16 に $\lambda$ の予測値（実線）を上がきしたもの．



# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (e)

モデル選択と検定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

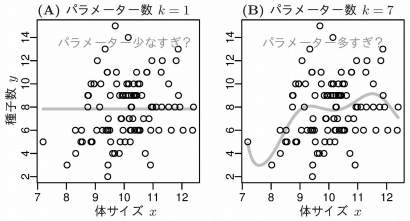
ファイル更新時刻: 2016–09–08 17:48



## Q. モデル選択とは何か？

もくじ

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 $k$?





## A. より良い予測をする統計モデルを探すこと

統計学的な検定 そして，その非対称性

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 ←こっちだ!

検定はモデル選択じゃない!

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

⇓ ⇓

# 統計学って「検定」のこと?

「検定」って何なの?

「検定」ってエラいの?

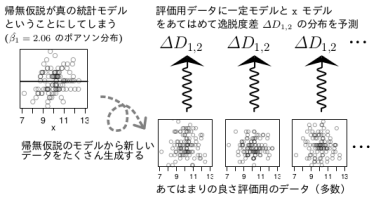



図 6　尤度比検定に必要な $\Delta D_{1,2}$ の分布の生成．まず帰無仮説である一定モデル（$\hat{\beta}_1 = 2.06$, p.[6] 参照）が真の統計モデルだと仮定し，そこから得られるデータを使って逸脱度差 $\Delta D_{1,2}$ がどのような分布になるかを調べる．



# 9/19 の概要

(f) 09:30-10:45 ロジスティック回帰の GLM
(g) 10:55-12:10 マルコフ連鎖モンテカルロ法
(h) 13:20-14:35 階層ベイズモデル
(i) 14:45-16:00 階層ベイズモデルの応用:
時系列データの状態空間モデル 1
(j) 16:10-17:25 階層ベイズモデルの応用:
時系列データの状態空間モデル 2

## 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (f)

GLM　　logistic regression
一般化線形モデル: ロジスティック回帰

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–19

ファイル更新時刻: 2016–09–08 17:58

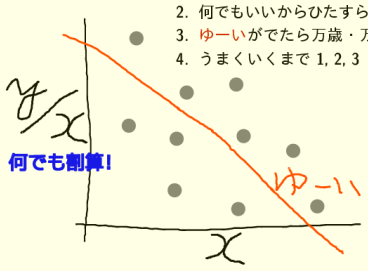
tkb2016f (http://goo.gl/HvRhXn) 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (f) 2016–09–19 1 / 43

# 生物学のデータ解析は「割算」しまくり!!

この悪しき「割算」な統計学

世間でよくみかけるおススメできない作法の例

1. データどんどん割算・割算
2. 何でもいいからひたすらセンをひく
3. ゆーいがでたら万歳・万歳
4. うまくいくまで 1, 2, 3 ぐるぐる




ちなみにこれは $\infty$ と $\circ/\infty$ を比較してるんだから，反比例みたいな偽「負の相関」がでるのはあたりまえ

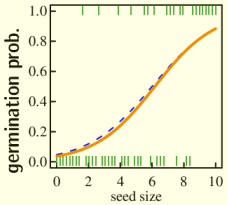
2012–11–02 k4 (2012–10–26 17:07 修正版) 14/ 44



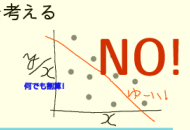
# GLM のひとつ，ロジスティック回帰を使おう

データにあわせたより良い統計モデリングを!

おススメできないデータ解析を回避するための注意点




- むやみに 区画わけしない！
- 何でも 割り算するな！
- たくさん 図を描く
- 「観測データを説明する 確率分布は何か?」 を考える




コツ: 不自然にデータをこねくりまわさない
データの性質・構造にあったモデリングを!

2012–11–02 k4 (2012–10–26 17:07 修正版) 43/ 44

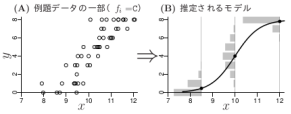


# GLM のひとつ，ロジスティック回帰を使おう

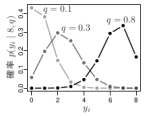
またいつもの例題? …… ちょっとちがう

ロジスティック回帰とは何なのか?

8 個の種子のうち $y$ 個が 発芽可能 だった! …… というデータ


二項分布: $N$ 回のうち $y$ 回，となる確率



# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (g)

階層ベイズモデル Hierarchical Bayesian Model

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–19

ファイル更新時刻: 2016–09–08 18:02

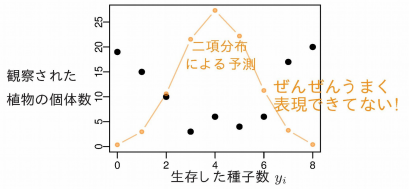


## GLM ではうまく説明できないデータ!?



また別の観測データ: 二項分布だめだめ?!

100 個体の植物の合計 800 種子中 403 個の生存が見られたので，平均生存確率は 0.50 と推定されたが……




さっきの例題と同じようなデータなのに?

(「統計モデリング入門」第 10 章の最初の例題)

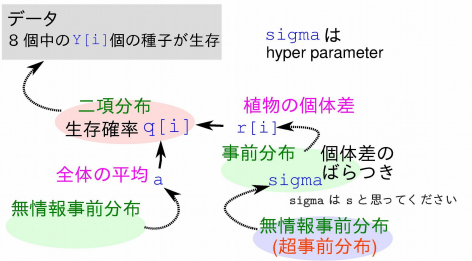
第 6 回と同じような例題を，こんどはベイズモデルを使ってモデリングします

## GLM を階層ベイズモデル化して対処



なぜ「階層」ベイズモデルと呼ばれるのか?

超事前分布 → 事前分布という階層があるから



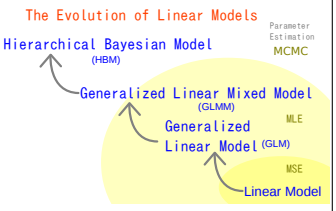

矢印は手順ではなく，依存関係をあらわしている





## なぜ階層ベイズモデルまで勉強するの?

- 個体差・店舗差・地区差・空間相関・時間相関などめんどうな「細かい差異」をあつかわないといけない




そういう難しい状況では……

- 「差異」の階層ベイズモデル化
- そのパラメーターの事後分布を MCMC 法を使って推定するのが無難



9/19 (h)

# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (h)

階層ベイズモデルと時間変化モデル

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–19

ファイル更新時刻: 2016–09–09 13:29



## 短い時系列データ

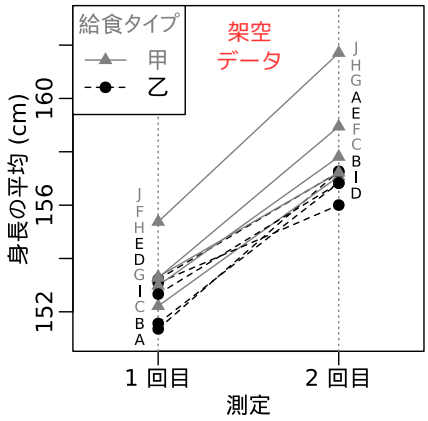
時系列の長短に関係なく

「対応のある」データ点か

どうかが本質的な問題

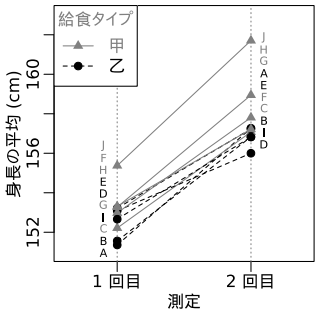
## 再測定もまた時系列データ

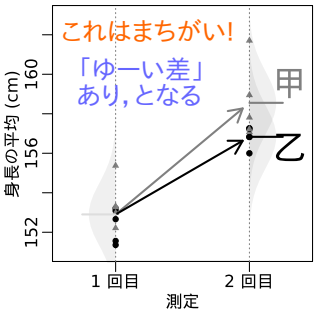

岩波データサイエンス vol.1






## 対応（paired）を考えてない GLM あてはめ



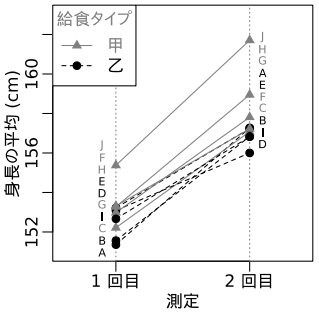



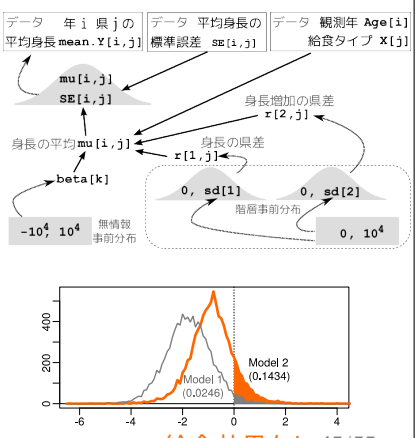

glm(身長 ～ (測定2回目) + (測定2回目):(処理の効果))

同じ対象を二回測定していることを考慮してない



## 対応（paired）を考慮し，さらに県の差もあるモデル







給食効果なし

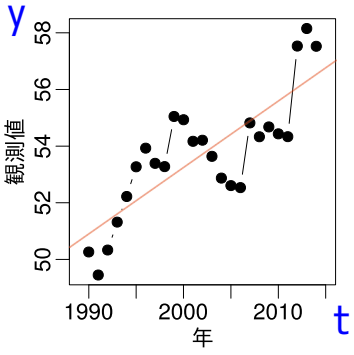


## 長い時系列データ

データ上で「時間相関」が見える

「時間相関」のモデリングが必要

## 時間相関のある時系列データに…

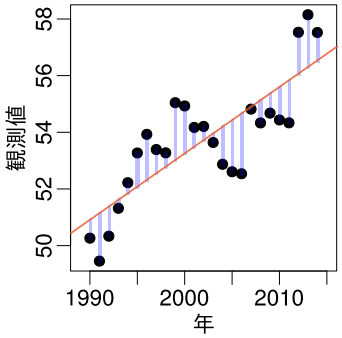



glm(y ~ t)

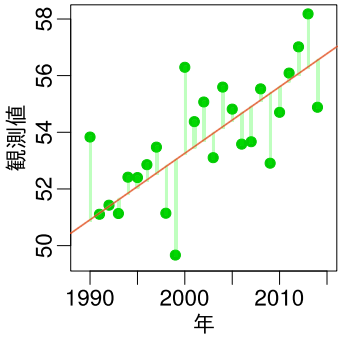
…と, モデルを
あてはめてみた



## 時系列の「ずれ」



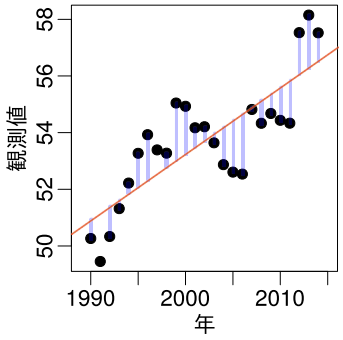

## GLM のずれ



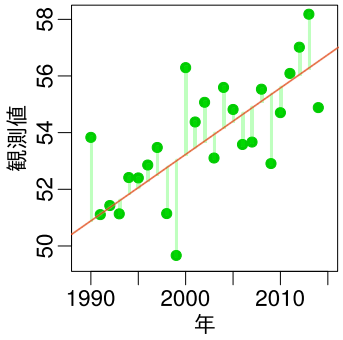

直線からのずれがちがう!

時間的自己相関がある　　時間的自己相関がない

## 時系列の「ずれ」




## GLM のずれ




直線からのずれがちがう!

時間的自己相関がある　　時間的自己相関がない

2016-09-18 tkb2016a 49/55

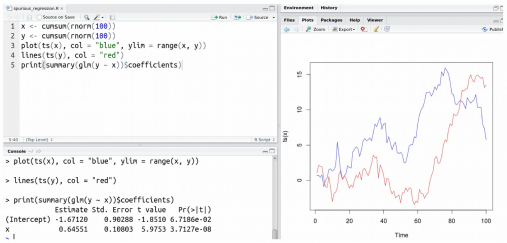
9/19 (j)

時系列データ解析

状態空間モデル（SSM）の続きと

疑わしい回帰（spurious regression）

久保拓弥（北海道大・環境科学）



2016-09-19 tkb2016j 1/30

## 統計モデルづくりの要点

時系列データの解析は

階層ベイズモデル化した

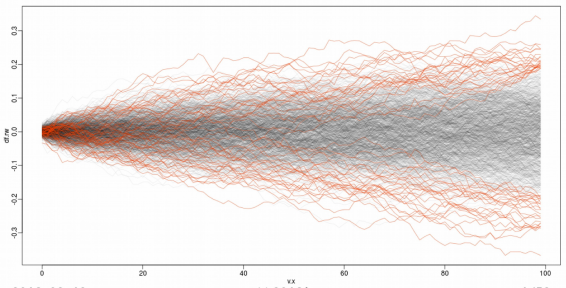
状態空間モデルを使うのが便利

9/19 (i)

生態学の時系列データ解析でよく見る

『あぶない』モデリング

久保拓弥 mailto:kubo@ees.hokudai.ac.jp

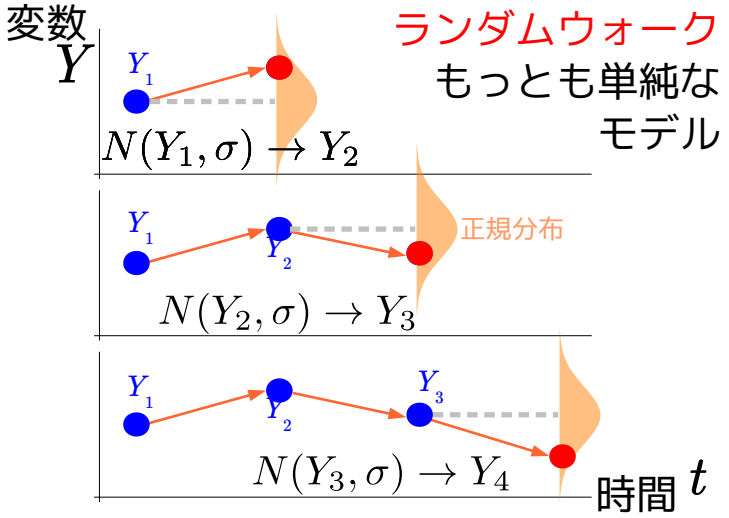


2016-09-19 tkb2016i 1/52

## ランダムウォーク

もっとも単純な

モデル

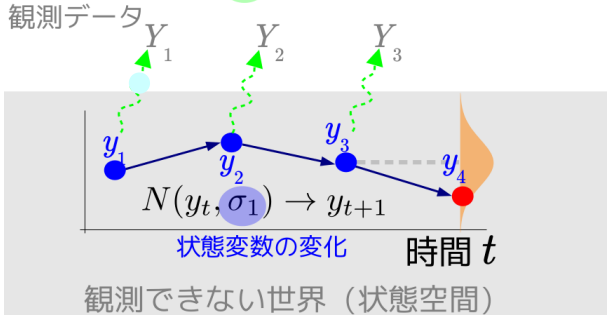



2016-09-18 tkb2016a 53/55

## 状態空間モデル + 観測モデル

観測の誤差　　状態空間モデル

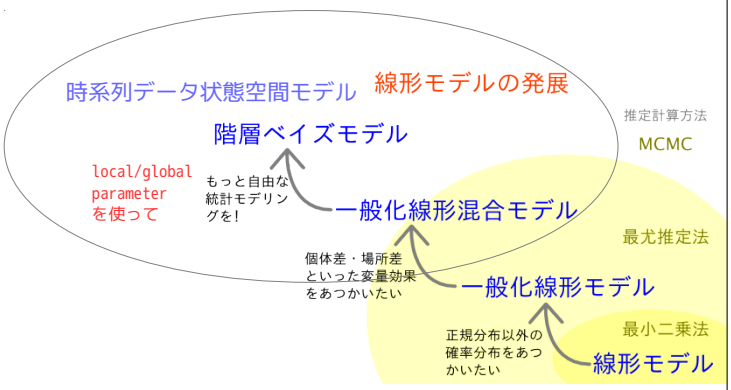
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$　二種類の $\sigma$ をもつ




2016-09-18 tkb2016a 54/55

# 全体のながれ…でした

データの性質・構造をよくみて統計モデルを作る



# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (b)

## 確率分布と最尤推定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–15 17:56





## 今日のハナシ I

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. データと確率分布の対応
   probability distribution, the core of statistical model
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



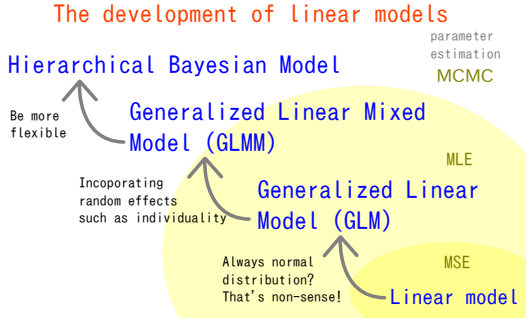


# 統計モデリング授業前半の主題は「線形モデルを発展させる」こと





## この授業であつかう統計モデルたち




Kubo Doctrine: "Learn the evolution of linear-model family, firstly!"

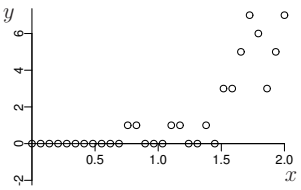




## 0 個, 1 個, 2 個と数えられるデータ

カウントデータ ($y \in \{0, 1, 2, 3, \cdots\}$ なデータ)

応答変数




説明変数

- たとえば $x$ は植物個体の大きさ，$y$ はその個体の花数
- 体サイズが大きくなると花数が増えるように見えるが……
- この現象を表現する統計モデルは?

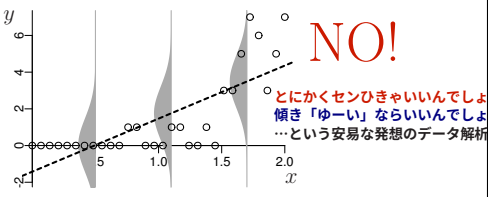




## 正規分布を使った統計モデル …… ムリがある?

正規分布・恒等リンク関数の統計モデル

応答変数



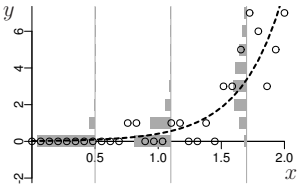

説明変数

- タテ軸のばらつきは「正規分布」なのか?
- $y$ の値は 0 以上なのに ……
- 平均値がマイナス?

## ポアソン分布を使った統計モデルなら良さそう?!

ポアソン分布・対数リンク関数の統計モデル

応答変数




YES!

説明変数

- タテ軸に対応する「ばらつき」
- 負の値にならない「平均値」
- 正規分布を使ってるモデルよりましだね





## データの性質をよくみる 確率分布という部品を選ぶ 「ぶらっくぼっくす」にしない!

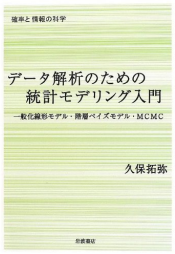




## 今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

http://goo.gl/Ufq2

今日はおもに「第 2 章 確率分布と統計モデルの最尤推定」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





## 2. 例題: 種子数の統計モデリング

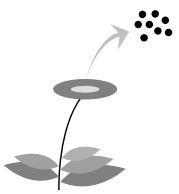
まあ，かなり単純な例から始めましょう

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 $i$

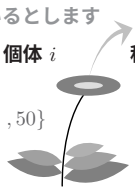
種子数 $y_i$

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
```

## これ使いましょう: 統計ソフトウェア R

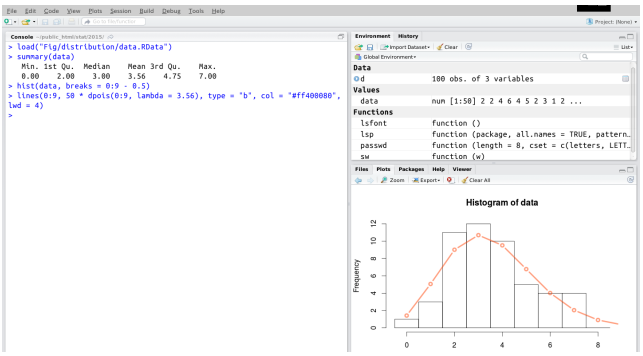
http://www.r-project.org/

- いろいろな OS で使える free software
- 使いたい機能が充実している
- 作図機能も強力
- S 言語によるプログラミング可能
- Rstudio http://www.rstudio.com/





## RStudio




http://www.rstudio.com/





## 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
```

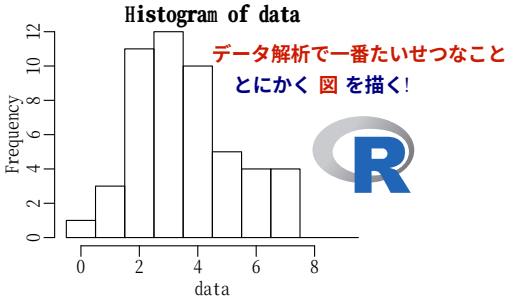
(種子数 5 は 5 個体，種子数 6 は 4 個体 ……)





## 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))
```




データ解析で一番たいせつなこと
とにかく 図 を描く!

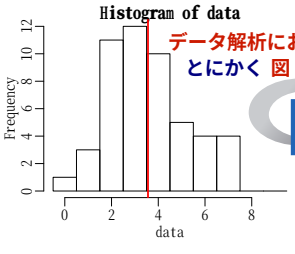






## How to evaluate mean value using R?

```
> mean(data)
[1] 3.56
> abline(v = mean(data))
```




データ解析における最重要事項
とにかく 図 を描く!





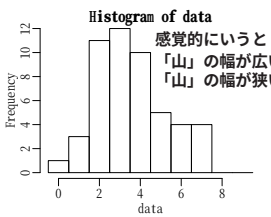
## 「ばらつき」の統計量

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

## 3. データと確率分布の対応

probability distribution, the core of statistical model

**確率分布は統計モデルの重要な部品**



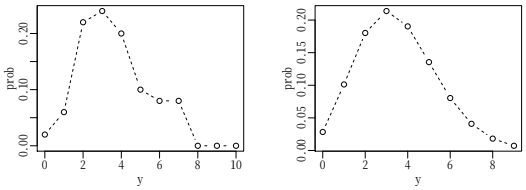


## Empirical VS Theoretical Distributions

**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 (cf. サイコロ) と**

**数式で定義される理論的な分布 がある**

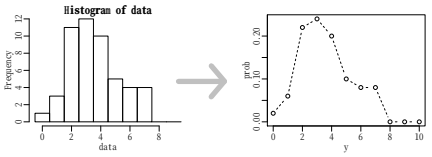







## “データそのまま” な経験分布

```
> 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

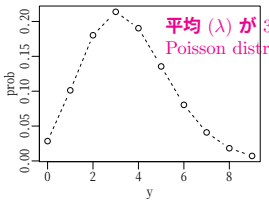
$$p(y \mid \lambda) = \frac{\lambda^y \exp(-\lambda)}{y!}$$

- $y!$ 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)
```




平均 ($\lambda$) が 3.56 である
Poisson distribution

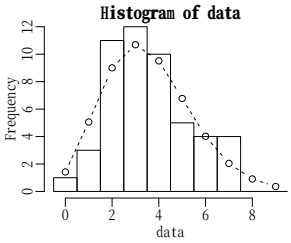
```
> # cbind で「表」作り
> cbind(y, prob)
```

| | 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

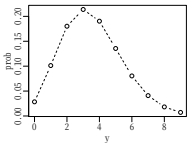



```
> hist(data, seq(-0.5, 8.5, 0.5))      # まずヒストグラムを描き
> lines(y, prob, type = "b", lty = 2) # その「上」に折れ線を描く
```





## パラメーター $\lambda$ 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 $\lambda$ 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 $\lambda$ 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

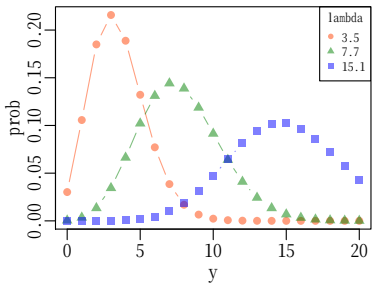




## ポアソン分布の $\lambda$ を変えてみる

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

$\lambda$ は平均をあらわすパラメーター








## 4. 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?

「あてはめる」ことは推定すること

## 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 $\lambda$ 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 $\lambda$ 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





## 尤度 $L(\lambda)$ はパラメーター $\lambda$ の関数

この例題の尤度:

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





## 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

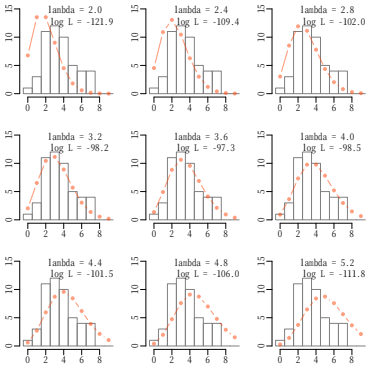
$$\log L(\lambda) = \sum_i \left( y_i \log \lambda - \lambda - \sum_k^{y_i} \log k \right)$$

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 $\lambda$ 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





## $\lambda$ を変えるとあてはまりの良さが変わる

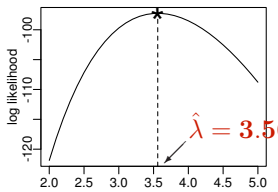







## 対数尤度を最大化する $\hat{\lambda}$ をさがす

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

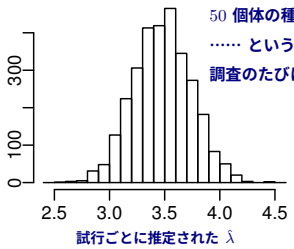
- 最尤推定量 (ML estimator): $\sum_i y_i / 50$ 標本平均値!
- 最尤推定値 (ML estimate): $\hat{\lambda} = 3.56$ ぐらい





## 最尤推定を使っても真の $\lambda$ は見つからない

真の $\lambda$ 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 $\lambda$ はわからない

# 5. 統計モデルの要点

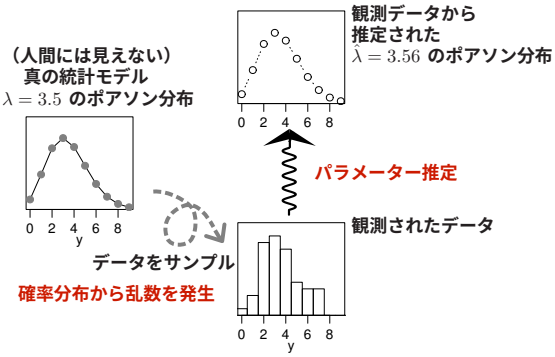
乱数発生・推定・予測

統計モデルとデータの対応づけ





## 確率分布: 乱数発生 と 推定

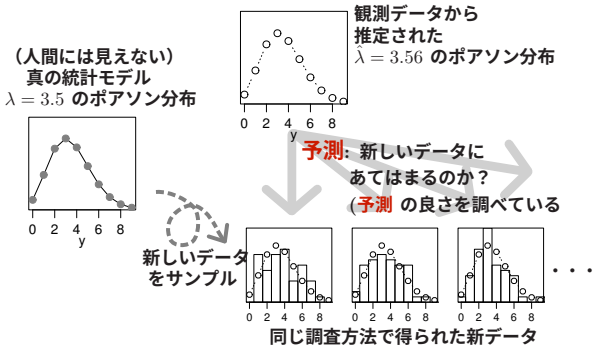



データ？…ここでは確率・統計モデルが生成していると仮定





## 推定されたモデルを使った 予測








## この講義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

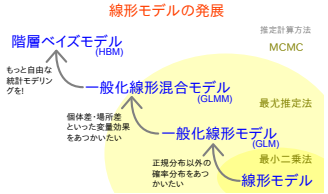
**そんなに多くの確率分布は登場しません**





## いろいろな確率分布があるけれど……

- この講義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

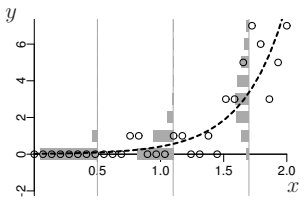







# 次回予告

The next topic




## 一般化線形モデルのひとつ: ポアソン回帰

Poisson Regression, a Generalized Linear Model (GLM)

# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (c)

## R の練習: 次の時間の例題データ

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–15 17:56





## 1. ポアソン回帰の例題: 架空植物の種子数データ

植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

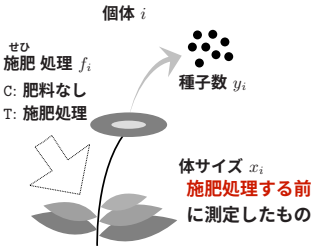
まずはデータの概要を調べる





## 個体サイズと実験処理の効果を調べる例題

- 応答変数: 種子数 $\{y_i\}$
- 説明変数:
  - 体サイズ $\{x_i\}$
  - 施肥処理 $\{f_i\}$




標本数

- 無処理 ($f_i$ = C): 50 sample ($i \in \{1, 2, \cdots 50\}$)
- 施肥処理 ($f_i$ = T): 50 sample ($i \in \{51, 52, \cdots 100\}$)





## データファイルを読みこむ

data3a.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("data3a.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

とりあえず data frame d を表示

```
> d
    y     x f
1   6  8.31 C
2   6  9.44 C
3   6  9.50 C
... (中略) ...
99  7 10.86 T
100 9  9.97 T
```





## data frame d を調べる: 連続値と整数値

```
> d$x
  [1]  8.31  9.44  9.50  9.07 10.16  8.32 10.61 10.06
  [9]  9.93 10.43 10.36 10.15 10.92  8.85  9.42 11.11
... (中略) ...
 [97]  8.52 10.24 10.86  9.97

> d$y
  [1]  6  6  6 12 10  4  9  9  9 11  6 10  6 10 11  8
 [17]  3  8  5  5  4 11  5 10  6  6  7  9  3 10  2  9
... (中略) ...
 [97]  6  8  7  9
```





## data frame d を調べる: “因子型” のデータ

施肥処理の有無をあらわす f 列はちょっと様子がちがう

```
> d$f
  [1] C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
 [26] C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
 [51] T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T
 [76] T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T
Levels: C T
```

因子型データ: いくつかの水準をもつデータ
ここでは C と T の 2 水準

## Rのデータのクラスとタイプ

```
> class(d) # d は data.frame クラス
[1] "data.frame"
> class(d$y) # y 列は整数だけの integer クラス
[1] "integer"
> class(d$x) # x 列は実数も含むので numeric クラス
[1] "numeric"
> class(d$f) # そして f 列は factor クラス
[1] "factor"
```





## data frame の summary()

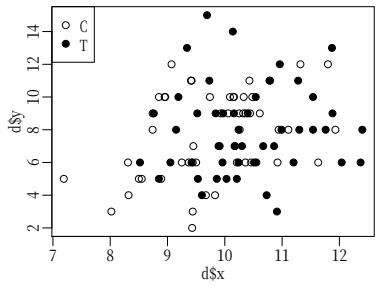
```
> summary(d)
       y                x          f
 Min.   : 2.00   Min.   : 7.190   C:50
 1st Qu.: 6.00   1st Qu.: 9.428   T:50
 Median : 8.00   Median :10.155
 Mean   : 7.83   Mean   :10.089
 3rd Qu.:10.00   3rd Qu.:10.685
 Max.   :15.00   Max.   :12.400
```





## データはとにかく図示する!

```
> plot(d$x, d$y, pch = c(21, 19)[d$f])
> legend("topleft", legend = c("C", "T"), pch = c(21, 19))
```



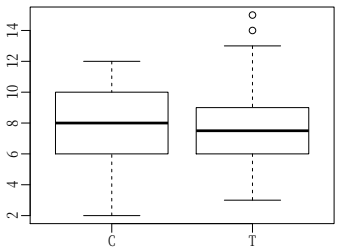

散布図





## 施肥処理 f を横軸とした図

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




箱ひげ図





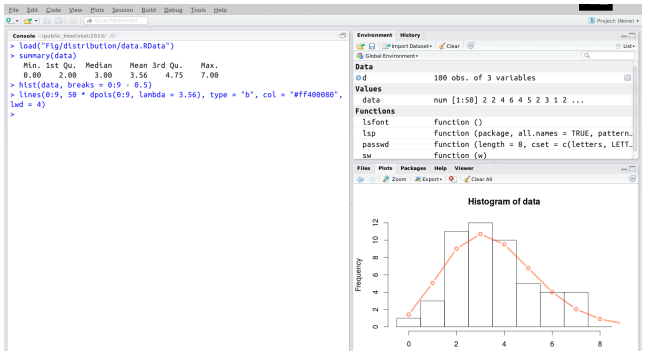
## 2. ちょっと R 実習

### このデータを R であつかう





## RStudio 使ってみますかね?



# R の練習 (r1) 2016–09–18

**久保拓弥** kubo@ees.hokudai.ac.jp

この授業の web page: http://goo.gl/HvRhXn

統計ソフトウェア R は研究にたいへん役にたつ free software (無料で入手でき，しかも内部を自由に調べられる) です．今回は R のデータ操作・作図の基本わざを説明します．

R を使ったデータ解析の基本的な流れは次のようになります:

1. データを読みこむ (データフレイム data.frame を作る)
2. 読みこんだデータをいろいろ整理する (データフレイムの操作)
3. データをさまざまな方法で**図示**する
4. 統計モデリングの設計・あてはめを行う
5. あてはめの結果やモデルの予測を**図示**する
6. 解析結果をさまざまな方法で出力し，保存する

今日は時間も限られているので，データの読みこみ，基本的ななデータフレイム操作，簡単な図示について説明します．上述の授業 web site のあちこちを見て，さらに発展したわざも勉強してください．

## 1 R でデータフレイムの操作

### 1.1 データを読みこんで data.frame を作り，それを表示する

```
> d <- read.csv("data.csv")
> d
   treatment size seed
1    control 21.3    9
2       trtX 24.2   19
3    control 12.0    1
4       trtX 16.1    4
5    control 21.8   13
6       trtX 20.2    6
7    control 22.7    8
8       trtX 23.8    8
9    control 19.5    7
10      trtX 26.4   22
11   control 20.1    3
12      trtX 27.3   31
```

```
13   control 22.5   14
14      trtX 21.8   19
15   control 18.6    4
16      trtX 25.3   26
17   control 23.5   11
18      trtX 19.7    6
19   control 27.9   22
20      trtX 22.0   17
```

```
> head(d) # 最初の 6 行が表示される
  treatment size seed
1   control 21.3    9
2      trtX 24.2   19
3   control 12.0    1
4      trtX 16.1    4
5   control 21.8   13
6      trtX 20.2    6
```

```
> head(d, 3) # 最初の 3 行が表示される
  treatment size seed
1   control 21.3    9
2      trtX 24.2   19
3   control 12.0    1
```

```
> tail(d, 3) # 最後の 3 行が表示される
   treatment size seed
18      trtX 19.7    6
19   control 27.9   22
20      trtX 22.0   17
```

```
> edit(d) # d を編集する
```

## 1.2 data.frame から行と列をとりだす

```
> d[1:3,] # 1 行めから 3 行めをとりだす
  treatment size seed
1   control 21.3    9
2      trtX 24.2   19
3   control 12.0    1
```

```
> d[c(1, 3, 5),] # 1, 3, 5 行めをとりだす
  treatment size seed
```

```
1   control 21.3    9
3   control 12.0    1
5   control 21.8   13

> d[, 1] # 1 列めをとりだす
 [1] control trtX    control trtX    control trtX  ... 略
Levels: control trtX

> d[4:6, 2:3] # 4-6 行めの 2-3 列めをとりだす
  size seed
4 16.1    4
5 21.8   13
6 20.2    6

# 列の選びかたに 3 とおりある（どれも重要）
> d[, 3] # 3 列めをとりだす
 [1]  9 19  1  4 13  6  8  8  7 22  3 31 14 19  4 26 11  6 22 17

> d$seed # 上とおなじことをやっている
 [1]  9 19  1  4 13  6  8  8  7 22  3 31 14 19  4 26 11  6 22 17

> d[, "seed"] # これも同じ
 [1]  9 19  1  4 13  6  8  8  7 22  3 31 14 19  4 26 11  6 22 17
```

## 1.3 data.frame から条件つきデータとりだし

treatment が trtX のデータ

```
> d[d$treatment == "trtX",]
   treatment size seed
2       trtX 24.2   19
4       trtX 16.1    4
6       trtX 20.2    6
8       trtX 23.8    8
10      trtX 26.4   22
12      trtX 27.3   31
14      trtX 21.8   19
16      trtX 25.3   26
18      trtX 19.7    6
20      trtX 22.0   17
```

size が 25.0 より大きいのデータ

```
> d[d$size > 25.0,]
```

```
   treatment size seed
10      trtX 26.4   22
12      trtX 27.3   31
16      trtX 25.3   26
19   control 27.9   22
```

seed が 6 以下であるデータ

```
> d[d$seed <= 6,]
3    control 12.0    1
4       trtX 16.1    4
11   control 20.1    3
15   control 18.6    4
...
```

seed が 6 以下，かつ 2 より大

```
> d[d$seed <= 6 & d$seed > 2,]
...
```

seed が 6 より大，または 2 以下

```
> d[d$seed > 6 | d$seed <= 2,]
...
```

### 1.4 data.frame 内でのならびかえ

```
> d <- d[order(d$size),] # d$size の小さい順に並べかえる
> d <- d[rev(order(d$size)),] # d$size の大きい順に並べかえる
```

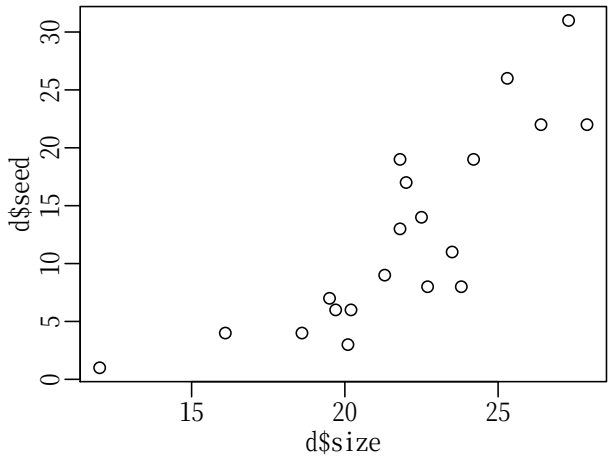
## 2 R で作図

R 作図の基本 (plot() 関数を使う場合)

- いっぺんに図を作ろうとするのではなく，必要な要素を足していく
- plot() で「わく」を描く
- points(), lines(), legend() で必要なものを追加していく
- par(new = TRUE) による方法は使わないほうがよい (わくを何重にも描くことになったりするから)

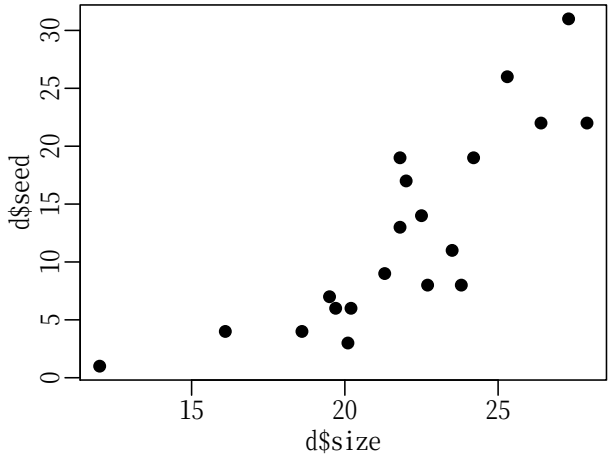
## 2.1 data.frame のデータを表示する

```
> d <- read.csv("r1.csv")
> plot(d$size, d$seed)
```



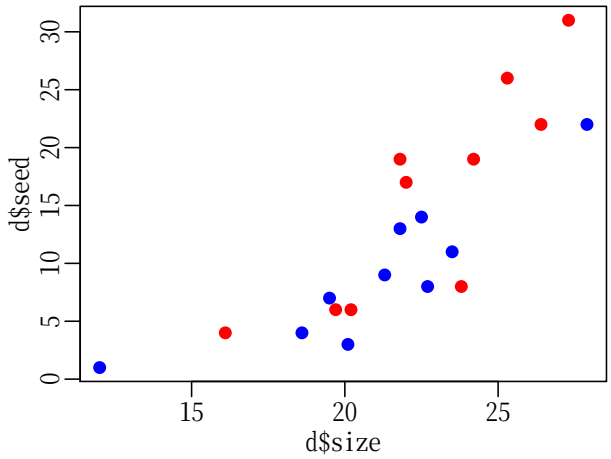

pch 引数で点の種類を変える

```
> plot(d$size, d$seed, pch = 19)
```



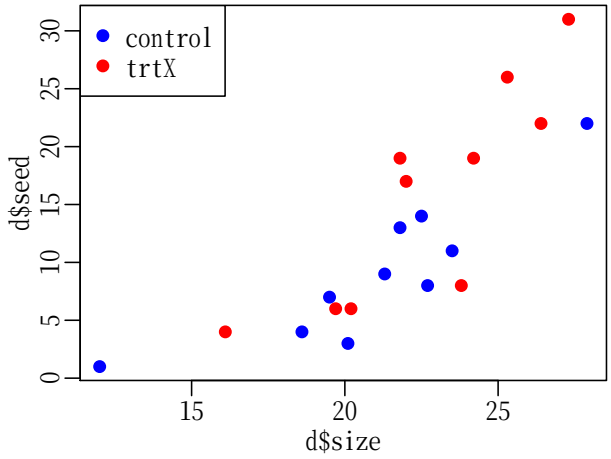

col 引数で点の色を変える

```
> plot(d$size, d$seed, pch = 19, col = c("blue", "red")[d$treatment])
```




legend() 関数で凡例を追加

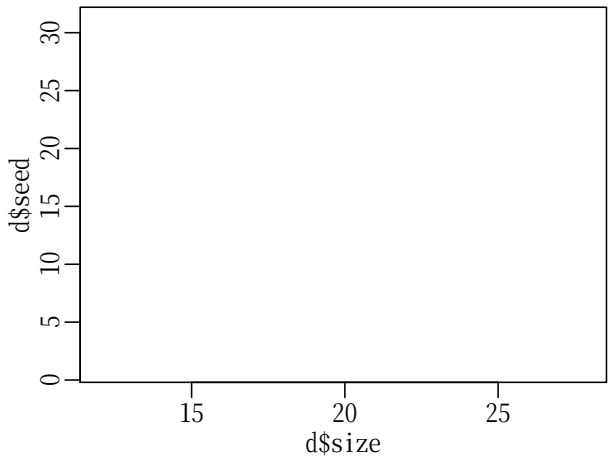
```
# 上の図に legend を追加
> legend("topleft", legend = levels(d$treatment), pch = 19, col = c("blue", "red"))
```




## 2.2 図を順にかさねていくわざ

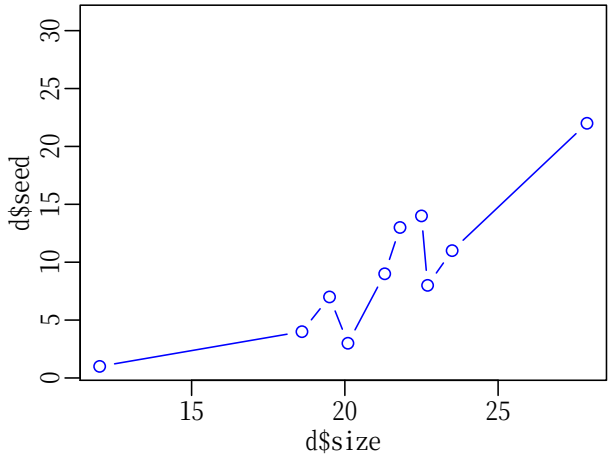
最初にわくだけ描く

```
> plot(d$size, d$seed, type = "n") # わくだけ描く
```



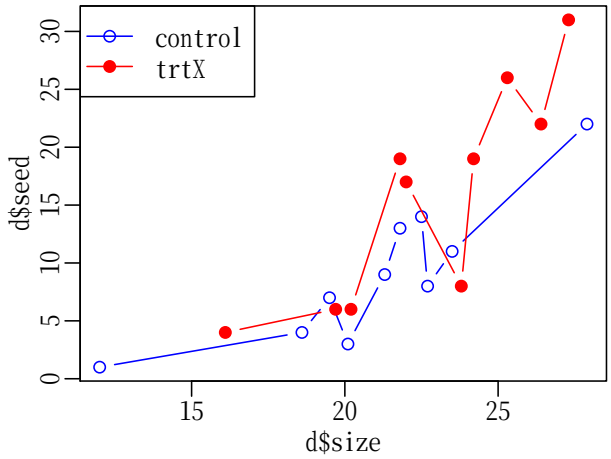

処理が control である線だけ描く

```
> dC <- d[d$treatment == "control",] # treatment が control のデータだけ
> dC <- dC[order(dC$size),] # size 順にならびかえる
> lines(dC$size, dC$seed, pch = 21, col = "blue") # 線を追加
```




次に処理が trtX である線を描き，凡例を追加する

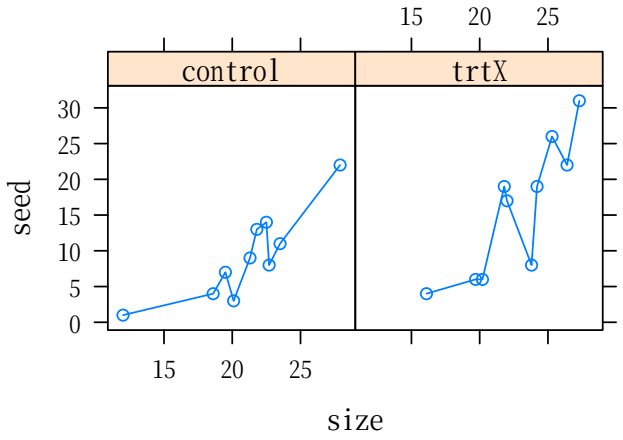
```
> dX <- d[d$treatment == "trtX",] # treatment が trtX のデータだけ
> dX <- dX[order(dX$size),] # size 順にならびかえる
> lines(dX$size, dX$seed, pch = 21, col = "red") # 線を追加
> legend("topleft", legend = levels(d$treatment),
        pch = c(21, 19), col = c("blue", "red"), lwd = 1)
```



# 3　その他あれこれ

- `pdf()`, `jpg()`, `png()` といった device 指定でいろいろな形式で図を出力できる
- R 作図に慣れてきたら，`library(lattice)` や `library(ggplot2)` で，より「全体像のみやすい」図を作ろう
  - `library(lattice)` を使った条件ごとプロットの例:

```
> d <- d[order(d$size),] # size 順にデータをならびかえ
> print(xyplot(seed ~ size | treatment, data = d, type = "b"))
```



# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (d)

## 一般化線形モデル: ポアソン回帰

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–15 17:56





## 今日のハナシ I

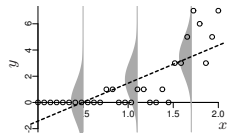




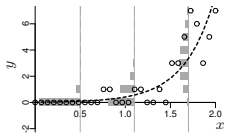


## 今日のハナシ II

正規分布・恒等リンク関数の統計モデル




ポアソン分布・log リンク関数の統計モデル





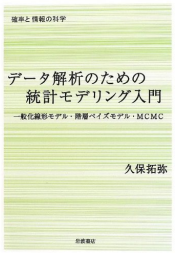



## 今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

今日はおもに「第 3 章 一般化線形モデル (GLM)」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








## 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)
- ……



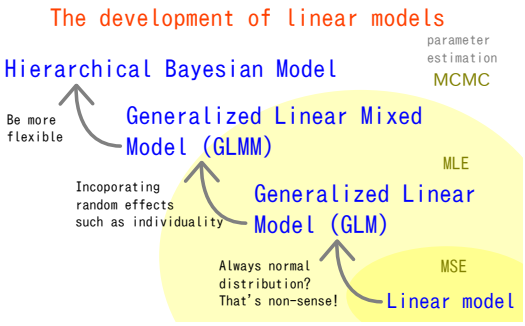


## 1. ポアソン回帰の統計モデル

応答変数 $y$ と説明変数 $x$

一般化線形モデルにとりくんでみる

## この授業であつかう統計モデルたち




Kubo Doctrine: "Learn the evolution of linear-model family, firstly!"

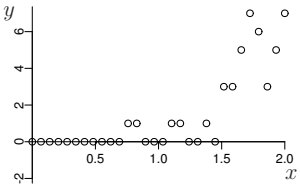




## 0 個, 1 個, 2 個と数えられるデータ

**カウントデータ** ($y \in \{0, 1, 2, 3, \cdots\}$ **なデータ**)

応答変数




説明変数

- たとえば $x$ は植物個体の大きさ，$y$ はその個体の花数
- 体サイズが大きくなると花数が増えるように見えるが……
- この現象を表現する統計モデルは?

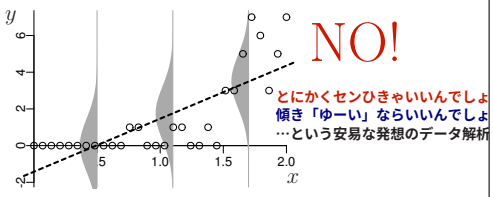




## 正規分布を使った統計モデル …… ムリがある?

**正規分布・恒等リンク関数の統計モデル**

応答変数




説明変数

- タテ軸のばらつきは「正規分布」なのか?
- $y$ の値は 0 以上なのに ……
- 平均値がマイナス?

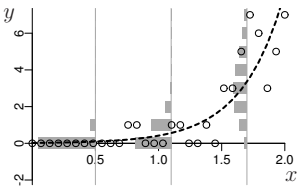




## ポアソン分布を使った統計モデルなら良さそう?!

**ポアソン分布・対数リンク関数の統計モデル**

応答変数




説明変数

- タテ軸に対応する「ばらつき」
- 負の値にならない「平均値」
- 正規分布を使ってるモデルよりましだね





## 2. ポアソン回帰の例題: 架空植物の種子数データ

**植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?**

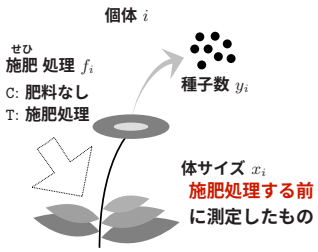
**まずはデータの概要を調べる**





## 個体サイズと実験処理の効果を調べる例題

- **応答変数**: **種子数** $\{y_i\}$
- **説明変数**:
  - 体サイズ $\{x_i\}$
  - 施肥処理 $\{f_i\}$




**標本数**

- **無処理** ($f_i$ = C): 50 sample ($i \in \{1, 2, \cdots 50\}$)
- **施肥処理** ($f_i$ = T): 50 sample ($i \in \{51, 52, \cdots 100\}$)

## データファイルを読みこむ

data3a.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("data3a.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

とりあえず data frame d を表示

```
> d
    y     x  f
1   6  8.31  C
2   6  9.44  C
3   6  9.50  C
... (中略) ...
99  7 10.86  T
100 9  9.97  T
```





## data frame d を調べる: 連続値と整数値

```
> d$x
  [1]  8.31  9.44  9.50  9.07 10.16  8.32 10.61 10.06
  [9]  9.93 10.43 10.36 10.15 10.92  8.85  9.42 11.11
... (中略) ...
 [97]  8.52 10.24 10.86  9.97

> d$y
  [1]  6  6  6 12 10  4  9  9  9 11  6 10  6 10 11  8
 [17]  3  8  5  5  4 11  5 10  6  6  7  9  3 10  2  9
... (中略) ...
 [97]  6  8  7  9
```





## data frame d を調べる: “因子型” のデータ

施肥処理の有無をあらわす f 列はちょっと様子がちがう

```
> d$f
  [1] C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
 [26] C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
 [51] T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T
 [76] T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T
Levels: C T
```

因子型データ: いくつかの水準をもつデータ
ここでは C と T の 2 水準





## R のデータのクラスとタイプ

```
> class(d) # d は data.frame クラス
[1] "data.frame"
> class(d$y) # y 列は整数だけの integer クラス
[1] "integer"
> class(d$x) # x 列は実数も含むので numeric クラス
[1] "numeric"
> class(d$f) # そして f 列は factor クラス
[1] "factor"
```





## data frame の summary()

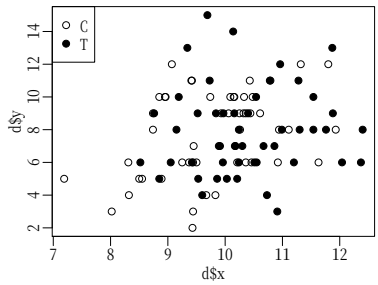
```
> summary(d)
       y               x           f
 Min.   : 2.00   Min.   : 7.190   C:50
 1st Qu.: 6.00   1st Qu.: 9.428   T:50
 Median : 8.00   Median :10.155
 Mean   : 7.83   Mean   :10.089
 3rd Qu.:10.00   3rd Qu.:10.685
 Max.   :15.00   Max.   :12.400
```





## データはとにかく図示する!

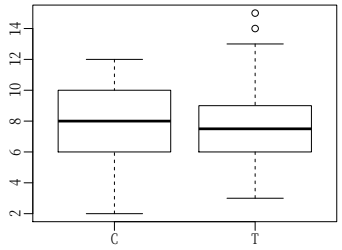
```
> plot(d$x, d$y, pch = c(21, 19)[d$f])
> legend("topleft", legend = c("C", "T"), pch = c(21, 19))
```




散布図

## 施肥処理 f を横軸とした図

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




箱ひげ図





## 3. GLM の詳細を指定する

確率分布・線形予測子・リンク関数

ポアソン回帰では log link 関数を使うのが便利





## 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?



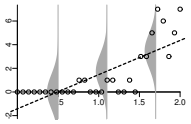


## GLM のひとつである直線回帰モデルを指定する

### 直線回帰のモデル

- 確率分布: 正規分布
- 線形予測子: e.g., $\beta_1 + \beta_2 x_i$

  直線の式: (切片) + (傾き) $\times x_i$
- リンク関数: 恒等リンク関数







## 結果 ← 原因 (かも?) を表現する線形モデル

- 結果: 応答変数
- 原因: 説明変数
- 線形予測子 (linear predictor):

(応答変数の平均) = 定数 (切片)
+ (係数 1) × (説明変数 1)
+ (係数 2) × (説明変数 2)
+ (係数 3) × (説明変数 3)
+ ···

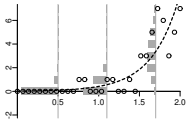




## GLM のひとつであるポアソン回帰モデルを指定する

### ポアソン回帰のモデル

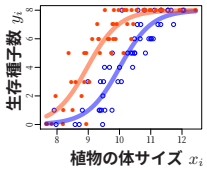
- 確率分布: ポアソン分布
- 線形予測子: e.g., $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- リンク関数: 対数リンク関数



## 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**








## R で一般化線形モデル (GLM) の推定を……

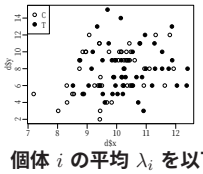
| | 確率分布 | 乱数発生 | GLM あてはめ |
|---|---|---|---|
| (離散) | ベルヌーイ分布 | `rbinom()` | `glm(family = binomial)` |
| | 二項分布 | `rbinom()` | `glm(family = binomial)` |
| | ポアソン分布 | `rpois()` | `glm(family = poisson)` |
| | 負の二項分布 | `rnbinom()` | `glm.nb()` in `library(MASS)` |
| (連続) | ガンマ分布 | `rgamma()` | `glm(family = gamma)` |
| | 正規分布 | `rnorm()` | `glm(family = gaussian)` |

- `glm()` で使える確率分布は上記以外もある
- GLM は直線回帰・重回帰・分散分析・ポアソン回帰・ロジスティック回帰その他の「よせあつめ」と考えてもよいかも





## さてさて，種子数の例題にもどって




種子数 $y_i$ は平均 $\lambda_i$ のポアソン分布にしたがう としましょう

$$p(y_i \mid \lambda_i) = \frac{\lambda_i^{y_i} \exp(-\lambda_i)}{y_i!}$$

個体 $i$ の平均 $\lambda_i$ を以下のようにおいてみたらどうだろう……?

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

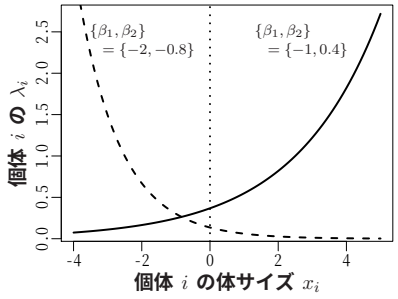
- $\beta_1$ と $\beta_2$ は係数 (パラメーター)
- $x_i$ は個体 $i$ の体サイズ，$f_i$ はとりあえず無視





## 指数関数ってなんだっけ?

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








## GLM のリンク関数と線形予測子 ← (直線の式)

**個体 $i$ の平均 $\lambda_i$**

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

$$\Updownarrow$$

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

$$\log(\text{平均}) = \text{線形予測子}$$

log リンク関数とよばれる理由は，上のようになっているから

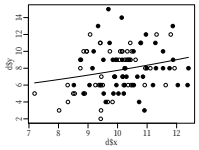




## この例題のための統計モデル

**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**: $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- **リンク関数**: **対数リンク関数**



# 4. R で GLM のパラメーターを推定

**あてはまりの良さは対数尤度関数で評価**

**推定計算はコンピューターにおまかせ**





## glm() 関数の指定

```
> d
    y     x  f
1   6  8.31  C
2   6  9.44  C
3   6  9.50  C
... (中略) ...
99  7 10.86  T
100 9  9.97  T
```

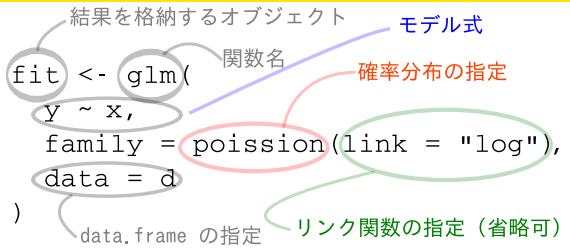
これだけ!

```
> fit <- glm(y ~ x, data = d, family = poisson)
```





## glm() 関数の指定の意味




- モデル式 (線形予測子 $z$): どの説明変数を使うか?
- link 関数: $z$ と応答変数 ($y$) 平均値 の関係は?
- family: どの確率分布を使うか?





## glm() 関数の出力

```
> fit <- glm(y ~ x, data = d, family = poisson)

all:  glm(formula = y ~ x, family = poisson, data = d)

Coefficients:
(Intercept)            x
     1.2917       0.0757

Degrees of Freedom: 99 Total (i.e. Null);  98 Residual
Null Deviance:^^I    89.5
Residual Deviance: 85 ^^IAIC: 475
```





## glm() 関数のくわしい出力

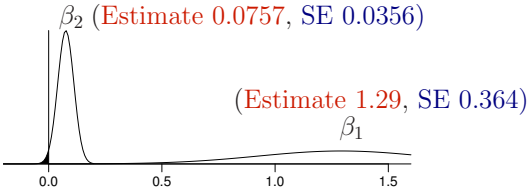
```
> summary(fit)
Call:
glm(formula = y ~ x, family = poisson, data = d)

Deviance Residuals:
   Min      1Q  Median      3Q     Max
-2.368  -0.735  -0.177   0.699   2.376

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)   1.2917     0.3637    3.55  0.00038
x             0.0757     0.0356    2.13  0.03358
```

…… (以下，省略) ……





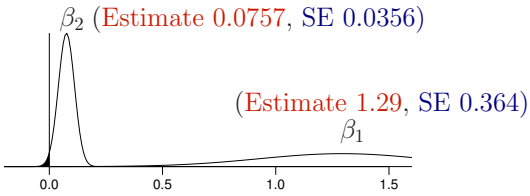
## 推定値と標準誤差のいめーじ (かなりいいかげんな説明)




- 確率 $p$ は ゼロからの距離 をあらわしている
- $p$ がゼロに近いほど 推定値 $\hat{\beta}$ はゼロから離れている
- $p$ が 0.5 に近いほど 推定値 $\hat{\beta}$ はゼロに近い

(注: 頻度主義的な信頼区間の正しい解釈はもっとめんどくさい)

## 推定値と標準誤差のいめーじ (何がめんどくさいの?)




- 区間 95% 内に「ゼロ」があるとしよう → 「だから何？」
- 多数のパラメーターがある場合には?
- 授業の後半であつかうベイズ統計モデルでの解釈は **簡単** ……になるはず……

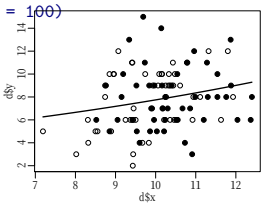




## モデルの予測

```
> fit <- glm(y ~ x, data = d, family = poisson)
...
Coefficients:
(Intercept)            x
     1.2917       0.0757

> plot(d$x, d$y, pch = c(21, 19)[d$f]) # data
> xp <- seq(min(d$x), max(d$x), length = 100)
> lines(xp, exp(1.2917 + 0.0757 * xp))
```

ここでは観測データと予測の関係を見ているだけ，なのだが








# 5. 処理をした・しなかった 効果も統計モデルに入れる

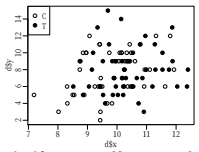
GLM の因子型説明変数

数量型 + 因子型 という組み合わせで





## 肥料の効果 $f_i$ もいれましょう




種子数 $y_i$ は平均 $\lambda_i$ のポアソン分布にしたがう としましょう

$$p(y_i \mid \lambda_i) = \frac{\lambda_i^{y_i} \exp(-\lambda_i)}{y_i!}$$

個体 $i$ の平均 $\lambda_i$ を次のようにする

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

- $\beta_3$ は施肥処理の効果 の 係数
- $f_i$ のダミー変数

$$d_i = \begin{cases} 0 & (f_i = \mathtt{C} \text{ の場合}) \\ 1 & (f_i = \mathtt{T} \text{ の場合}) \end{cases}$$





## glm(y ~ x + f, ...) の出力

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

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)   1.2631     0.3696    3.42  0.00063
x             0.0801     0.0370    2.16  0.03062
fT           -0.0320     0.0744   -0.43  0.66703
```

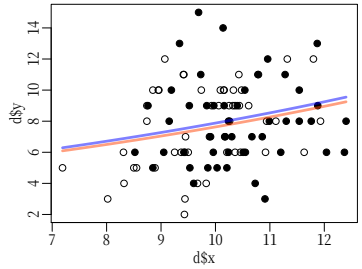
……（以下，省略）……





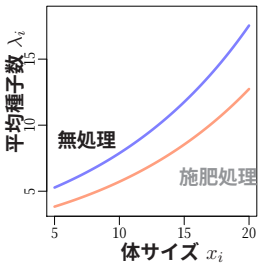
## x + f モデルの予測

```
> plot(d$x, d$y, pch = c(21, 19)[d$f]) # data
> xp <- seq(min(d$x), max(d$x), length = 100)
> lines(xp, exp(1.2631 + 0.0801 * xp), col = "blue", lwd = 3) # C
> lines(xp, exp(1.2631 + 0.0801 * xp - 0.032), col = "red", lwd = 3) # T
```



## 複数の説明変数をいれた場合の統計モデル

- $f_i = \mathtt{C}$: $\lambda_i = \exp(1.26 + 0.0801 x_i)$
- $f_i = \mathtt{T}$: $\lambda_i = \exp(1.26 + 0.0801 x_i - 0.032)$
  $= \exp(1.26 + 0.0801 x_i) \times \exp(-0.032)$

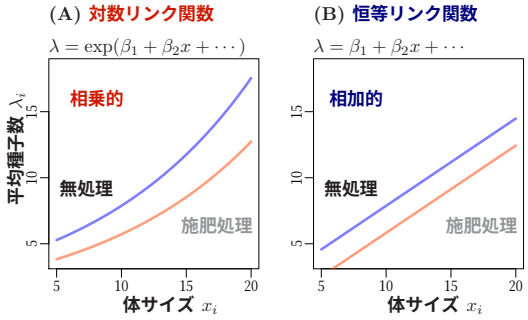



**施肥効果である $\exp(-0.032)$ は かけ算できくことに注意!**





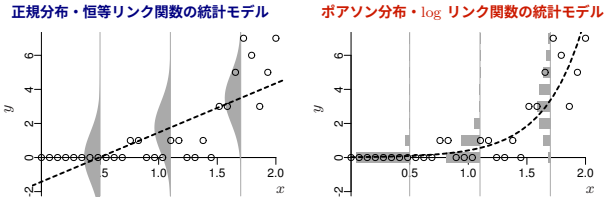
## リンク関数が違うとモデルの解釈が異なる







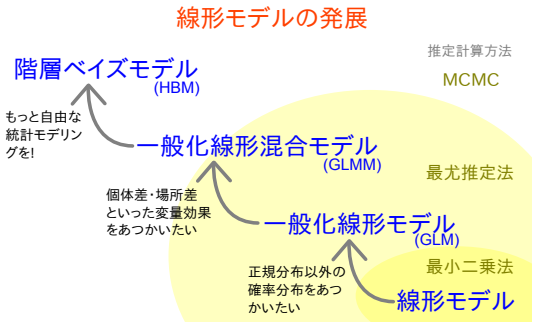

## GLM: 適切な確率分布 とリンク関数を選ぶ








## この講義であつかう統計モデルたち

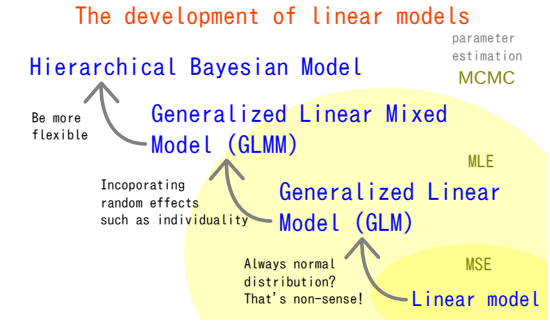



**データの特徴にあわせて線形モデルを改良・発展させる**





## この授業であつかう統計モデルたち



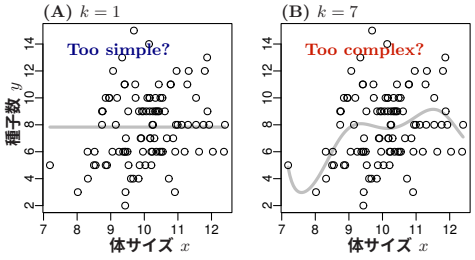

Kubo Doctrine: "Learn the evolution of linear-model family, firstly!"





## 次回予告

The next topic




**モデル選択と統計学的検定**

Model selection and statistical test

# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (e)

## モデル選択と検定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–18

ファイル更新時刻: 2016–09–16 11:55





## 今日のハナシ I







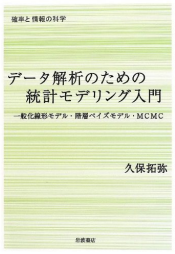
## 今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

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

(蛇足: マーケティングにおける A/B テストは統計学的な検定)

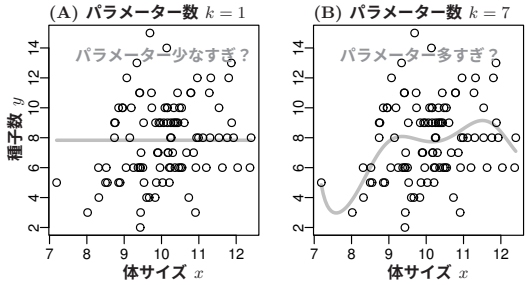
http://goo.gl/Ufq2








## 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 $k$?





## 1. 前回と同じ例題: 種子数データ

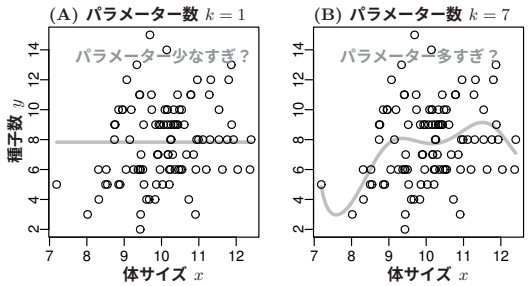
植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

まずはデータの概要を調べる





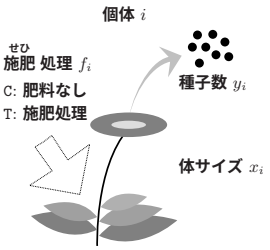
## パラメーター数 $k$ は多くても少なくてもヘン?




**"良いモデル" とはなにか? $k$ も重要なのか?**

## 個体サイズと実験処理の効果を調べる例題

- **応答変数**: **種子数** $\{y_i\}$
- **説明変数**:
  - **体サイズ** $\{x_i\}$
  - **施肥処理** $\{f_i\}$




**標本数**

- **無処理** ($f_i =$ C): 50 sample ($i \in \{1, 2, \cdots 50\}$)
- **施肥処理** ($f_i =$ T): 50 sample ($i \in \{51, 52, \cdots 100\}$)

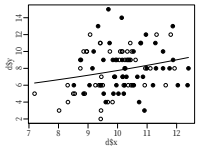




## この例題のための統計モデル

**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**: $\beta_1 + \beta_2 x_i + \beta_3 f_i$
- **リンク関数**: **対数リンク関数**

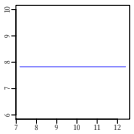






## 4 つの可能なモデル候補: (A) constant $\lambda$

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



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

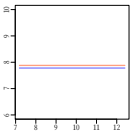
```
> logLik(glm(y ~ 1, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -237.64 (df=1)
```





## 4 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**

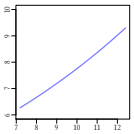
```
> logLik(glm(y ~ f, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -237.63 (df=2)
```





## 4 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**

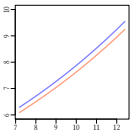
```
> logLik(glm(y ~ x, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -235.39 (df=2)
```





## 4 つの可能なモデル候補: (D) x + f model

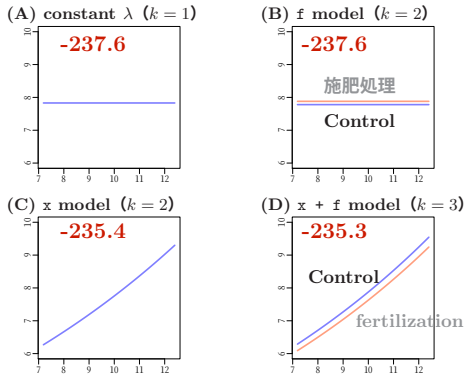
$$\lambda_i = \exp(\beta_1 + \beta_2 x_i + \beta_3 f_i)$$



**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)
```

## パラメーター数が多いとあてはまりが良い








## 2. AIC を使ったモデル選択

**あてはまりの悪さ**: deviance

**そして予測の悪さ**: AIC





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

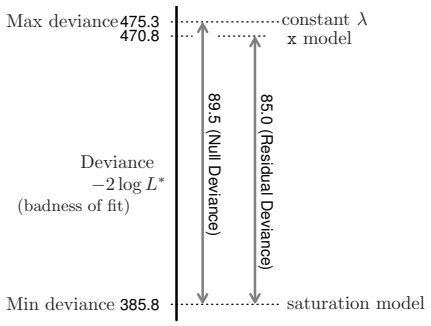
- Maximum log likelihood $\log L^*$: goodness of fit
- Deviance $D = -2 \log L^*$: badness of fit

| model | $k$ | $\log L^*$ | Deviance $-2 \log L^*$ | Residual deviance |
|---|---|---|---|---|
| constant $\lambda$ | 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, ...







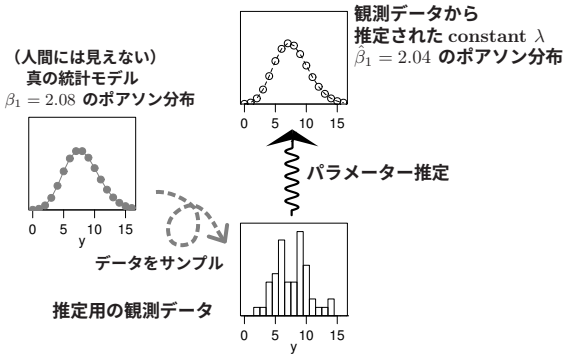

## 予測の悪さ: AIC $= -2 \log L^* + 2k$

AIC 最小のモデルを選ぶ

| model | $k$ | $\log L^*$ | Deviance $-2 \log L^*$ | Residual deviance | AIC |
|---|---|---|---|---|---|
| constant $\lambda$ | 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

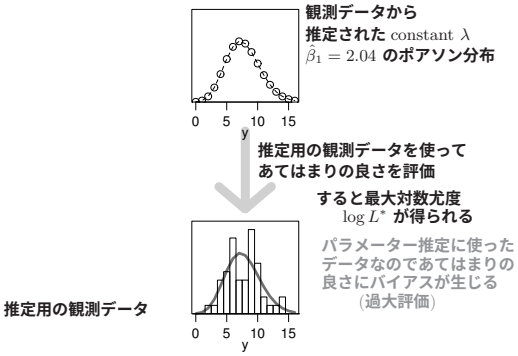
## 統計モデルによる推測って何だっけ?







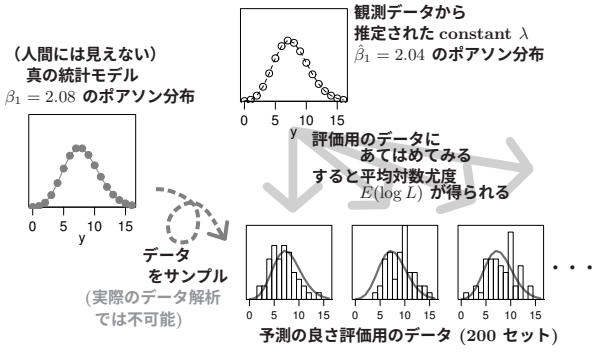

## 推定に使ったデータであてはまりを評価している?







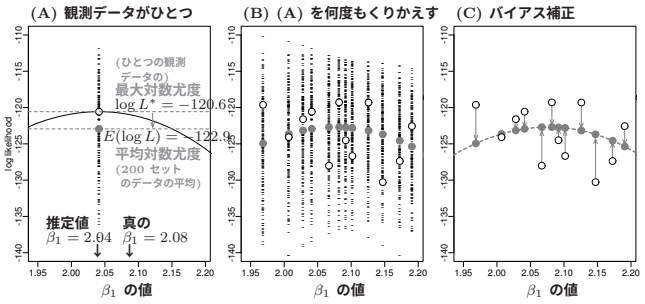

## 重要なこと: 新データがあてはまるかどうか







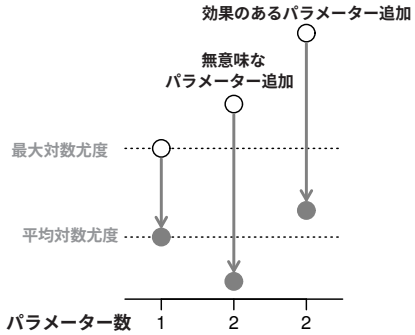

## シミュレイションで予測の良さを調べる








## バイアス補正を図示してみる








## 3. 統計学的な検定

### そして，その非対称性

ここでは 尤度比検定 を紹介

## 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





## モデル選択 と統計学的検定 は

## その目的がぜんぜんちがう





目的?

**モデル選択: よい予測をするモデルの探索**

**統計学的検定: 帰無仮説の排除**





統計学的な検定 (Neyman-Pearson framework)

statistical test

Null hypothesis

帰無仮説

glm(y ~ 1) is better!

VS

Alternative hypothesis

対立仮説

glm(y ~ x) is better!

どうでもいい … 興味ない…

重要！これを主張したい！

非対称性 asymmetricity?





統計学的な検定 (Neyman-Pearson framework)

statistical test

Null hypothesis

帰無仮説

glm(y ~ 1) is better!

VS

Alternative hypothesis

対立仮説

glm(y ~ x) is better!

test!

(if ...) reject 棄却 ------ support 支持

非対称性 asymmetricity?





統計学的な検定 (Neyman-Pearson framework)

statistical test

Null hypothesis

帰無仮説

glm(y ~ 1) is better!

VS

Alternative hypothesis

対立仮説

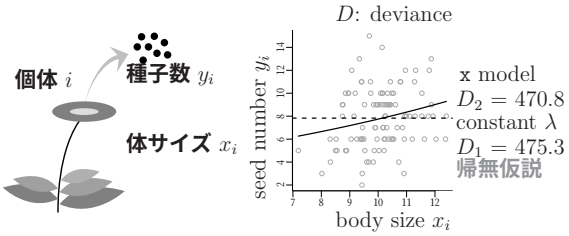
glm(y ~ x) is better!

test!

(if ...) NOT reject ------ Say Nothing!?

非対称性 asymmetricity?

## また同じ例題




(施肥処理は無視!)





## 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 $\lambda$ | 1 | -237.6 | $D_1 = 475.3$ | 帰無仮説 |
| x | 2 | -235.4 | $D_2 = 470.8$ | 対立仮説 |

**検定の非対称性**: **帰無仮説はゴミあつかい**
**……にもかかわらず，帰無仮説だけをしつこく調べる**





## 帰無仮説のつくりかた

**対立仮説の中に帰無仮説がある**
**(ネストした関係)**

- カウントデータ $\{y_i\}$ は平均である $\lambda_i$ のポアソン分布に従う
- **対立仮説の一例**: $\log \lambda_i = \beta_1 + \beta_2 x_i$
- ネストした **帰無仮説**: $\log \lambda_i = \beta_1$ (**切片だけのモデル**)





## 検定の目的: 帰無仮説の棄却

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 |

**検定の非対称性**: **第一種の過誤だけに注目**



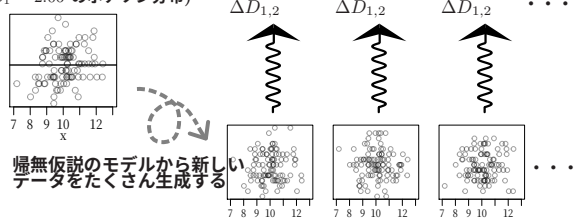


## $\Delta D_{1,2}$ の分布を生成: ブートストラップ尤度比検定

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 $\lambda$ 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）





## ブートストラップ法って何?

**コンピューターに大量の乱数を発生させる**
**チカラまかせの方法**

- 計算機に莫大な数の乱数を発生させる→パターン生成
- (例 1): 確率分布の乱数の和 → 正規分布?
- (例 2): この回の例題の $\Delta D_{1,2}$ の確率分布

## 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
```

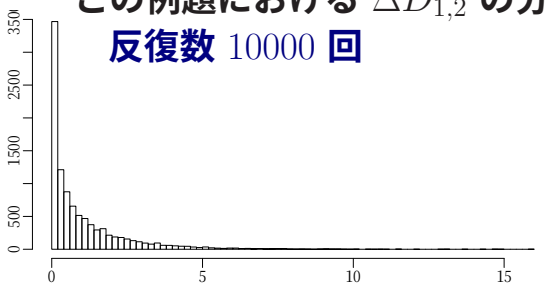
- `rpois()` によるポアソン乱数の生成 (架空データ)
- 架空データを使って `glm()` あてはめ





## パラメトリック・ブートストラップの結果

**この例題における $\Delta D_{1,2}$ の分布**
**反復数 10000 回**



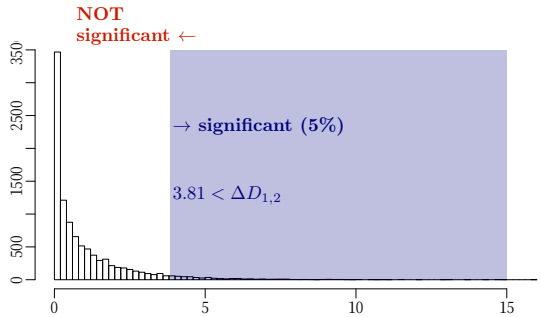





## あらかじめ棄却域を決めておく

**たとえば** 5% **とか**? — **(注)** "5%" **には 何の意味も正当化もない**

…… てきとーに決めただけ ……







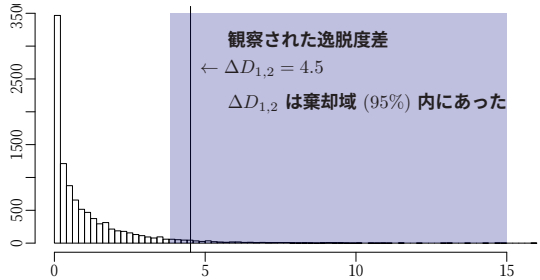

## A random $\Delta D_{1,2}$ generator in R

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

(R code is in the next page)





## Probability$\{\Delta D_{1,2} \geq 4.5\} = \frac{332}{10000} = 0.0332$

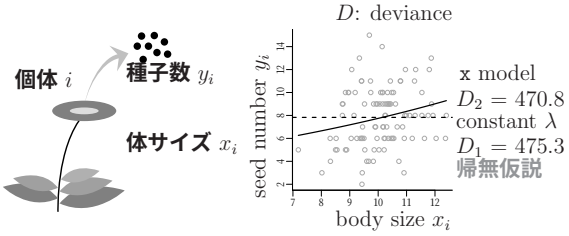
```
> source("pb.R") # reading "pb.R" text file
> dd12 <- pb(d, n.bootstrap = 10000)
> hist(dd12, 100) # to plot histogram
> abline(v = 4.5, lty = 2)
> sum(dd12 >= 4.5)
[1] 332
```

so-called "$P$-value" is 0.0332.

## In this case, 帰無仮説 is rejected

So we can state that 対立仮説 can be accepted.

x model is better than constant $\lambda$.








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

何も結論できない ……

$\lambda$ 一定のモデルが良いとは言えない

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





## 「検定」問題あれこれ

- 統計学的な検定はうまいアイデアだが，誤用も多い
- 帰無仮説は何があっても受容されない
- $p = 0.01$ は $p = 0.0001$ より「えらい」わけではない
- 統計モデルをまちがえると $p$ 値の分布がゆがむ
- 無意味な $p < 0.05$ にこだわるあまり $p$ hacking という詐術が発達 — $p = 0.04$ ぐらい，という論文がやたらと多い





## FAQ モデル選択

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

# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (f)

## 一般化線形モデル: ロジスティック回帰

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–19

ファイル更新時刻: 2016–09–15 17:56





## 今日のハナシ 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



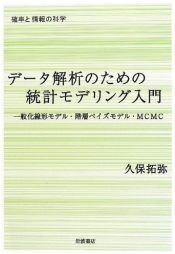


## 今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

今日はおもに「第 6 章 GLM の応用範囲をひろげる」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

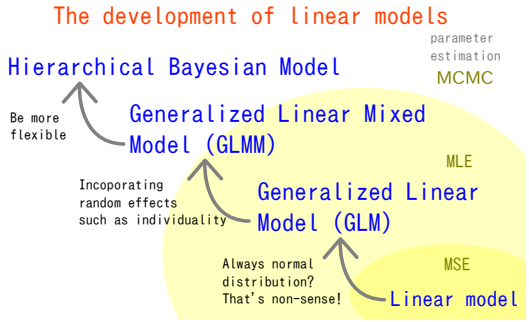
http://goo.gl/Ufq2








## この授業であつかう統計モデルたち




Kubo Doctrine: "Learn the evolution of linear-model family, firstly!"





## 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)

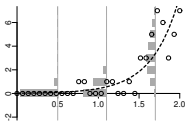
- 確率分布は?
- 線形予測子は?
- リンク関数は?

もくじ

## 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**



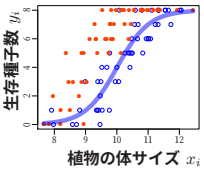


もくじ

## 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**

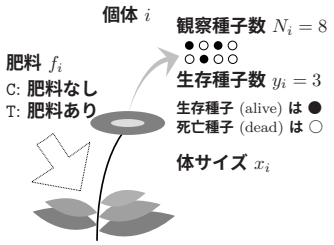
$$y_i \in \{0, 1, 2, \cdots, 8\}$$





## 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/2015/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**



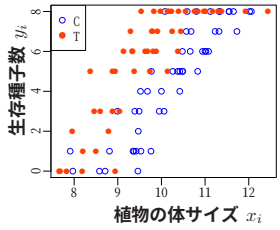


## data frame d を調べる

```
> 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



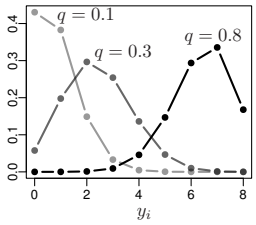


## 二項分布: $N$ 回のうち $y$ 回，となる確率

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

$\binom{N}{y}$ 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 $p(y_i \mid 8, q)$





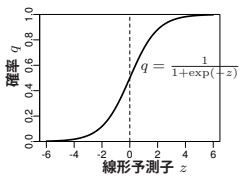



## ロジスティック曲線とはこういうもの

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")
```

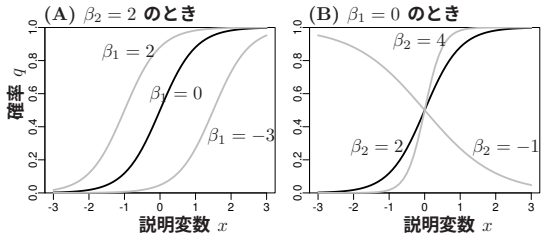







## パラメーターが変化すると……

黒い曲線は $\{\beta_1, \beta_2\} = \{0, 2\}$. (A) $\beta_2 = 2$ と固定して $\beta_1$ を変化させた場合. (B) $\beta_1 = 0$ と固定して $\beta_2$ 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 $0 \le q \le 1$ となる便利な関数





## logit link function

- logistic 関数

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

- logit 変換

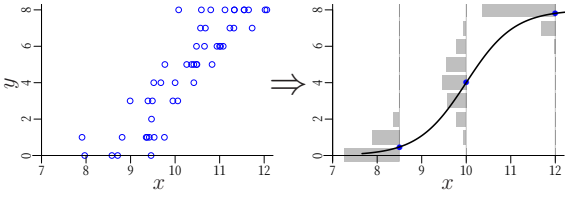
$$\mathrm{logit}(q) = \log \frac{q}{1-q} = \beta_1 + \beta_2 x$$

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 — $\beta_1$ と $\beta_2$ 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



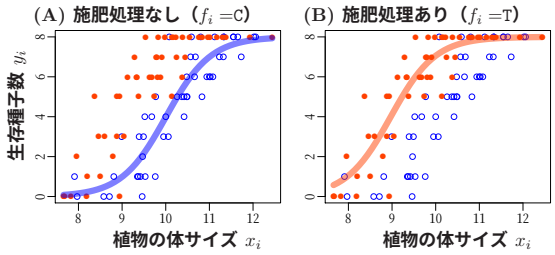

```
> glm(cbind(y, N - y) ~ x + f, data = d, family = binomial)
...
Coefficients:
(Intercept)            x           fT
    -19.536        1.952        2.022
```





## 統計モデルの予測: 施肥処理によって応答が違う

(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

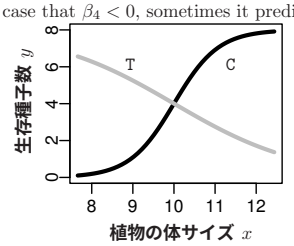




## 交互作用項とは何か?

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

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



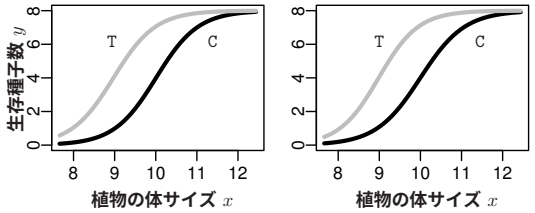





## この例題データの場合，交互作用はない

```
^^I          glm(y ~ x + f, ...)      glm(y ~ x + f + x:f, ...)
```

(A) 交互作用のないモデル (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

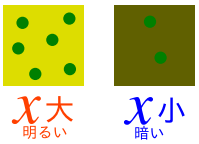
- **避けにくい割算値**
  - 測定機器が内部で割算した値を出力する場合
  - 割算値で作図せざるをえない場合があるかも





## 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

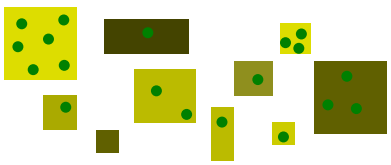



これだけなら単純に `glm(..., family = poisson)` とすればよいのだが ……





## 「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



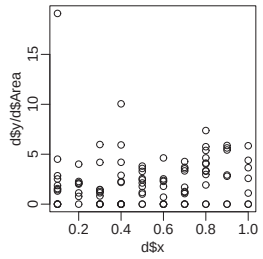


## R の data.frame: 面積 Area, 明るさ x, 個体数 y

```
> 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)
```



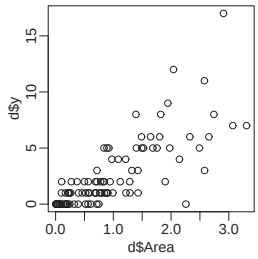

いまいちよくわからない ……





## 面積 $A$ vs 個体数 $y$ の図

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



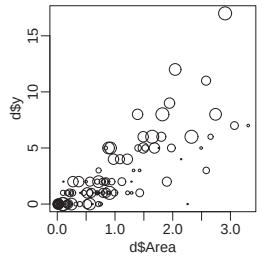

面積 $A$ とともに区画内の個体数 $y$ が増大するようだ





## 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)
```

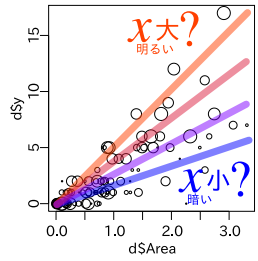



同じ面積でも明るいほど個体数が多い?





## 密度が明るさ $x$ に依存する統計モデル



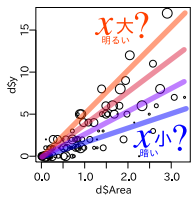

- 区画内の個体数 $y$ の平均は面積 $\times$ 密度
- 密度は明るさ $x$ で変化する





## 「平均個体数 = 面積 $\times$ 密度」モデル

1. ある区画 $i$ の応答変数 $y_i$ は平均 $\lambda_i$ 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 $\lambda_i$ 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

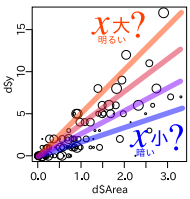
このとき $\log(A_i)$ を offset 項とよぶ (係数 $\beta$ がない)





## 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 $z = \beta_1 + \beta_2$ `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 $\lambda$ とすると $\log(\lambda) = z$
  つまり $\lambda = \exp(z) = \exp(\beta_1 + \beta_2$ `x` $+$ `log(Area)`$)$
- 応答変数 は平均 $\lambda$ のポアソン分布に従う:

## glm() 関数の指定

```
fit <- glm(
  y ~ x,
  family = poission(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）





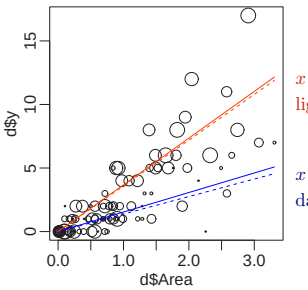
## R の glm() 関数による推定結果

```
> 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




$x = 0.9$
light environment

$x = 0.1$
dark environment

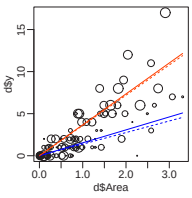
- 実線は glm() の推定結果にもとづく予測
- 破線はデータ生成時に指定した関係

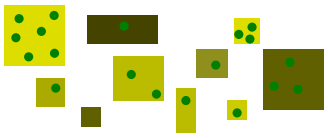




## まとめ: glm() の offset 項わざで「脱」割算

- 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

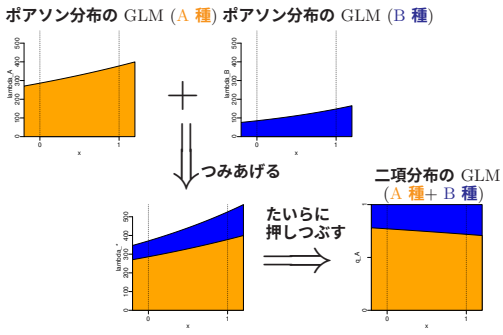
- **避けられる割算値**
  - 確率
    例: $N$ 個のうち $k$ 個にある事象が発生する確率
    対策: ロジスティック回帰など**二項分布モデル**で
  - 密度などの指数
    例: 人口密度，specific leaf area (SLA) など
    対策: **offset 項わざ** — 統計モデリングの工夫!



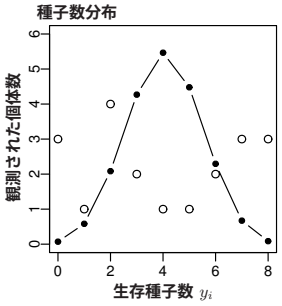


## 時間があれば分割表の統計モデリング

図解: ポアソン分布 GLM・二項分布 GLM のつながり



# 次回予告 The next topic




$N$ 個のうち $y$ 個
…という形式のデータ
なのに
二項分布ではまったく
説明できない?

## 階層ベイズモデル
Hierarchical Bayesian Model (HBM)

# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (g)

## 階層ベイズモデル Hierarchical Bayesian Model

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

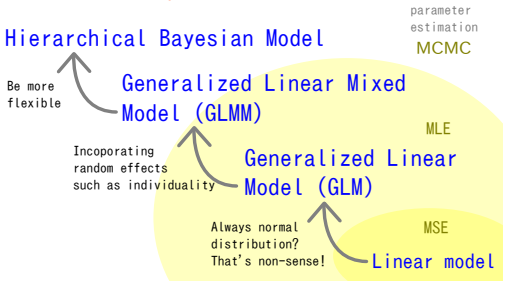
2016–09–19

ファイル更新時刻: 2016–09–15 17:56



## 今日の統計モデル: 階層ベイズモデル

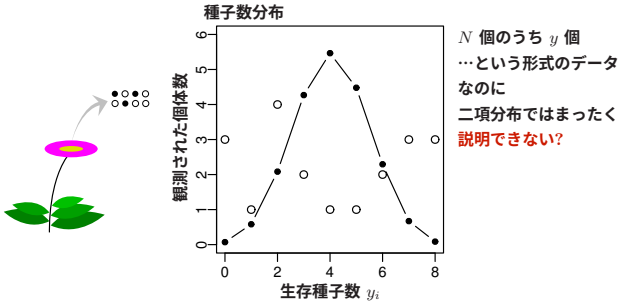
The development of linear models




そして Markov Chain Monte Carlo (MCMC)
を使った Bayesian Estimation (ベイズ推定)



## Why? GLM is not enough ...




$N$ 個のうち $y$ 個
…という形式のデータ
なのに
二項分布ではまったく
説明できない?

**階層ベイズモデルが必要!**

Apply Hierarchical Bayesian Model (HBM)!





## 今日のハナシ







## 1. MCMC サンプリングのための例題

logistic regression: binomial distribution

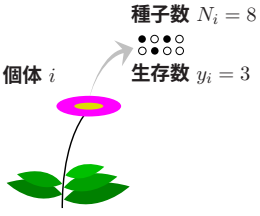
and logit link function





## 例題: 植物の種子の生存確率

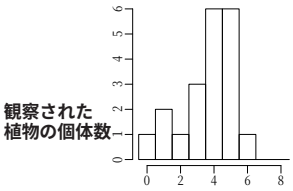
- 架空植物の種子の生存を調べた
- 種子: 生きていれば発芽する
  - どの個体でも 8 個 の種子を調べた
- 生存確率: ある種子が生きている確率




- 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 |




生存していた種子数 $y_i$

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 $L(q \mid$ 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



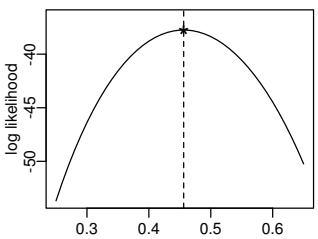


## 最尤推定 (MLE) とは何か

- 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

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

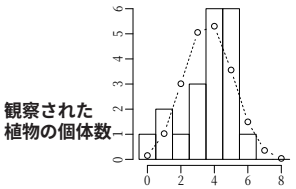







## 二項分布で説明できる 8 種子中 $y_i$ 個の生存

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




生存していた種子数 $y_i$

## 2. 同じような推定を MCMC でやってみる

最尤推定と Markov chain Monte Carlo (MCMC) はちがう!

そして “なんとなーく” ベイズ統計モデルと関連づけ





## ここでやること: 尤度と MCMC の関係を考える

- さきほどの簡単な例題 (生存確率) のデータ解析を
- 最尤推定ではなく
- Markov chain Monte Carlo (MCMC) 法のひとつである**メトロポリス法** (Metropolis method) であつかう
- 得られる結果: 「パラメーターの値の分布」……??

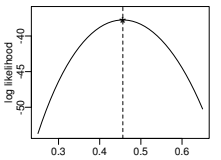
MCMC をもちださなくてもいい簡単すぎる問題
説明のためあえてメトロポリス法を適用してみる



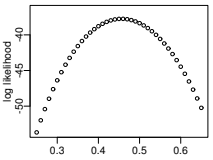


## メトロポリス法を説明するための準備

連続的な対数尤度関数 $\log L(q)$




離散化: $q$ がとびとびの値をとる




**説明を簡単にするため**
**生存確率 $q$ の軸を離散化する**

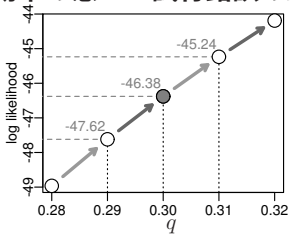
(実際には離散化する必要などない)





## 試行錯誤による $q$ の最尤推定値の探索

### ちょっと効率の悪い「試行錯誤の最尤推定」




1. $q$ の値の「行き先」を「両隣」どちらかにランダムに決める
2. 「行き先」が現在の尤度より高ければ，$q$ の値をそちらに変更
3. 尤度が変化しなくなるまで (1), (2) をくりかえす





## メトロポリス法のルール: この例題の場合

1. パラメーター $q$ の初期値を選ぶ
   (ここでは $q$ の初期値が 0.3)
2. $q$ を増やすか減らすかをランダムに決める
   (新しく選んだ $q$ の値を $q_{\text{new}}$ としましょう)
3. $q_{\text{new}}$ における尤度 $L(q_{\text{new}})$ ともとの尤度 $L(q)$ を比較
   - $L(q_{\text{new}}) \geq L(q)$ (あてはまり改善): $q \leftarrow q_{\text{new}}$
   - $L(q_{\text{new}}) < L(q)$ (あてはまり改悪):
     - 確率 $r = L(q_{\text{new}})/L(q)$ で $q \leftarrow q_{\text{new}}$
     - 確率 $1 - r$ で $q$ を変更しない
4. 手順 2. にもどる

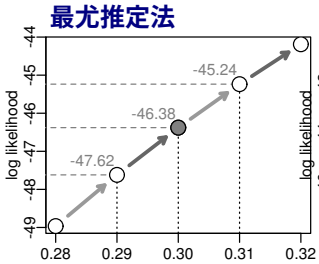
($q = 0.01$ や $q = 0.99$ でどうなるんだ，といった問題は省略)



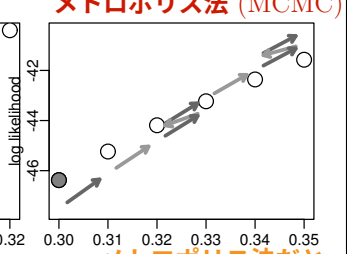


## メトロポリス法のルールで $q$ を動かす

**最尤推定法**



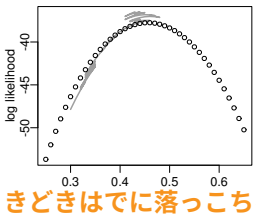

**メトロポリス法 (MCMC)**




**メトロポリス法だと**
**「単調な山のぼり」にはならない**

## 対数尤度関数の「山」でうろうろする $q$ の値

**メトロポリス法 (そして一般の MCMC) は**
**最適化ではない**

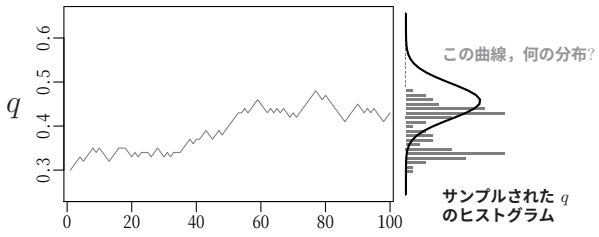



**ときどきはでに落っこちる**
**何のためにこんなことをやるのか?**
**$q$ の変化していく様子を記録してみよう**





## ステップごとに $q$ の値をサンプリング



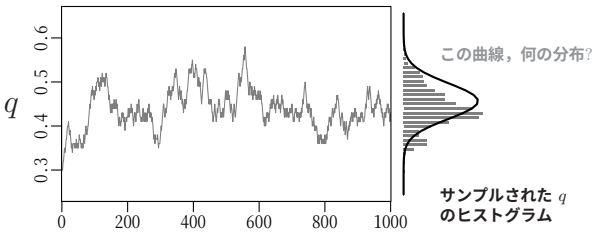

MCMC 試行錯誤の回数

**もっと試行錯誤してみたほうがいいのかな?**





## もっと長くサンプリングしてみる



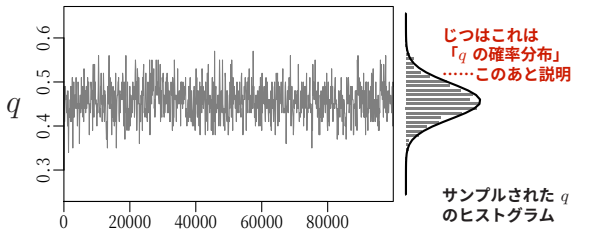

MCMC 試行錯誤の回数

**まだまだ……?**





## もっともっと長くサンプリングしてみる




MCMC 試行錯誤の回数

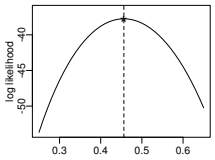
**なんだか，ある「山」のかたちにまとまったぞ?**



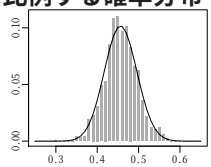


## MCMC は何をサンプリングしている?

**対数尤度 $\log L(q)$**




**尤度 $L(q)$ に**
**比例する確率分布**



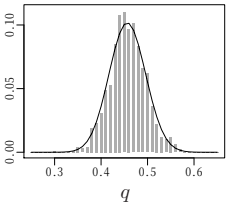

**尤度に比例する確率分布からのランダムサンプル**

**最尤推定はパラメーターの値の点推定**
MCMC は “パラメーターの事後分布” (←推定したいこと)
**は こういう分布ですよ と推定している**





## MCMC の結果として得られた $q$ の経験分布



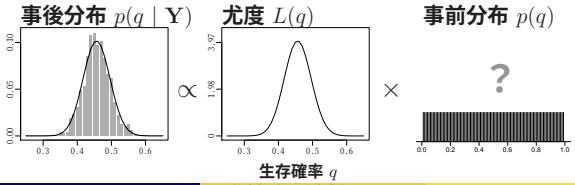

- **データと統計モデル (二項分布) を決めて，MCMC サンプリングすると，$p(q)$ からのランダムサンプルが得られる**
- **このランダムサンプルをもとに，$q$ の平均や 95% 区間などがわかる— 便利じゃないか!**

## ベイズ統計モデルの推定

**統計モデルとデータにもとづいて事後分布の推定**

- パラメーター数の少ないベイズモデルであれば，尤度の数値計算やメトロポリス法で可能
- パラメーター数の多い複雑な統計モデルであれば，**あとで説明する** サンプリングソフトウェアを使用する

事後分布 $p(q \mid \mathrm{Y})$ 尤度 $L(q)$ 事前分布 $p(q)$




生存確率 $q$





## 3. Softwares for MCMC sampling

"Gibbs sampling" などが簡単にできるような……

事後分布から効率よくサンプリングしたい





## 統計ソフトウェア R

http://www.r-project.org/





## 簡単な GLMM なら R だけで推定可能

- R にはいろいろな GLMM の最尤推定関数が準備されている ……
  - `library(glmmML)` の `glmmML()`
  - `library(lme4)` の `lmer()`
  - `library(nlme)` の `nlme()` (正規分布のみ)
- しかし **もうちょっと複雑な** GLMM，たとえば個体差 + 地域差をいれた統計モデルの最尤推定は **かなり難しい** (ヘンな結果が得られたりする)
- 積分がたくさん入っている尤度関数の評価がしんどい





## どのようなソフトウェアで MCMC 計算するか?

1. 自作プログラム
   - 利点: 問題にあわせて自由に設計できる
   - 欠点: 階層ベイズモデル用の MCMC プログラミング，けっこうめんどう
2. R のベイズな package
   - 利点: 空間ベイズ統計など便利な専用 package がある
   - 欠点: 汎用性，とぼしい
3. "BUGS" で "Gibbs sampler" なソフトウェア
   - 利点: 幅ひろい問題に適用できて，便利
   - 欠点というほどでもないけど，多少の勉強が必要
   - えーっと "Gibbs sampler" って何?





## さまざまな MCMC アルゴリズム

いろいろな MCMC

- **メトロポリス法**: 試行錯誤で値を変化させていく MCMC
  - メトロポリス・ヘイスティングス法: その改良版
- **ギブス・サンプリング**: 条件つき確率分布を使った MCMC
  - 複数の変数 (パラメーター・状態) を効率よくサンプリング

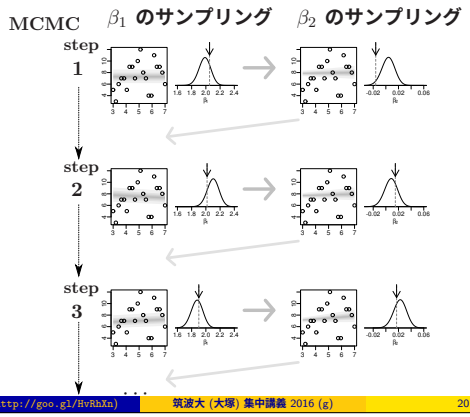
## Gibbs sampling とは何か?

- MCMC アルゴリズムのひとつ
- 複数のパラメーターの MCMC サンプリングに使う
- 例: パラメーター $\beta_1$ と $\beta_2$ の Gibbs sampling
  1. $\beta_2$ に何か適当な値を与える
  2. $\beta_2$ の値はそのままにして，その条件のもとでの $\beta_1$ の MCMC sampling をする (条件つき事後分布)
  3. $\beta_1$ の値はそのままにして，その条件のもとでの $\beta_2$ の MCMC sampling をする (条件つき事後分布)
  4. 2. – 3. をくりかえす
- 教科書の第 9 章の例題で説明





## 図解: Gibbs sampling (統計モデリング入門の第 9 章)








## 便利な "BUGS" 汎用 Gibbs sampler たち

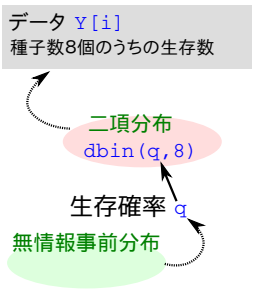
- BUGS 言語 (+ っぽいもの) でベイズモデルを記述できるソフトウェア
  - WinBUGS — 歴史を変えて……さようなら?
  - OpenBUGS — 予算が足りなくて停滞?
  - JAGS — お手軽で良い，どんな OS でも動く
  - Stan — いま一番の注目
    — 今日は紹介しませんが ……
- リンク集: `http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/ce/BayesianMcmc.html`

えーと……BUGS 言語って何?





## このベイズモデルを BUGS 言語で記述したい




BUGS 言語コード

```
for (i in 1:N.sample) {
  Y[i] ~ dbin(q, 8)
}
q ~ dunif(0.0, 1.0)
```

矢印は手順ではなく，依存関係をあらわしている

BUGS 言語: ベイズモデルを記述する言語

Spiegelhalter et al. 1995. BUGS: Bayesian Using Gibbs Sampling version 0.50.





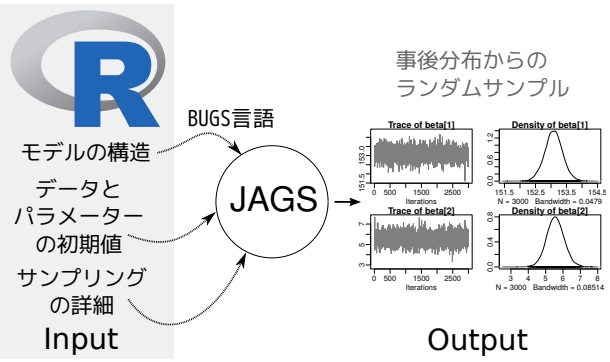
## いろいろな OS で使える JAGS4.2.0

- R core team のひとり Martyn Plummer さんが開発
  - Just Another Gibbs Sampler
- C++ で実装されている
  - R がインストールされていることが必要
- Linux, Windows, Mac OS X バイナリ版もある
- 開発進行中
- R からの使う: `library(rjags)`





## JAGS を R の "したうけ" として使う



## R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (1 / 3)

```
library(rjags)
library(R2WinBUGS) # to use write.model()

model.bugs <- function()
{
  for (i in 1:N.data) {
    Y[i] ~ dbin(q, 8) # 二項分布にしたがう
  }
  q ~ dunif(0.0, 1.0) # q の事前分布は一様分布
}
file.model <- "model.bug.txt"
write.model(model.bugs, file.model) # ファイル出力

# 次につづく……
```





## R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (2 / 3)

```
load("mcmc.RData") # (data.RData ではなく mcmc.RData!!)
list.data <- list(Y = data, N.data = length(data))
inits <- list(q = 0.5)
n.burnin <- 1000
n.chain <- 3
n.thin <- 1
n.iter <- n.thin * 1000

model <- jags.model(
  file = file.model, data = list.data,
  inits = inits, n.chain = n.chain
)

# まだ次につづく……
```





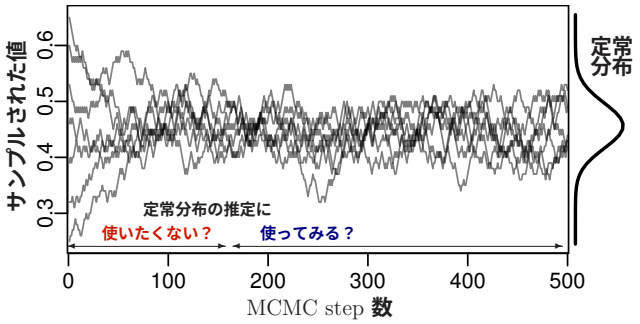
## R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (3 / 3)

```
# burn-in
update(model, n.burnin) # burn in

# サンプリング結果を post.mcmc.list に格納
post.mcmc.list <- coda.samples(
  model = model,
  variable.names = names(inits),
  n.iter = n.iter,
  thin = n.thin
)
#  おわり
```





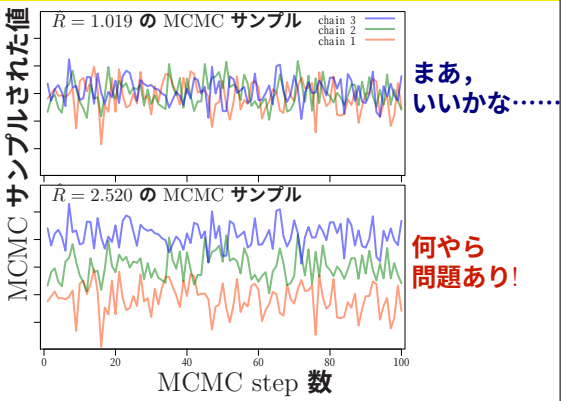
## burn in って何? → 「使いたくない」長さの指定








## 試行間で差がないかを「診断」する





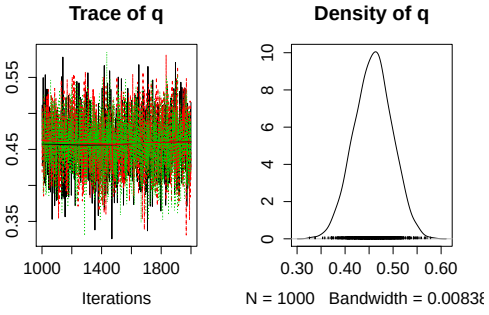



## 収束診断の $\hat{R}$ 指数

- `gelman.diag(post.mcmc.list)` → 実演表示
- R-hat は Gelman-Rubin の収束判定用の指数
  - $\hat{R} = \sqrt{\frac{\hat{\mathrm{var}}^+(\psi|y)}{W}}$
  - $\hat{\mathrm{var}}^+(\psi|y) = \frac{n-1}{n}W + \frac{1}{n}B$
  - $W$ : サンプル列内の variance の平均
  - $B$ : サンプル列間の variance
  - Gelman et al. 2004. Bayesian Data Analysis. Chapman & Hall/CRC

## Gibbs sampling → 事後分布の推定

- `plot(post.mcmc.list)`








## 4. GLMM と階層ベイズモデル

### GLMM のベイズモデル化

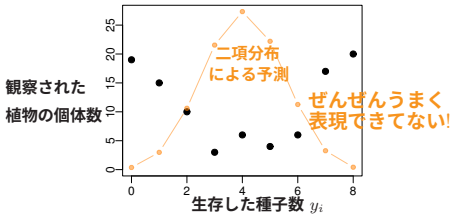
階層ベイズモデルとなる





## 二項分布では説明できない観測データ!

100 個体の植物の合計 800 種子中 403 個の生存が見られたので，平均生存確率は 0.50 と推定されたが……




さっきの例題と同じようなデータなのに?

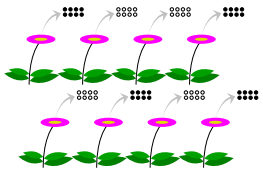
(「統計モデリング入門」第 10 章の最初の例題)

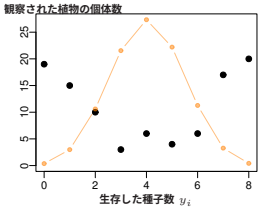




## 個体差 → 過分散 (overdispersion)

極端な過分散の例






- 種子全体の平均生存確率は 0.5 ぐらいかもしれないが……
- 植物個体ごとに種子の生存確率が異なる: 「個体差」
- 「個体差」があると overdispersion が生じる
- 「個体差」の原因は観測できない・観測されていない





## モデリングやりなおし: 個体差を考慮する

- 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 $y_i$ 個が生存する確率は二項分布

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

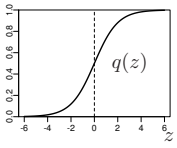
- ここで仮定していること
  - 個体差があるので個体ごとに生存確率 $q_i$ が異なる





## GLM わざ: ロジスティック関数で表現する生存確率

- 生存確率 $q_i = q(z_i)$ をロジスティック関数 $q(z) = 1/\{1+\exp(-z)\}$ で表現




- 線形予測子 $z_i = a + r_i$ とする
  - パラメーター $a$: 全体の平均
  - パラメーター $r_i$: 個体 $i$ の個体差 (ずれ)

## 個々の個体差 $r_i$ を最尤推定するのはまずい

**パラメーター数 $>$ サンプルサイズ**

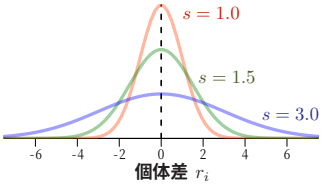
- 100 個体の生存確率を推定するために**パラメーター 101 個** ($a$ と $\{r_1, r_2, \cdots, r_{100}\}$) を推定すると……
- 個体ごとに生存数 / 種子数を計算していることと同じ! (「データのよみあげ」と同じ)

**そこで，次のように考えてみる**





## $\{r_i\}$ のばらつきは正規分布だと考えてみる



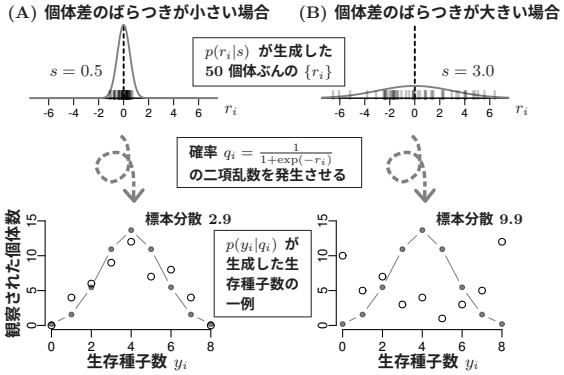

$$p(r_i \mid s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2s^2}\right)$$

この確率密度 $p(r_i \mid s)$ 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」.





## ひとつの例示: 個体差 $r_i$ の分布と過分散の関係

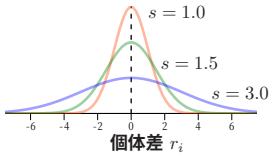







## これは $r_i$ の事前分布の指定，ということ

前回の講義で $\{r_i\}$ は正規分布にしたがうと仮定したが
ベイズ統計モデリングでは 「100 個の $r_i$ たちに
共通する事前分布として正規分布 を指定した」
ということになる




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





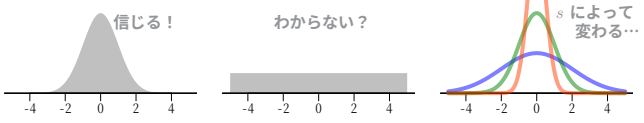
## ベイズ統計モデルでよく使われる三種類の事前分布

たいていのベイズ統計モデルでは，ひとつのモデルの中で複数の種類の事前分布を混ぜて使用する．

(A) 主観的な事前分布
(できれば使いたくない!)

(B) 無情報事前分布

(C) 階層事前分布

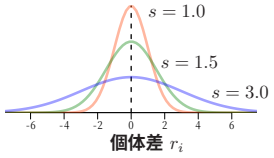






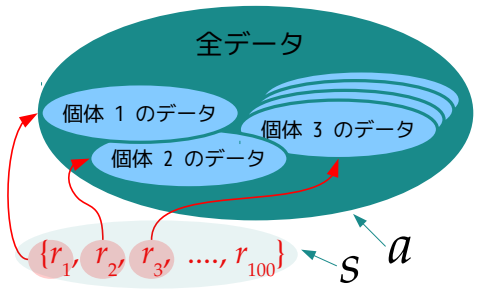

## $r_i$ の事前分布として階層事前分布を指定する

**階層事前分布の利点**
**「データにあわせて」事前分布が変形!**




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

## 統計モデルの大域的・局所的なパラメーター



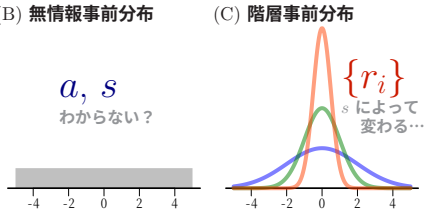

データのどの部分を説明しているのか?





## パラメーターごとに適切な事前分布を選ぶ

(B) 無情報事前分布 (C) 階層事前分布

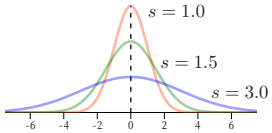



| パラメーターの種類 | 説明する範囲 | 事前分布 |
|---|---|---|
| 全体に共通する平均・ばらつき | 大域的 | 無情報事前分布 |
| 個体・グループごとのずれ | 局所的 | 階層事前分布 |





## 個体差 $\{r_i\}$ のばらつき $s$ の無情報事前分布

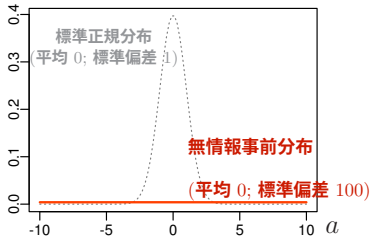



- $s$ はどのような値をとってもかまわない
- そこで $s$ の事前分布は **無情報事前分布** (non-informative prior) とする
- たとえば一様分布，ここでは $0 < s < 10^4$ の一様分布としてみる





## 全個体の「切片」 $a$ の無情報事前分布



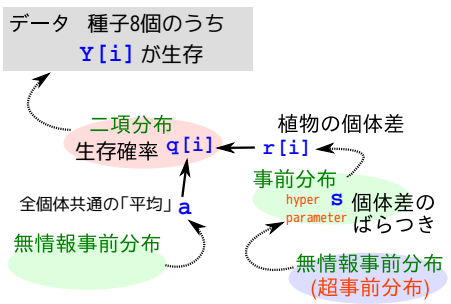

「生存確率の (logit) 平均 $a$ は何でもよい」と表現している





## 階層ベイズモデル: 事前分布の階層性

超事前分布 → 事前分布という階層があるから




矢印は手順ではなく，依存関係をあらわしている





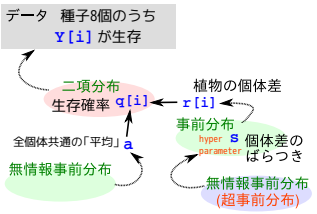
## 5. 階層ベイズモデルの推定

### ソフトウェア JAGS を使ってみる

R の “したうけ” として JAGS を使う

## 階層ベイズモデルを BUGS コードで記述する

```
model
{
  for (i in 1:N.data) {
    Y[i] ~ dbin(q[i], 8)
    logit(q[i]) <- a + r[i]
  }
  a ~ dnorm(0, 1.0E-4)
  for (i in 1:N.data) {
    r[i] ~ dnorm(0, tau)
  }
  tau <- 1 / (s * s)
  s ~ dunif(0, 1.0E+4)
}
```

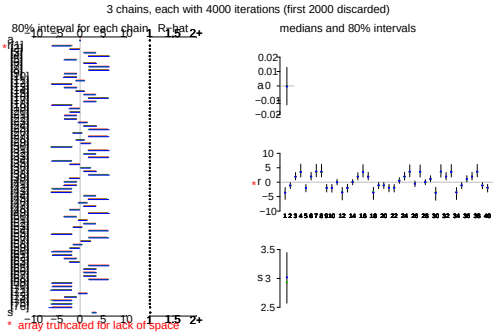







## JAGS で得られた事後分布サンプルの要約

```
> source("mcmc.list2bugs.R")                    # なんとなく便利なので…
> post.bugs <- mcmc.list2bugs(post.mcmc.list) # bugs クラスに変換
```








## bugs オブジェクトの post.bugs を調べる

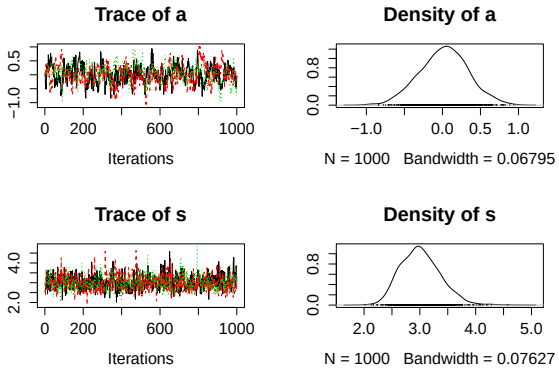
- `print(post.bugs, digits.summary = 3)`
- 事後分布の 95% 信頼区間などが表示される

```
3 chains, each with 4000 iterations (first 2000 discarded), n.thin = 2
n.sims = 3000 iterations saved
        mean    sd   2.5%    25%    50%    75%  97.5%  Rhat n.eff
a       0.020 0.321 -0.618 -0.190  0.028  0.236  0.651 1.007   380
s       3.015 0.359  2.406  2.757  2.990  3.235  3.749 1.002  1200
r[1]   -3.778 1.713 -7.619 -4.763 -3.524 -2.568 -1.062 1.001  3000
r[2]   -1.147 0.885 -2.997 -1.700 -1.118 -0.531  0.464 1.001  3000
r[3]    2.014 1.074  0.203  1.282  1.923  2.648  4.410 1.001  3000
r[4]    3.765 1.722  0.998  2.533  3.558  4.840  7.592 1.001  3000
r[5]   -2.108 1.111 -4.480 -2.775 -2.047 -1.342 -0.164 1.001  2300
...（中略）
r[99]   2.054 1.103  0.184  1.270  1.996  2.716  4.414 1.001  3000
r[100] -3.828 1.766 -7.993 -4.829 -3.544 -2.588 -1.082 1.002  1100
```





## 各パラメーターの事後分布サンプルを R で調べる



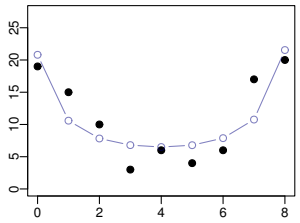





## 得られた事後分布サンプルを組みあわせて予測

- `post.mcmc <- to.mcmc(post.bugs)`
- これは `matrix` と同じようにあつかえるので，作図に便利
- ……このあとごちゃごちゃと計算する必要あるけど，省略……

観察された植物の個体数

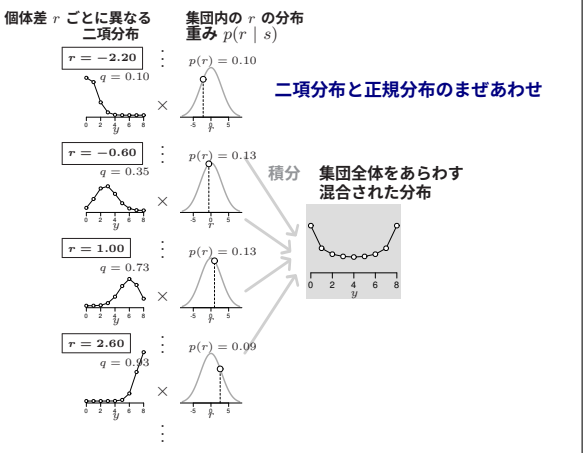


生存していた種子数



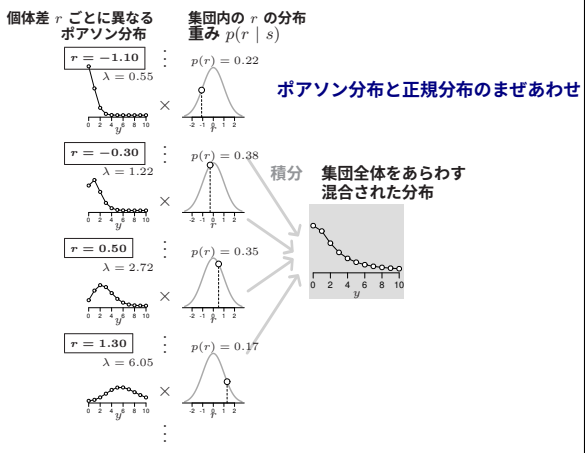


## 個体差 $r_i$ について積分するということは二項分布と正規分布をまぜあわせること







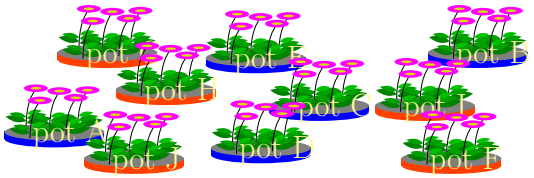








# 次回予告

## グループ差の階層ベイズモデル と簡単な時間変化モデル



# 筑波大 (大塚) 集中講義 2016 (h)

## 階層ベイズモデルと時間変化モデル

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

筑波大の講義 http://goo.gl/HvRhXn

2016–09–19

ファイル更新時刻: 2016–09–15 17:56





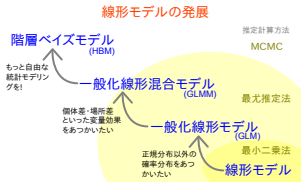
## この時間で説明したいこと

1. 複数ランダム効果の階層ベイズモデル
   - 個体差 + グループ差，など
2. 時間変化の階層ベイズモデル
   - 一回だけの変化: “対応のある” (paired) データセット





## 階層ベイズモデルと GLMM の関係は?




**一般化線形混合モデル** (Generalized Linear Mixed Model) **は階層ベイズモデルのひとつ**

- GLMM では個体差・植木鉢差といった local parameter は積分して消去
- 階層ベイズモデルでは，何もかも事後分布として推定
- GLMM は一部にすぎない — 階層モデル はもっと広い





## 1. 複数ランダム効果の階層ベイズモデル

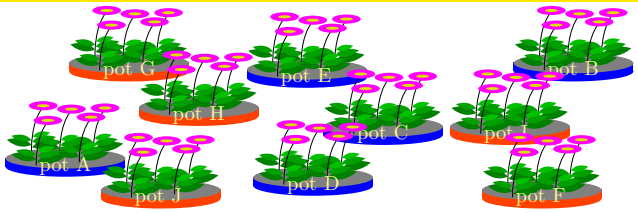
個体差 + グループ差，など

そして “てぬき” モデリングの危なさについて





## 架空植物の例題: またまた種子数データ




- 肥料をやったら個体ごとの種子数 $y_i$ が増えるかどうかを調べたい
- 植木鉢 10 個，各鉢に 10 個体の架空植物 (合計 100 個体)
  - コントロール ($f_j = \mathrm{C}$) 5 鉢 (合計 50 個体)
  - 肥料をやる処理 ($f_j = \mathrm{T}$) 5 鉢 (合計 50 個体)



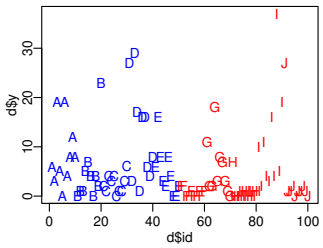


## データはこのように格納されている

```
> d <- read.csv("d1.csv")
> head(d)
  id pot f  y
1  1   A C  6
2  2   A C  3
3  3   A C 19
4  4   A C  5
5  5   A C  0
6  6   A C 19
```

- id 列: 個体番号 $\{1, 2, 3, \cdots, 100\}$
- pot 列: 植木鉢名 {A, B, C, $\cdots$, J}
- f 列: 処理: コントロール C, 肥料 T
- y 列: 種子数 (応答変数)

## データはとにかく図示する!!

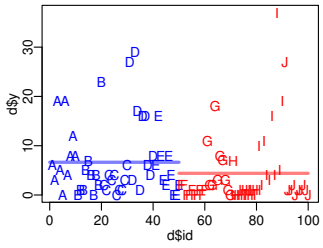



- `plot(d$id, d$y, pch = as.character(d$pot), ...)`
- **コントロール・処理 でそんなに差がない**?





## 処理ごとの平均も図に追加してみる

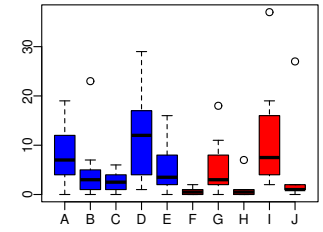



- **むしろ 処理 のほうが平均種子数が低い**?
- **(注) この架空データは 肥料の効果はゼロ と設定して生成した**





## 個体差だけでなく植木鉢差もありそう?



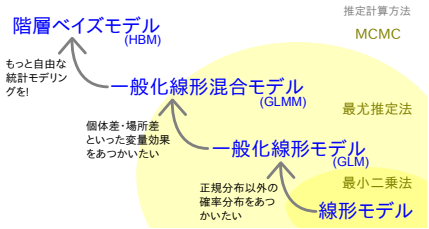

- `plot(d$pot, d$y, col = rep(c("blue", "red"), each = 5))`
- **植木鉢由来の** random effects **みたいなものはブロック差と呼ばれる**





## (一般化な) 線形モデルのわくぐみで，とりあえず考えてみる

線形モデルの発展








## GLM: 個体差もブロック差も無視

```
> summary(glm(y ~ f, data = d, family = poisson))
...(略)...
Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)   1.8931     0.0549   34.49  < 2e-16
fT           -0.4115     0.0869   -4.73  2.2e-06
...(略)...
```

- **肥料をやる処理** (f) **をすると，平均種子数が下がる**?
- AIC **でモデル選択しても同じような結果に**





## GLMM: 個体差だけ考慮，ブロック差は無視

```
> library(glmmML)
> summary(glmmML(y ~ f, data = d, family = poisson,
+ cluster = id))
...(略)...
              coef se(coef)     z Pr(>|z|)
(Intercept)  1.351    0.192  7.05  1.8e-12
fT          -0.737    0.280 -2.63  8.4e-03
...(略)...
```

- **やっぱり同じ**?
- **むしろ肥料処理の悪影響が強い**?

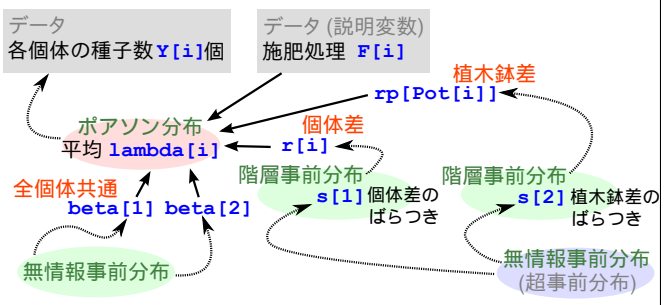
## 個体差 + ブロック差を考える階層ベイズモデル

- ここでは log リンク関数を使う
- 平均の対数 $\log(\lambda_i) = a + bf_i +$ (**個体差**) + (**ブロック差**)
- 事前分布の設定
  - 切片 $a$ と $f_i$ の係数 $b$ は無情報事前分布 (すごく平らな正規分布)
  - 個体差とブロック差は階層的な事前分布 (それぞれ標準偏差 $\sigma_1$, $\sigma_2$ の正規分布，平均はゼロ)
  - 標準偏差 $\sigma_*$ は無情報事前分布 ($[0, 10^4]$ の一様分布)





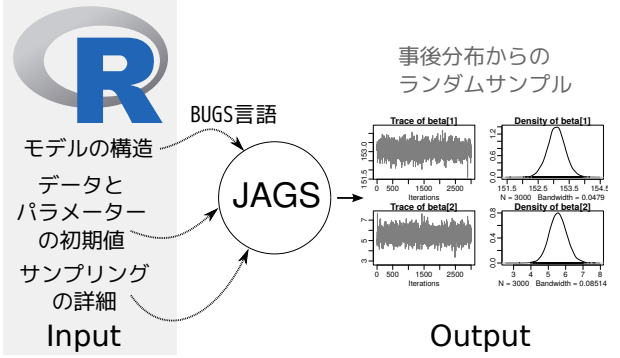
## 植木鉢問題の階層ベイズモデルの図示








## JAGS を R の “したうけ” として使う








## 個体差 + ブロック差のあるポアソン回帰の BUGS code (1)

```
model
{
  for (i in 1:N.sample) {
    Y[i] ~ dpois(lambda[i])
    log(lambda[i]) <- a + b * F[i] + r[i] + rp[Pot[i]]
  }
  # 次のページの事前分布の定義につづく
```

ここでの BUGS coding のポイント

- 因子型の説明変数 $f_i \in \{\mathtt{C}, \mathtt{T}\}$ は，それぞれ `F[i]` を `0`, `1` と置きかえる
- `Pot[i]` は `1`, `2`, ..., `10` と数字になおした植木鉢名をいれておいて，植木鉢の効果 `rp[...]` を参照させる





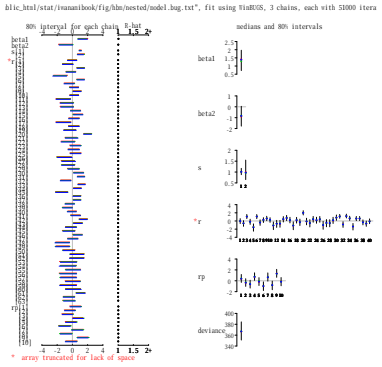
## 個体差 + ブロック差のあるポアソン回帰の BUGS code (2)

```
  # 前のページからのつづき
  a ~ dnorm(0, 1.0E-4) # 切片
  b ~ dnorm(0, 1.0E-4) # 肥料の効果
  for (i in 1:N.sample) {
    r[i] ~ dnorm(0, tau[1])  # 個体差
  }
  for (j in 1:N.pot) {
    rp[j] ~ dnorm(0, tau[2]) # 植木鉢の差（ブロック差）
  }
  for (k in 1:N.tau) {
    tau[k] <- 1.0 / (sigma[k] * sigma[k]) # 個体・植木鉢のばらつき
    sigma[k] ~ dunif(0, 1.0E+4)
  }
}
```

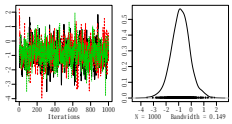




## WinBUGS による事後分布の推定，R で収束判定



## 肥料の効果 (パラメーター $b$) はなさそう?



| | mean | sd | 2.5% | 25% | 50% | 75% | 97.5% | Rh |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| a | 1.501 | 0.529 | 0.482 | 1.157 | 1.493 | 1.852 | 2.565 | 1.0 |
| b | -1.016 | 0.706 | -2.436 | -1.476 | -0.993 | -0.565 | 0.395 | 1.0 |
| sigma[1] | 1.020 | 0.114 | 0.822 | 0.939 | 1.014 | 1.089 | 1.265 | 1.0 |

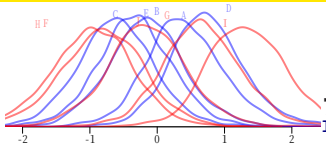
...(略)...

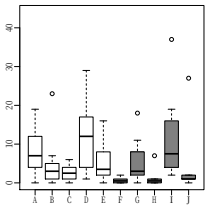
この架空データを生成した種子数シミュレイションでは，肥料の効果はまったく無いと設定していた





## 推定された植木鉢の差 (ブロック差)







## 統計モデリングの手ぬきは危険!

- random effects つまり 個体差・ブロック差が大きい
- random effects の影響が大きいときには，fixed effects の大きさが見えにくくなる— ニセの「効果」が見えることもあれば，見えるはずの傾向が隠されることも
  - 個体差・ブロック差の階層ベイズモデルが必要!
- もしブロック差を人為的に小さくできないなら，ブロック数をもっと増やして，より正確な植木鉢の効果のばらつきを正確に推定するしかない





## GLMM は階層ベイズモデル (HBM) で!

- 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
- 用語の整理: 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) 最尤推定が難しい → 階層ベイズモデル (Hierarchical Bayesian Model) で事後分布 (posterior) 推定!





## 2. 時間変化の階層ベイズモデル

### 一回だけの変化: “対応のある” (paired) データセット





架空の実験：給食タイプ→小学生の身長の伸び?


岩波データサイエンス vol.1

久保が書いた階層ベイズモデルの解説記事の例題

## 架空の実験：給食タイプ→小学生の身長の伸び?

| 調査地 | 給食 | 標本サイズ | | 身長の平均 (cm) | | 身長の標準偏差 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (県) | タイプ | 1 回目 | 2 回目 | 1 回目 | 2 回目 | 1 回目 | 2 回目 |
| A | T | 55 | 51 | 151.36 | 157.27 | 2.94 | 2.98 |
| B | T | 53 | 49 | 151.56 | 156.83 | 3.07 | 3.14 |
| C | C | 55 | 53 | 152.22 | 157.08 | 3.20 | 3.21 |
| D | T | 53 | 52 | 153.09 | 156.00 | 2.65 | 2.64 |
| E | T | 58 | 55 | 153.22 | 157.24 | 3.07 | 3.03 |
| F | C | 55 | 53 | 153.31 | 157.22 | 3.10 | 3.13 |
| G | C | 58 | 53 | 152.98 | 157.81 | 2.49 | 2.45 |
| H | C | 59 | 57 | 153.27 | 158.95 | 3.08 | 3.06 |
| I | T | 56 | 51 | 152.67 | 156.82 | 2.82 | 2.92 |
| J | C | 56 | 50 | 155.37 | 161.71 | 3.10 | 3.21 |

・給食タイプ T（新型）：A, B, D, E, I 県
・給食タイプ C（普通）：C, F, G, H, J 県

**新型給食 f=T の真の効果は 0!**





## 給食タイプ→小学生の身長の伸び?

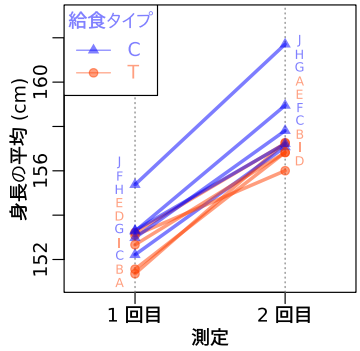
| 調査地 | 給食 | 標本サイズ | | 身長の平均 (cm) | | 身長の標準偏差 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (県) | タイプ | 1 回目 | 2 回目 | 1 回目 | 2 回目 | 1 回目 | 2 回目 |
| A | T | 55 | 51 | 151.36 | 157.27 | 2.94 | 2.98 |
| B | T | 53 | 49 | 151.56 | 156.83 | 3.07 | 3.14 |
| C | C | 55 | 53 | 152.22 | 157.08 | 3.20 | 3.21 |
| D | T | 53 | 52 | 153.09 | 156.00 | 2.65 | 2.64 |
| E | T | 58 | 55 | 153.22 | 157.24 | 3.07 | 3.03 |
| F | C | 55 | 53 | 153.31 | 157.22 | 3.10 | 3.13 |
| G | C | 58 | 53 | 152.98 | 157.81 | 2.49 | 2.45 |
| H | C | 59 | 57 | 153.27 | 158.95 | 3.08 | 3.06 |
| I | T | 56 | 51 | 152.67 | 156.82 | 2.82 | 2.92 |
| J | C | 56 | 50 | 155.37 | 161.71 | 3.10 | 3.21 |

個人データは隠匿されている





## （架空）データ： 給食と身長成長








## ダメな GLM: bad model 1

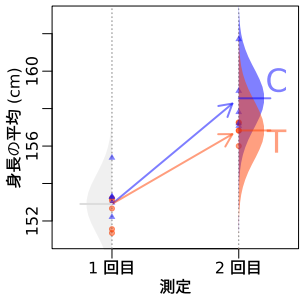
| 調査地 | 給食 | 標本サイズ | | 身長の平均 (cm) | | 身長の標準偏差 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (県) | タイプ | 1 回目 | 2 回目 | 1 回目 | 2 回目 | 1 回目 | 2 回目 |
| A | T | 55 | 51 | 151.36 | 157.27 | 2.94 | 2.98 |
| B | T | 53 | 49 | 151.56 | 156.83 | 3.07 | 3.14 |
| C | C | 55 | 53 | 152.22 | 157.08 | 3.20 | 3.21 |
| D | T | 53 | 52 | 153.09 | 156.00 | 2.65 | 2.64 |
| E | T | 58 | 55 | 153.22 | 157.24 | 3.07 | 3.03 |
| F | C | 55 | 53 | 153.31 | 157.22 | 3.10 | 3.13 |
| G | C | 58 | 53 | 152.98 | 157.81 | 2.49 | 2.45 |
| H | C | 59 | 57 | 153.27 | 158.95 | 3.08 | 3.06 |
| I | T | 56 | 51 | 152.67 | 156.82 | 2.82 | 2.92 |
| J | C | 56 | 50 | 155.37 | 161.71 | 3.10 | 3.21 |

（例） fit ← glm(y ~ t + t:f, ……)
測定回数： t = **1** または **2**（1 回目，2 回目）
給食タイプ： f = C または T





## ダメな GLM: bad model 1

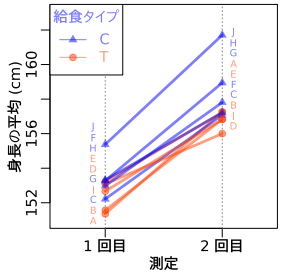


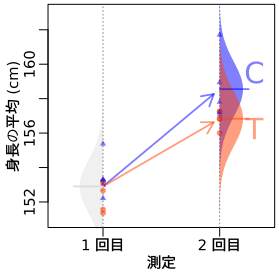

（例） fit ← glm(y ~ t + t:f, ……)
測定回数： t = **1** または **2**（1 回目，2 回目）
給食タイプ： f = C または T





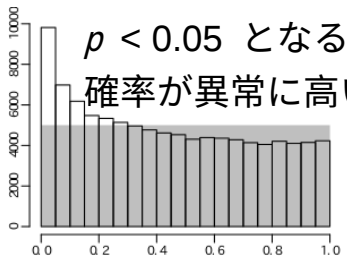
## 対応 (paired) が考慮されてない！




ダメな GLM: bad model 1
glm(y ~ t + t:f, ……)

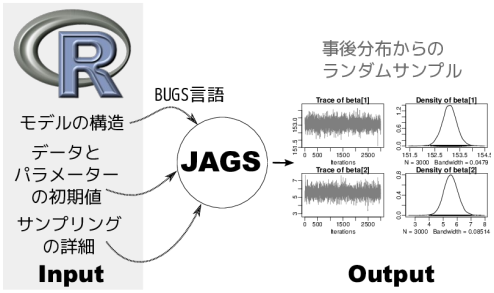
## bad model 1 による第一種の過誤の悪化







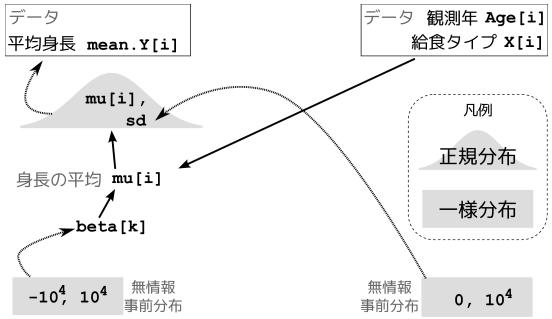

## R と JAGS







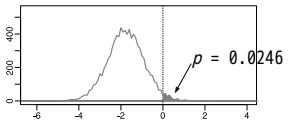

## bad model 1 を Bayes model 化








## bad model 1 による第一種の過誤の悪化




新給食が身長増加に与える効果

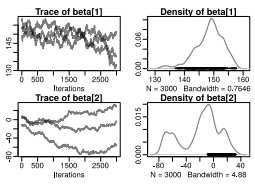
しかし…

新給食 f=T の真の効果は 0!





## bad model 2: 各県独立 Bayes 版

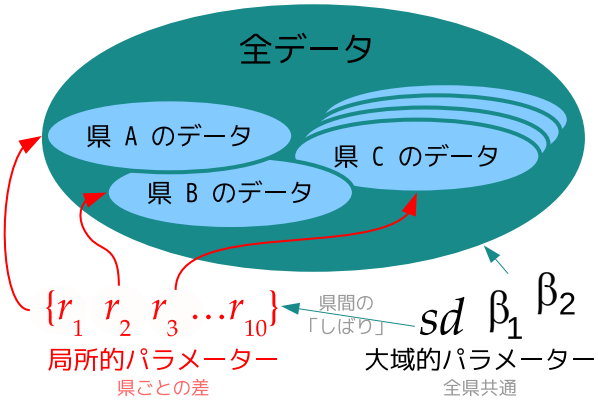



Bayes model でもダメなものはダメ…

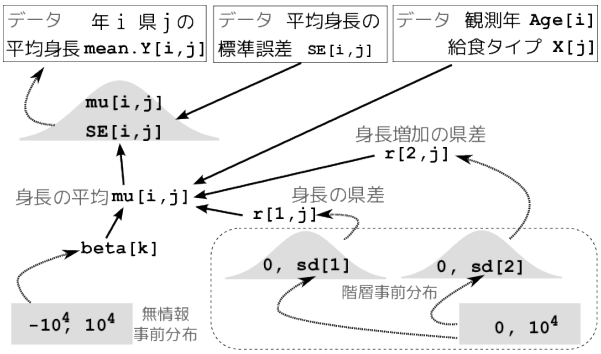




## Hierarchical Bayesian Model



## Hierarchical Bayesian Model








## Hierarchical Bayesian Model

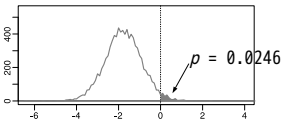
```
model
{
    for (i in 1:2) { # age
        for (j in 1:N.pref) {
            Y.mean[i, j] ~ dnorm(mu[i, j], Tau.se[i, j])
            mu[i, j] <- beta[1] + r[1, j] + (
                beta[2] + beta[3] * X[i, j] + r[2, j]
            ) * Age[i, j]
        }
    }
    for (k in 1:N.beta) {
        beta[k] ~ dunif(-1.0E+4, 1.0E+4)
    }
    for (i in 1:N.r) {
        for (j in 1:N.pref) {
            r[i, j] ~ dnorm(0, tau[i])
        }
        tau[i] <- 1 / (sd[i] * sd[i])
        sd[i] ~ dunif(0, 1.0E+4)
    }
}
```



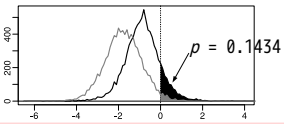


## Hierarchical Bayesian Model による推定結果

bad model 1




HBM

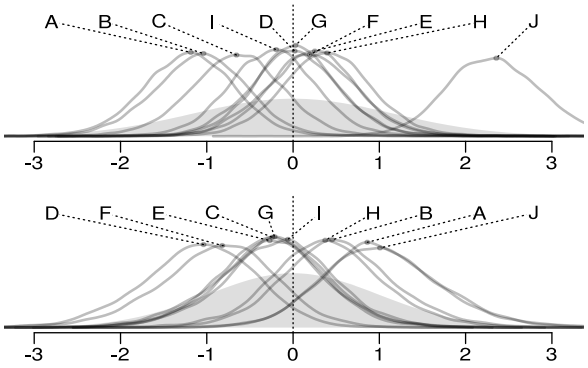



新型給食 f=T の真の効果は 0!



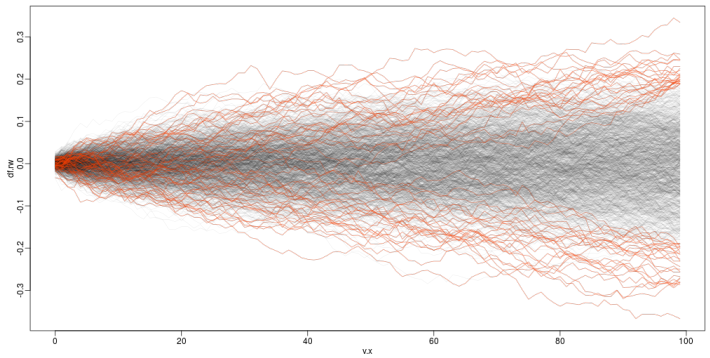


## 各県の local parameter



# 生態学の時系列データ解析でよく見る『あぶない』モデリング

久保拓弥 mailto:kubo@ees.hokudai.ac.jp





## 今回・次回の要点

「あぶない」時系列データ解析は

やめましょう!

統計モデルのあてはめ

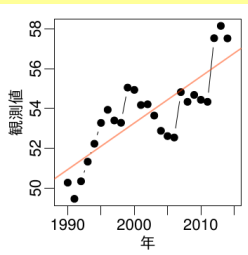
(危 1) 時系列データの GLM あてはめ

(危 2) 時系列 $Y_t$ ～ 時系列 $X_t$

各時刻の個体数 ～ 気温 とか

(これは次回)

## (危 1) 時系列データを GLM で




「ゆーいな傾き」を

ねつぞうする原因

傾きの検定やめて

AIC モデル選択

しても同様になる

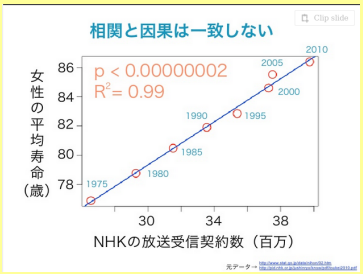
検定とかモデル選択とかそういう問題ではない

統計モデルがおかしい?

## (危 2) 時系列 $Y_t$ ～ 時系列 $X_t$

「相関は因果関係ではない」

問題の一部:にせの回帰 (これは次回)




http://www.slideshare.net/takehikoihayashi/ss-13441401

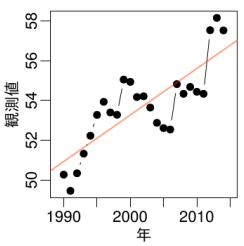
## 時系列データの統計モデリング

- 安易に「回帰」してはいけない
- ランダムウォークモデルが基本
- 統計モデルが生成する時系列パターンを意識する
- 階層ベイズモデルで推定

状態空間モデル



## (危 1) 時系列データを GLM で




「ゆーいな傾き」を

ねつぞうする原因

傾きの検定やめて

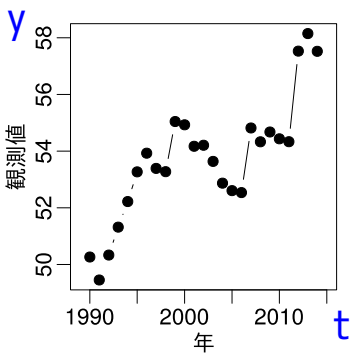
AIC モデル選択

しても同様になる

検定とかモデル選択とかそういう問題ではない

統計モデルがおかしい?

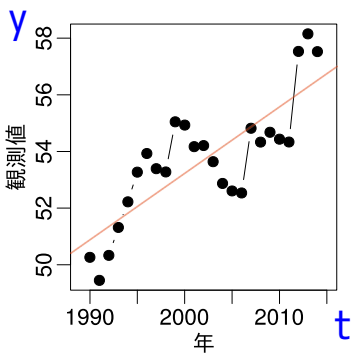
## このような時系列データがあったとしましょう




y は何か連続値としましょう
(今日でてくる y は連続値ばかり，ということで)



## 時系列データの統計モデリング入門

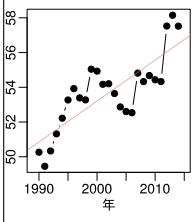



glm(y ~ t)

…とモデルをあてはめてみた



## 「やったーゆーいだ!!」……??

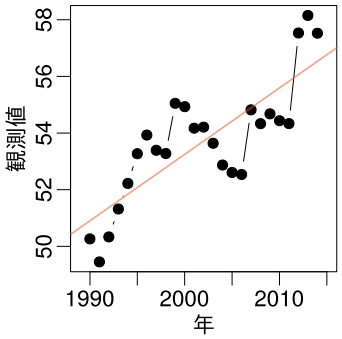


```
> summary(glm(formula = y ~ t))

Deviance Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-2.1295  -1.0583  -0.0817   0.9860   2.0188

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -414.5655    71.4761   -5.80  6.6e-06
t              0.2339     0.0357    6.55  1.1e-06
```

これはまちがい→ glm(時系列Y ~ 時間 t)



## 時系列の各点は独立ではない



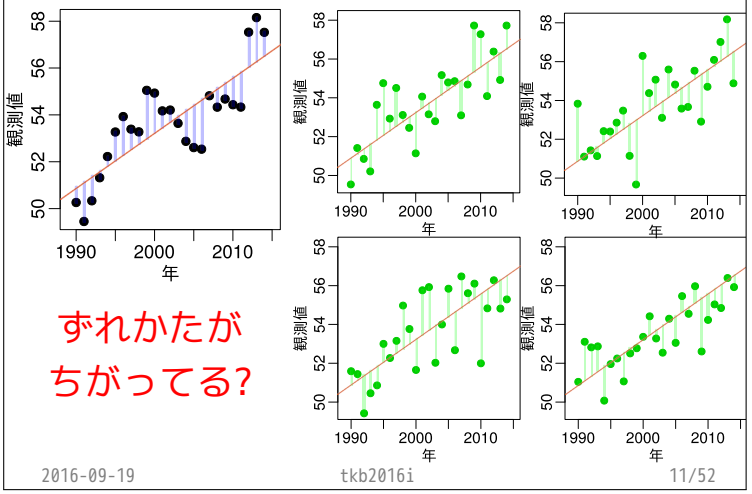

「ゆーいな傾き」(偽)
が「ぞろぞろ」でます

傾きの検定やめて
AIC モデル選択
しても同様になる

検定とかモデル選択とかそういう問題ではない
統計モデルがおかしい?



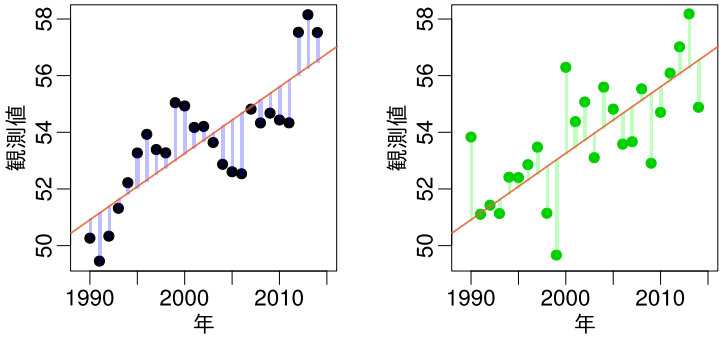
## 時系列の「ずれ」　GLM のずれ




ずれかたがちがってる?



## 時系列の「ずれ」　GLM のずれ

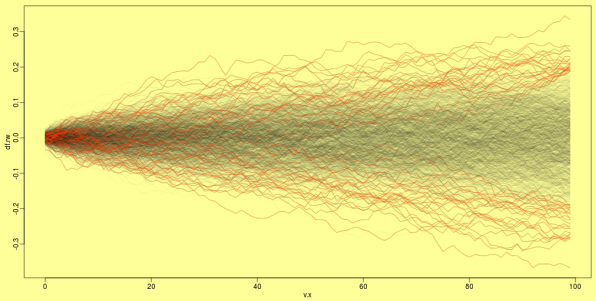



直線からのずれがちがう!

時間的自己相関がある　時間的自己相関がない

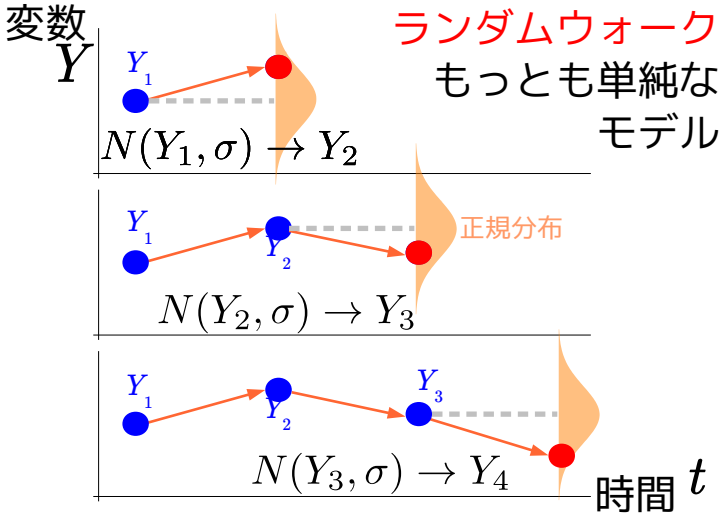
## 時系列の基本モデルのひとつ

## ランダムウォーク（乱歩）



## ランダムウォーク

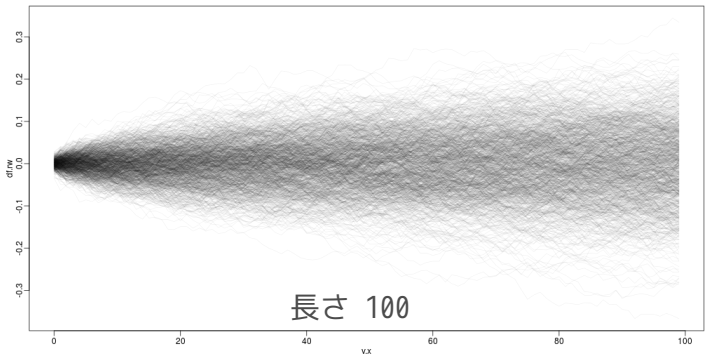
もっとも単純な
モデル






## ランダムウォークなサンプル時系列

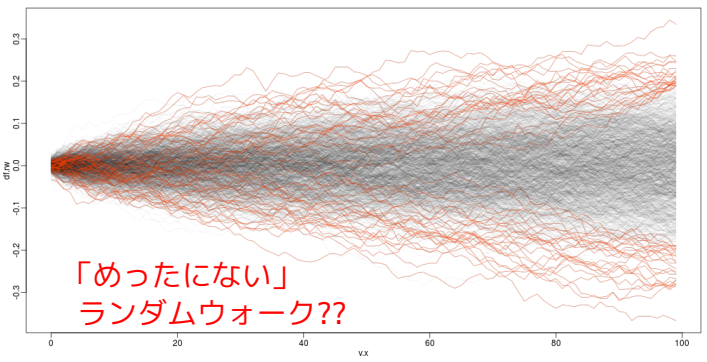
とりあえず 1000 本ほど生成してみました






## 例外的な時系列というのはありえる

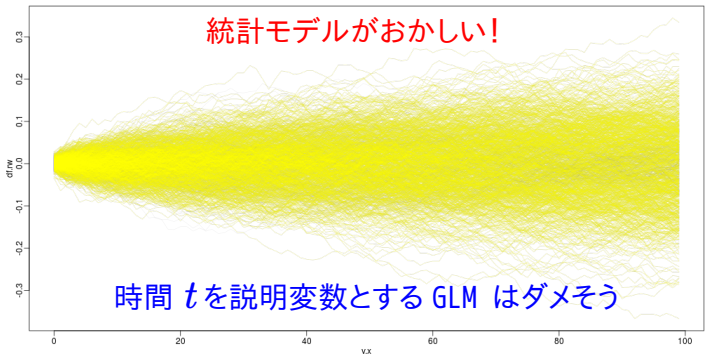
たとえば $t = 100$ でかなり外れている 50 本






## しかし直線回帰 GLM あてはめると…

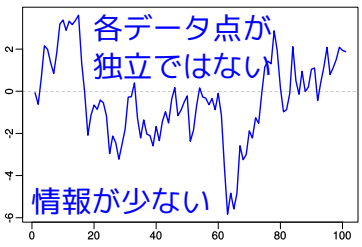
ほとんどすべての場合で「ゆーい」！



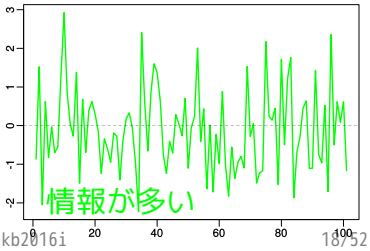



## ちょっとでも傾いてたら「ゆーい」

実際には
こんなデータ
なのに




R の glm() は
こんなデータ
だとみなしている



## 時間的自己相関

（略称:自己相関，時間相関）

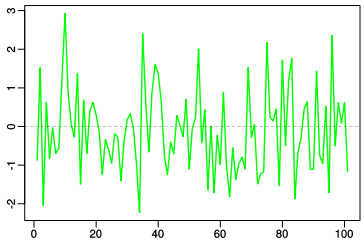
を調べたらいいの?

$$\rho_k = \frac{\mathrm{Cov}(y_t, y_{t-k})}{\sqrt{\mathrm{Var}(y_t) \cdot \mathrm{Var}(y_{t-1})}}$$

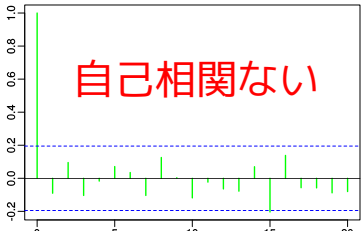
## R の ts クラス: 時系列をあつかう

```
plot(ts(Y))
```

これはたんなる
100 個の正規乱数



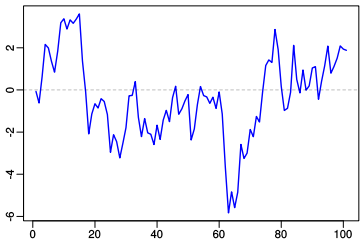
```
plot(acf(ts(Y)))
```



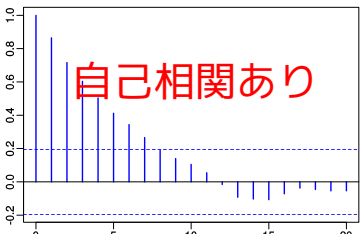



## 自己相関減衰の様子を図示

```
plot(ts(Y))
```



```
plot(acf(ts(Y)))
```

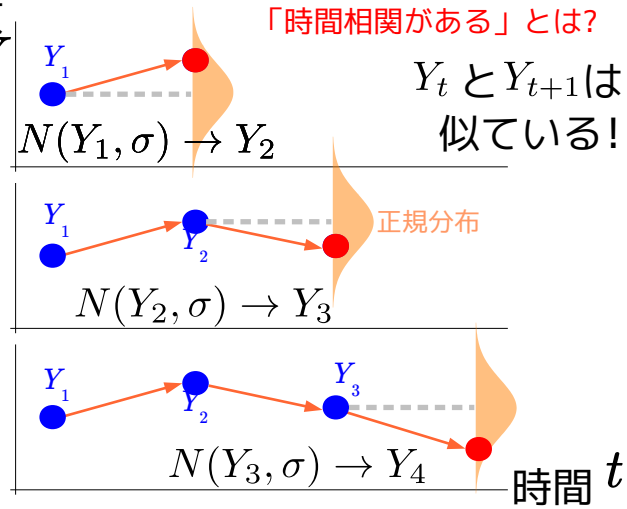





## 変数 $Y$

「時間相関がある」とは?

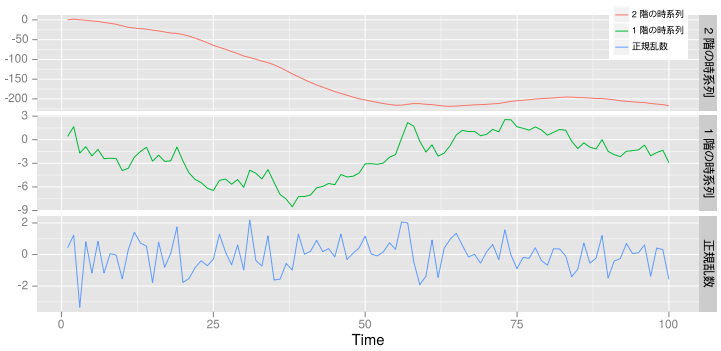
$Y_t$ と $Y_{t+1}$ は
似ている!






## 時系列データの「差分」をみよう

自己相関係数もいいけど差分を調べるのが基本





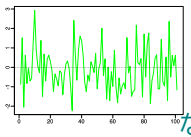

## 時間的自己相関

いつも役にたつわけではない?

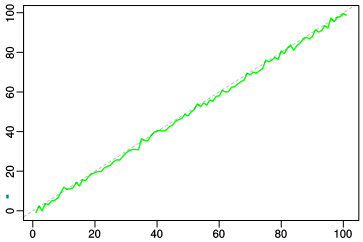
$$\rho_k = \frac{\mathrm{Cov}(y_t, y_{t-k})}{\sqrt{\mathrm{Var}(y_t) \cdot \mathrm{Var}(y_{t-1})}}$$

## 各点独立のデータをナナメにすると?

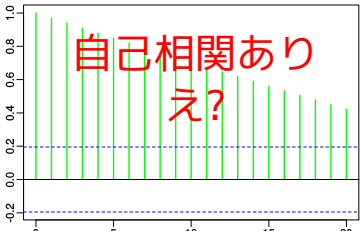
plot(ts(Y))



これをナナメにしたものなんだけど…



plot(acf(ts(Y)))

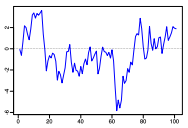


自己相関ありえ?

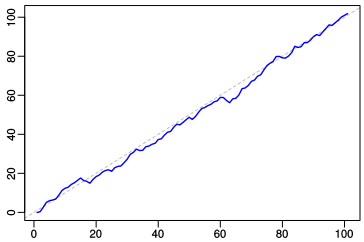


## 各点独立のデータをナナメにすると?

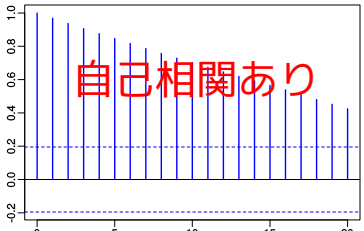
plot(ts(Y))



これをナナメにしたもの



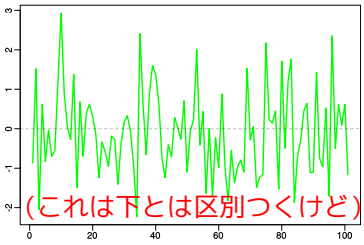
plot(acf(ts(Y)))



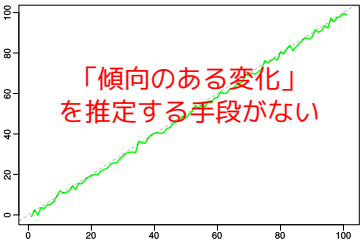
自己相関あり



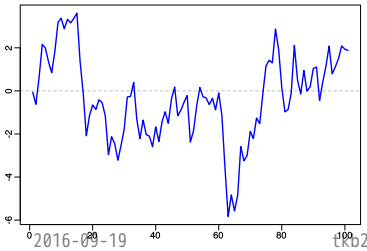
## 自己相関係数みても区別がつかない

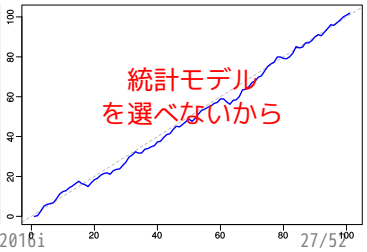


(これは下とは区別つくけど)



「傾向のある変化」を推定する手段がない



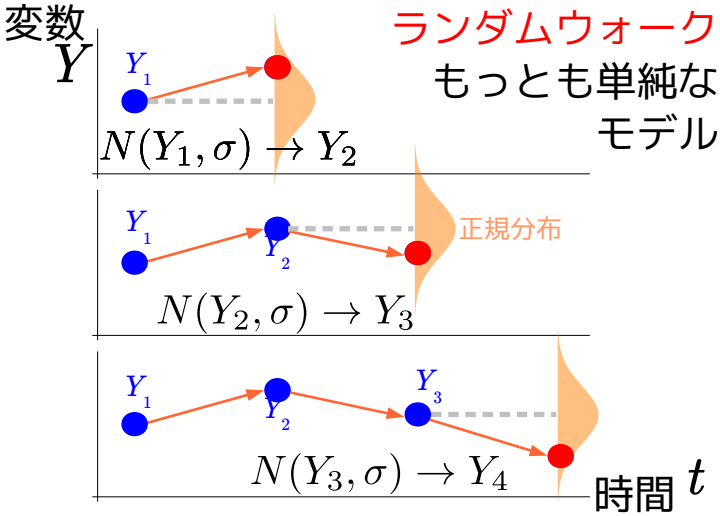


統計モデルを選べないから



## ランダムウォーク

もっとも単純なモデル



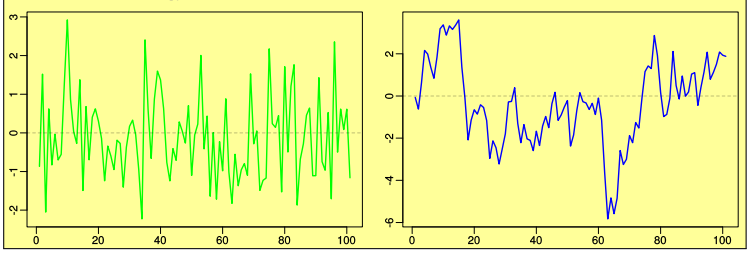



## 状態空間モデルでたちむかう

## 時系列データ解析

いろいろな時系列データを

統一的にあつかえないか?



## 時系列データ解析の教科書，ねえ……

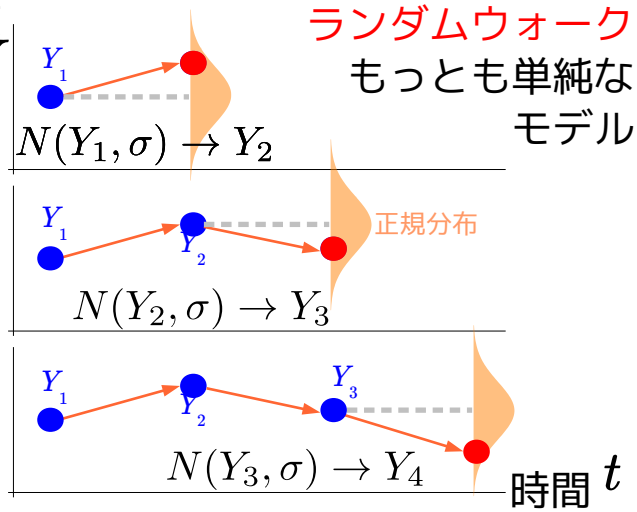
- モデルがあれこれ多すぎる
- 経済学よりのモデルばかり
- なんでも正規分布

なんとかならないかな?

状態空間モデル，どうでしょう?

変数 $Y$

ランダムウォーク
もっとも単純な
モデル

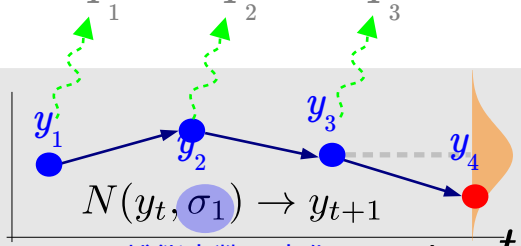





観測の誤差
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$

状態空間モデル
二種類のσをもつ

観測データ $Y_1$ $Y_2$ $Y_3$




状態変数の変化　時間 $t$

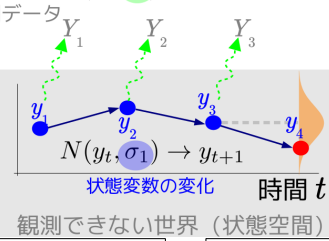
観測できない世界（状態空間）



観測の誤差
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$

状態空間モデル
二種類の σ をもつ

観測データ $Y_1$ $Y_2$ $Y_3$

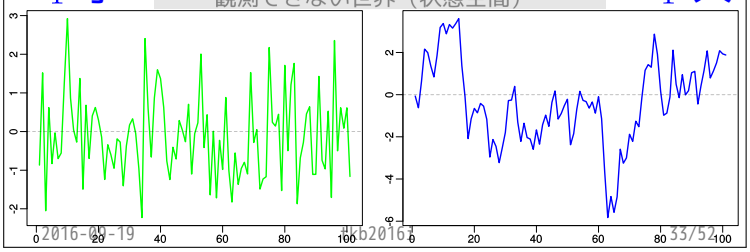



状態変数の変化　時間 $t$

観測できない世界（状態空間）

$\sigma_2$ 大
$\sigma_1$ 小

$\sigma_2$ 小
$\sigma_1$ 大

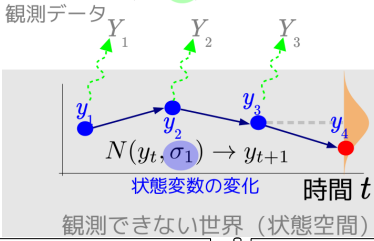




観測の誤差
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$

状態空間モデル
二種類の σ をもつ

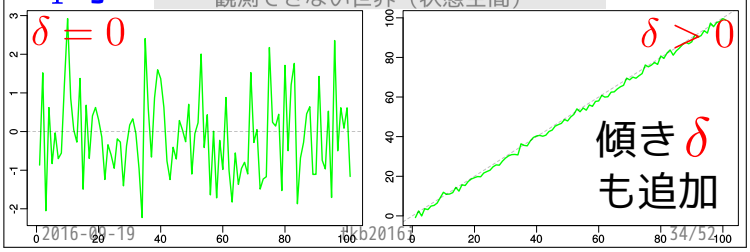
観測データ $Y_1$ $Y_2$ $Y_3$




状態変数の変化　時間 $t$

観測できない世界（状態空間）

$\sigma_2$ 大
$\sigma_1$ 小

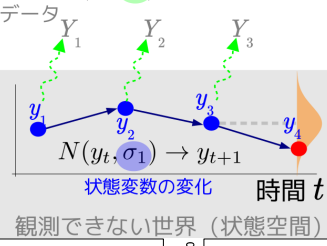





観測の誤差
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$

状態空間モデル
二種類の σ をもつ

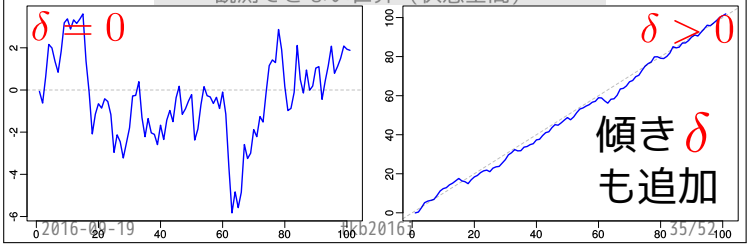
観測データ $Y_1$ $Y_2$ $Y_3$




状態変数の変化　時間 $t$

観測できない世界（状態空間）

$\sigma_2$ 小
$\sigma_1$ 大





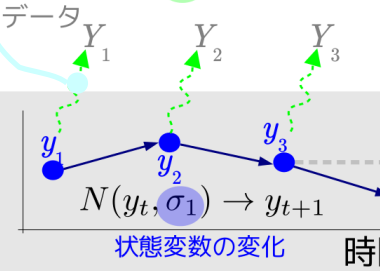

状態空間モデル + GLM

この部分にポアソン分布や
二項分布をいれる

観測の誤差
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$

状態空間モデル
二種類の σ をもつ

観測データ $Y_1$ $Y_2$ $Y_3$



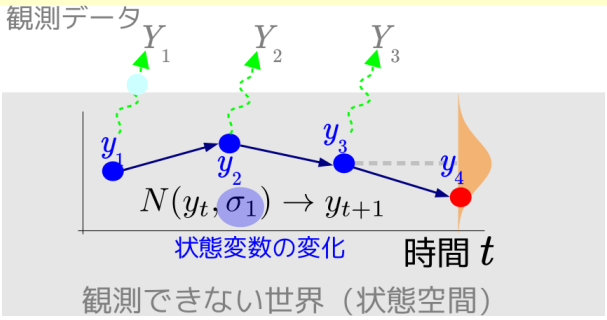

状態変数の変化　時間 $t$

観測できない世界（状態空間）

## 状態空間モデル + GLM

他にも季節変動などを
入れることができます

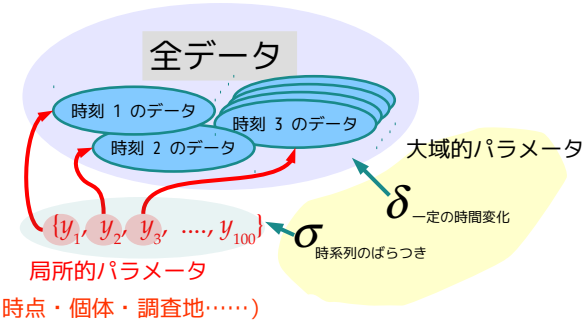
今日は
省略…
すみません






## 階層ベイズモデルとは?

多数の「似たようなパラメーター」たちに
「適切」な制約を加えて推定できる




（たくさんの時点・個体・調査地……）



## どうやてモデルをあてはめる?

R の状態空間モデルの
package いろいろある

```
library(dlm)
library(KFAS)
```

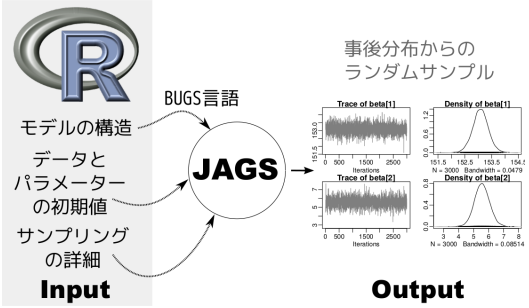
伊東さんが
紹介

しかしより一般化したモデルに
ついての理解が必要かも



## こういう問題も JAGS で

BUGS 言語でこの単純な
階層ベイズモデルを記述できる



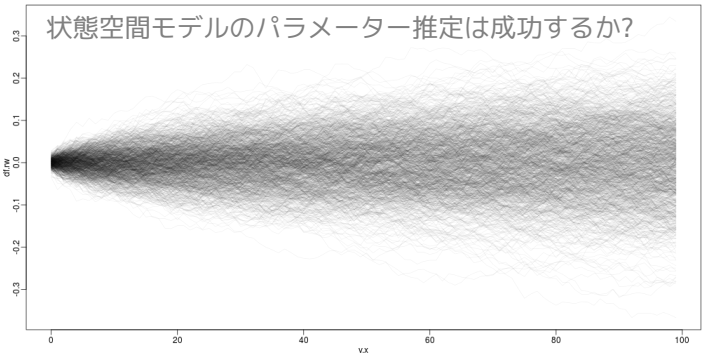



```
model
{
    Tau.Noninformative <- 0.0001
    Y[1] ~ dnorm(y[1], tau[2])
    y[1] ~ dnorm(0, Tau.Noninformative)
    for (t in 2:N.Y) {
        Y[t] ~ dnorm(y[t], tau[2])
        y[t] ~ dnorm(m[t], tau[1])
        m[t] <- delta + y[t - 1]
    }
    delta ~ dnorm(0, Tau.Noninformative)
    for (k in 1:2) {
        tau[k] <- 1 / (s[k] * s[k])
        s[k] ~ dunif(0, 10000)
    }
}
```



## 1000 個の架空データを推定

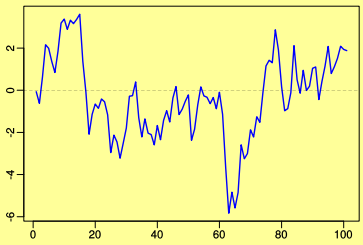
いろいろなランダムウォークが生成される



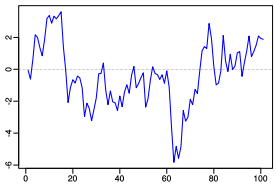
## 状態空間モデルを

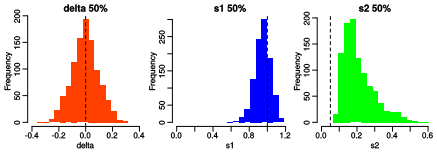
「かたむきゼロ」ランダムウォーク
$\delta = 0$
な架空データにあてはめる

$\sigma_2$ 小
$\sigma_1$ 大
$\delta = 0$

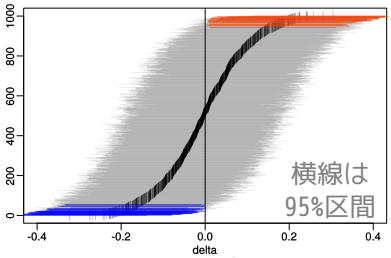


## 「傾き」δの事後分布を見る






真のδは 0

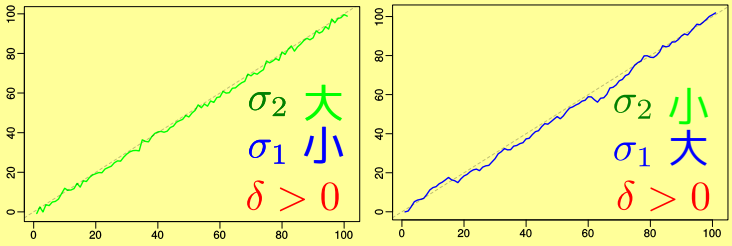



1000回中
63回ずれた

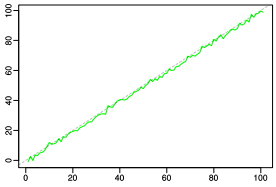


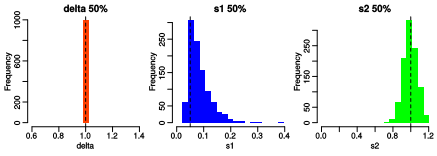
## 状態空間モデルを

「かたむきあり」ランダムウォーク
$\delta > 0$
な架空データにあてはめる

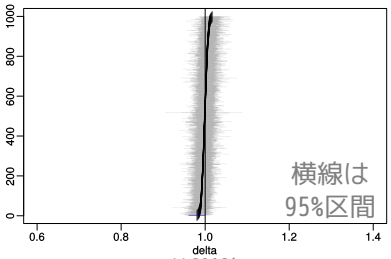



## 「傾き」δの事後分布を見る





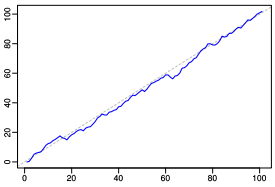

真のδは 1

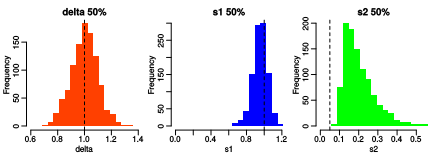



1000回中
1回ずれた

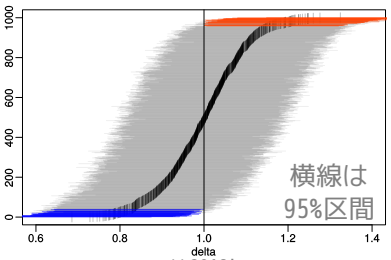


## 「傾き」δの事後分布を見る






真のδは 1

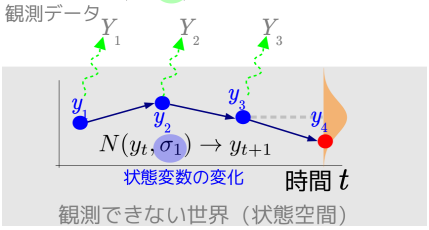



1000回中
62回ずれた



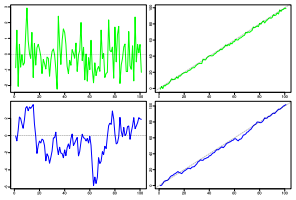
## とりあえずの結論

観測の誤差 状態空間モデル
$N(y_t, \sigma_2) \to Y_t$ 二種類の$\sigma$をもつ
観測データ




ひとつの状態空間
モデルを使って

右の4状態は
区別可能でしょう



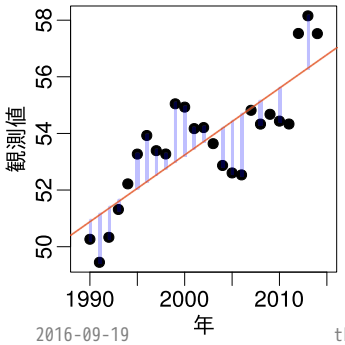
おわりに

時間的な相関はデータの

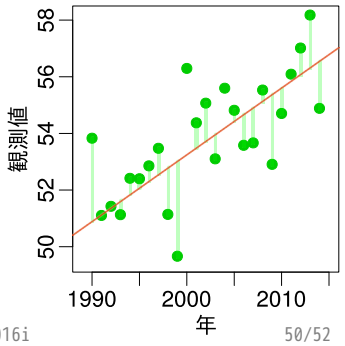
情報量を減少させる

空間相関も…

時系列の「ずれ」




GLM のずれ






## 時系列データの統計モデリング

- 安易に「回帰」してはいけない
- ランダムウォークモデルが基本
- 統計モデルが生成する時系列パターンを意識する
- 階層ベイズモデルで推定

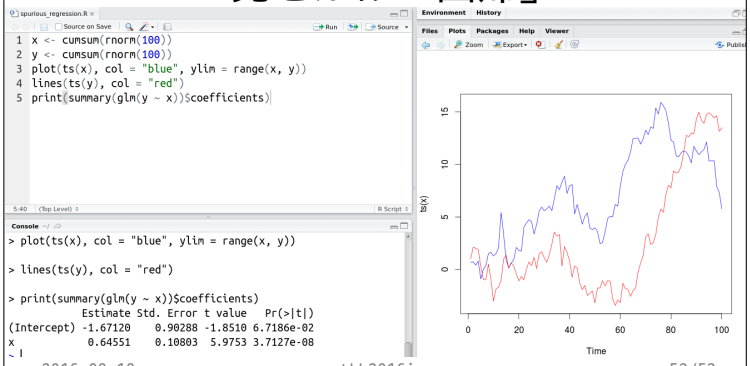
状態空間モデル



最終回予告

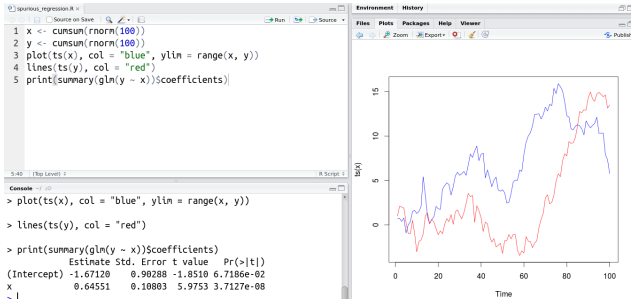
「長期データも状態空間モデルで」と

「見せかけの回帰」



# 時系列データ解析
## 状態空間モデル（SSM）の続きと
## 疑わしい回帰（spurious regression）

久保拓弥（北海道大・環境科学）






# 今回，説明してみたいこと

- 時系列データ:単純な回帰はダメ(続)
- 状態空間モデル: 乱歩と雑音の分離
- 欠測と不等間隔
- 時系列「ばらばら解析」やめよう
- 「うたがわしい回帰」への対策

階層ベイズモデル!



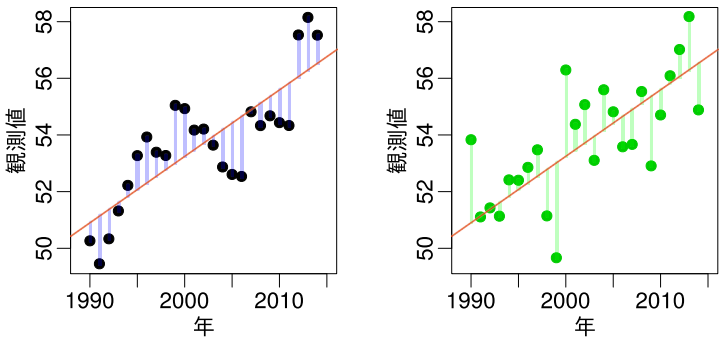
# 今日の要点

時系列データの解析は

階層ベイズモデル化した

状態空間モデルを使うのが便利

# 時系列の「ずれ」 GLM のずれ

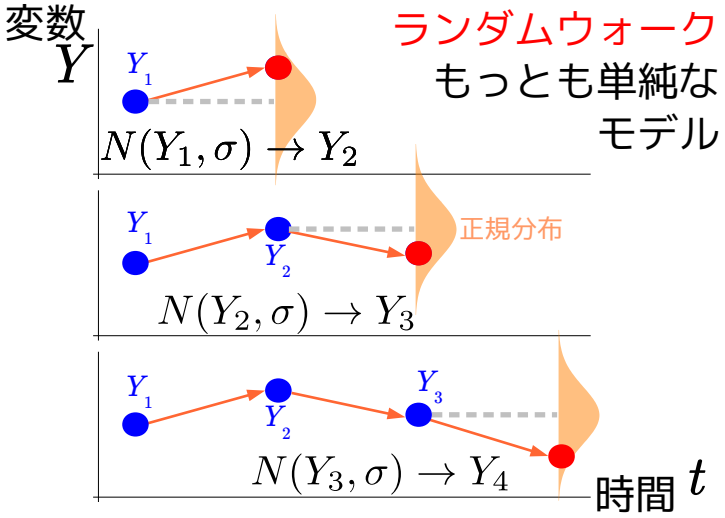



直線からのずれがちがう!

時間的自己相関がある　　時間的自己相関がない

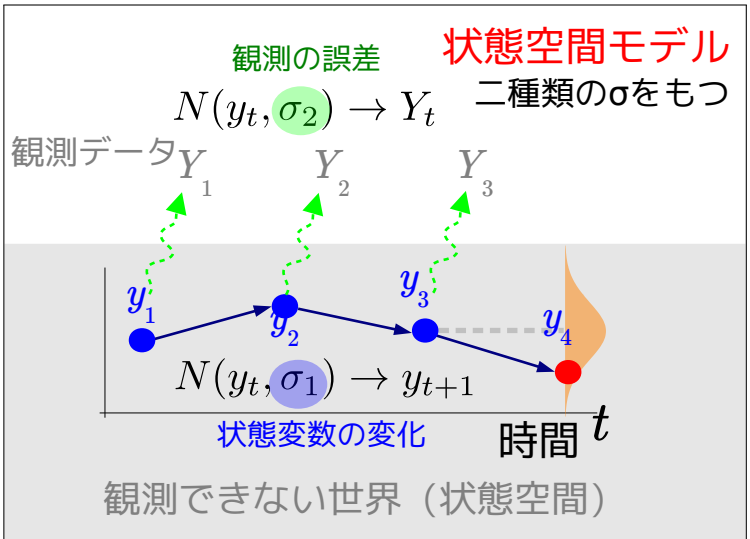


# ランダムウォーク
## もっとも単純な
## モデル





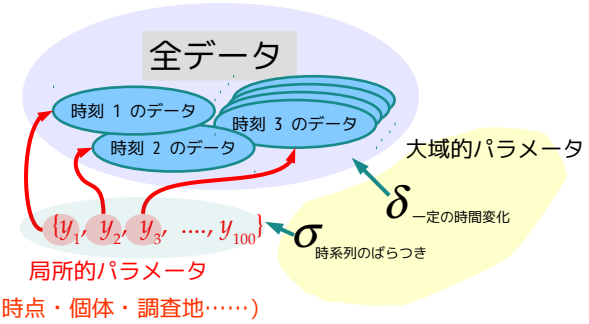

# 状態空間モデル
## 二種類のσをもつ




観測できない世界（状態空間）

## 状態空間モデルは階層ベイズモデル

多数の「似たようなパラメーター」たちに
「適切」な制約を加えて推定できる




（たくさんの時点・個体・調査地……）

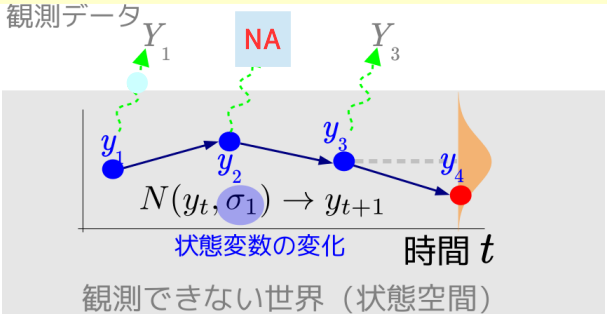


## 状態空間モデルを使う利点

欠測とか不等間隔とか

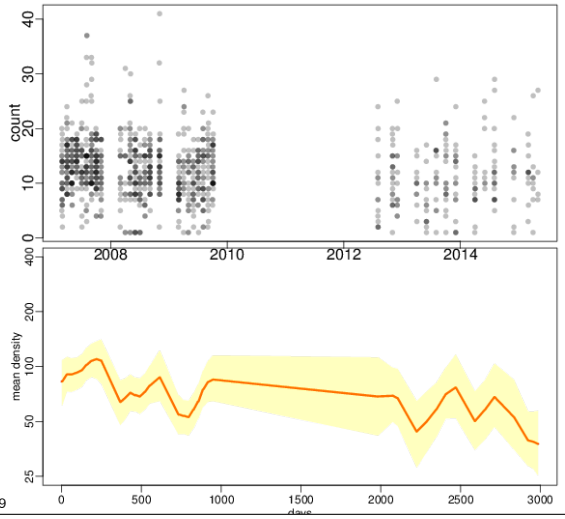
## 状態空間モデル + 観測モデル

欠測があっても問題ない
「補完」の必要なし！






## 不等間隔データでも何とかなります！



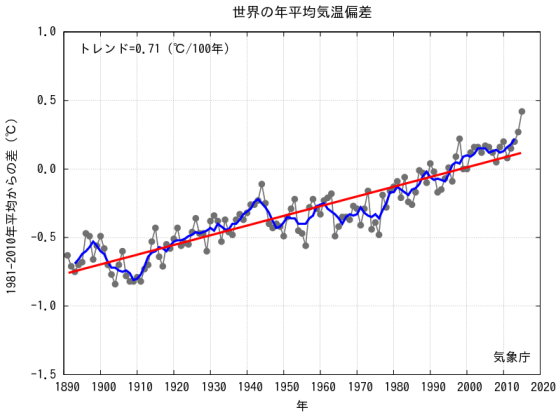



## 状態空間モデルを使う利点

「ばらばら解析」の回避

気象庁のデータ解析？

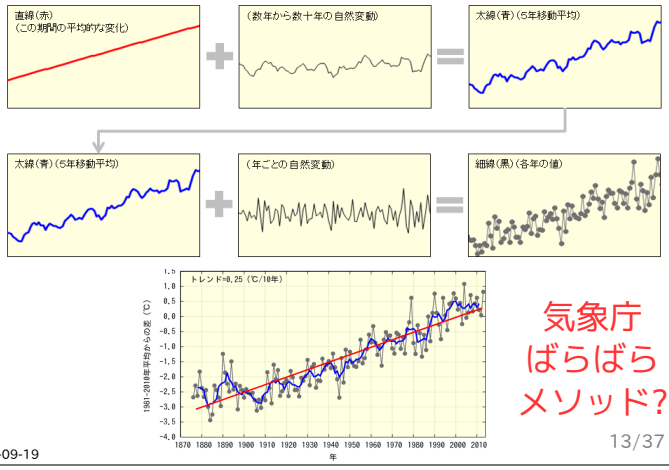
## 気象庁の長期変化傾向（トレンド）の解説




http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_wld.html

## 気象庁の長期変化傾向（トレンド）の解説

http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/trend.html

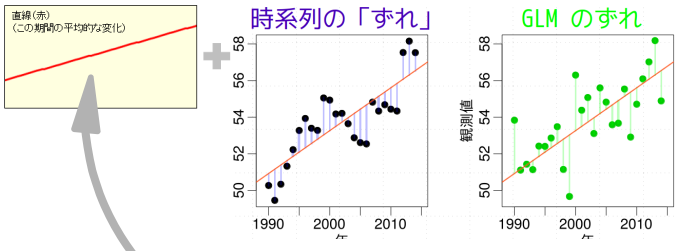



気象庁
ばらばら
メソッド?



## 気象庁ばらばらメソッド何がまずいか?

http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/trend.html

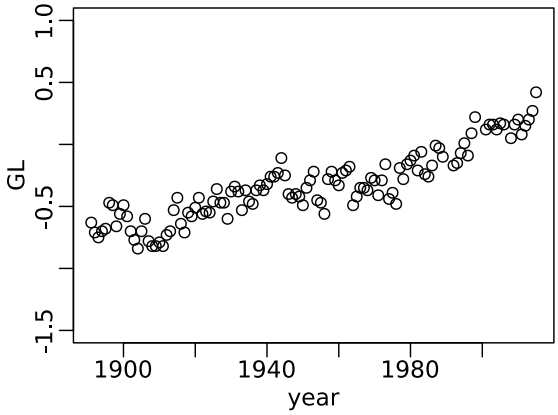



いきなり直線回帰!

(時系列データなんだから…)



## 公開データをダウンロード

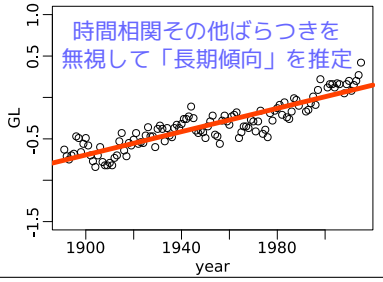





## 「とりあえず，直線回帰」の危険性

```
> summary(glm(GL ~ year, data = d))

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.41e+01   6.21e-01   -22.6   <2e-16
year         7.03e-03   3.18e-04    22.1   <2e-16
```

100年
あたり
0.70℃



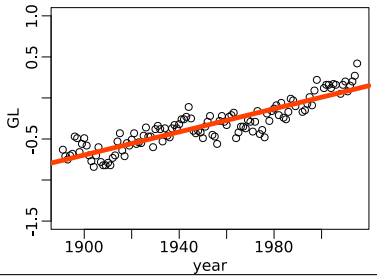

確率 1京ぶんの 2?



## 直線あてはめ（GLM）が予測した「温暖化」

```
> summary(glm(GL ~ year, data = d))

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.41e+01   6.21e-01   -22.6   <2e-16
year         7.03e-03   3.18e-04    22.1   <2e-16
```

100年
あたり
0.70℃

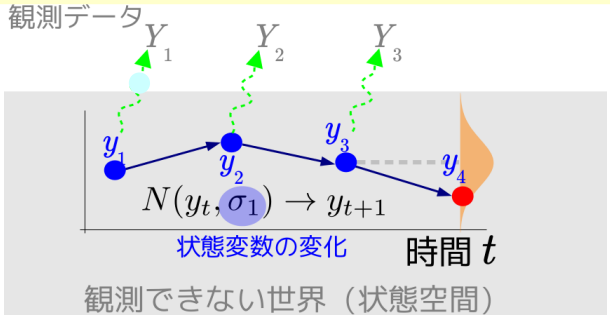





## 状態空間モデル：すべてを同時に推定

ランダムウォーク+各年独立なノイズ

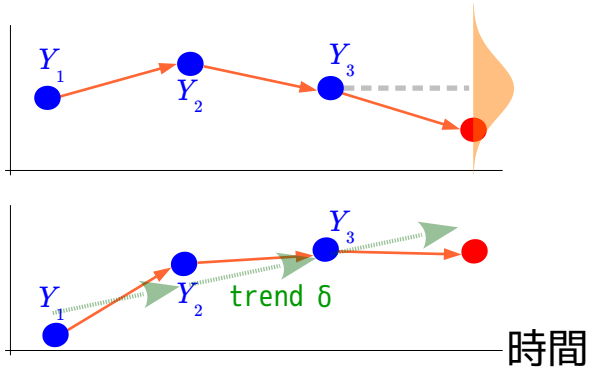
観測データ




観測できない世界（状態空間）

## 状態空間モデル：すべてを同時に推定

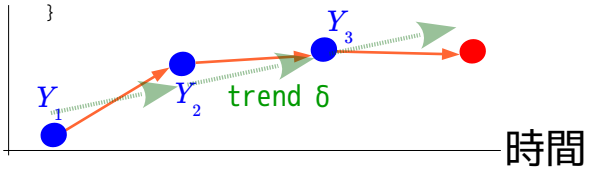
ランダムウォーク+各年独立なノイズ






## 状態空間モデル：すべてを同時に推定

```
Y[1] ~ dnorm(y[1], tau[2])
y[1] ~ dnorm(0.0, Tau.Noninformative)
for (t in 2:N.Y) {
    Y[t] ~ dnorm(y[t], tau[2])
    y[t] ~ dnorm(m[t], tau[1])
    m[t] <- delta + y[t - 1]
}
delta ~ dnorm(0, Tau.Noninformative)
for (k in 1:2) {
    tau[k] <- 1.0 / (s[k] * s[k])
    s[k] ~ dunif(0, 1.0E+4)
}
```

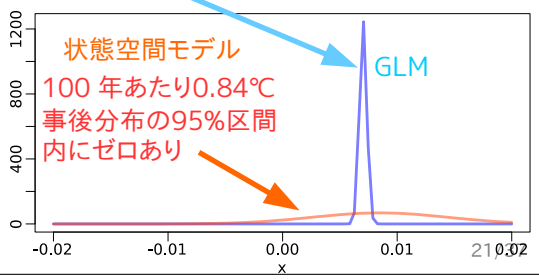





## 状態空間モデルが予測した「温暖化」

```
> summary(glm(GL ~ year, data = d))

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.41e+01   6.21e-01   -22.6   <2e-16
year         7.03e-03   3.18e-04    22.1   <2e-16
```

100年あたり0.70℃



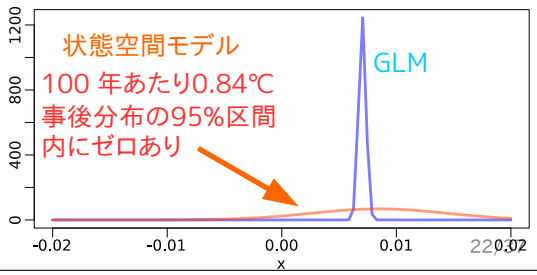



観測値間に相関あり→

実質的な

サンプルサイズが小さくなる

100年あたり0.70℃






## 疑わしい回帰
## spurious regression

時系列どうしの回帰

time series *Y* ~ time series *X*

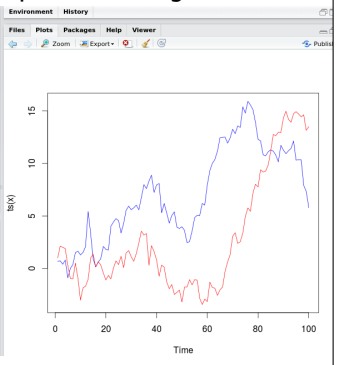
## 時系列データの統計モデリング でやめたほうがいいこと

- GLM: Y(t) ~ t とか Y(t) ~ X(t)
- 段階的解析:観測値の四則演算
- 「残差」の再解析
- 「対応」の無視 – 再測は時系列

# 「見せかけの回帰」spurious regression

```
x <- cumsum(rnorm(100))
y <- cumsum(rnorm(100))
plot(ts(x), col = "blue", ylim = range(x, y))
lines(ts(y), col = "red")
print(summary(glm(y ~ x))$coefficients)
```

```
> plot(ts(x), col = "blue", ylim = range(x, y))

> lines(ts(y), col = "red")

> print(summary(glm(y ~ x))$coefficients)
             Estimate Std. Error t value   Pr(>|t|)
(Intercept) -1.67120    0.90288 -1.8510 6.7186e-02
x            0.64551    0.10803  5.9753 3.7127e-08
```

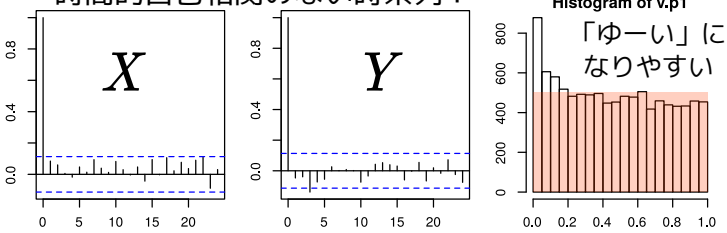



ちょっとだけ実演してみます



ノイズの大きな時系列にうもれたワナ？

時間的自己相関のない時系列？

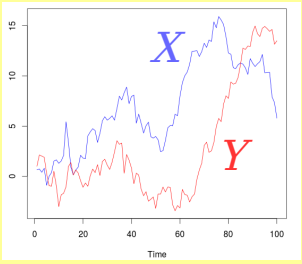



しかし glm(Y ~ X) とすると…



$Y \sim X$

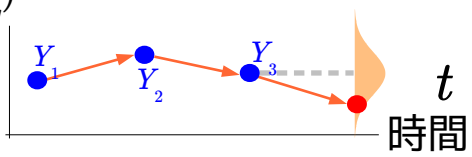
疑わしい回帰
spurious
regression




この問題も
状態空間モデル（SSM)で
解決できないだろうか?

# 二変量のランダムウォーク モデルを作れないか?

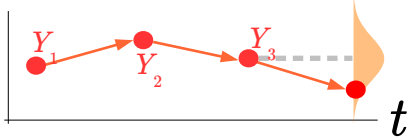
$$Y_{t+1} \sim N(Y_t, s_y)$$



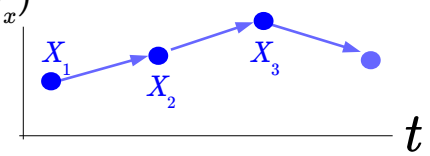



# 二変量のランダムウォーク $Y_t$ と $X_t$ は独立

$$Y_{t+1} \sim N(Y_t, s_y)$$




$$X_{t+1} \sim N(X_t, s_x)$$





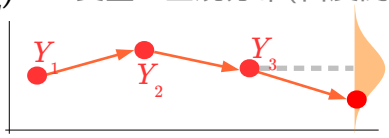

# 二変量のランダムウォーク $Y_t$ と $X_t$ は独立

$$Y_{t+1} \sim N(Y_t, s_y)$$

$$X_{t+1} \sim N(X_t, s_x)$$

このあたりで
何とかならないか?

$Y_{t+1} \sim N(Y_t, s_y)$ 一変量の正規分布(密度関数)




## 二変量の正規分布(密度関数)

**Bivariate case**

In the 2-dimensional nonsingular case ($k$ = rank($\Sigma$) = 2), the probability density function of a vector $[X\ Y]'$ is:

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left[\frac{(x-\mu_X)^2}{\sigma_X^2} + \frac{(y-\mu_Y)^2}{\sigma_Y^2} - \frac{2\rho(x-\mu_X)(y-\mu_Y)}{\sigma_X\sigma_Y}\right]\right)$$

where $\rho$ is the correlation between $X$ and $Y$ and where $\sigma_X > 0$ and $\sigma_Y > 0$. In this case,

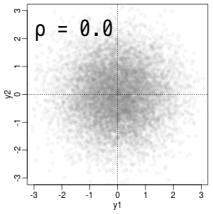
$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_X \\ \mu_Y \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_X^2 & \rho\sigma_X\sigma_Y \\ \rho\sigma_X\sigma_Y & \sigma_Y^2 \end{pmatrix}.$$

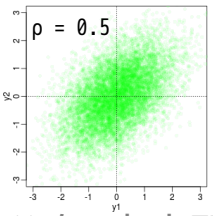
分散共分散行列　　相関係数 ρ

https://en.wikipedia.org/wiki/Multivariate_normal_distribution



無相関




正の相関

## 二変量の正規分布(密度関数)

**Bivariate case**

In the 2-dimensional nonsingular case ($k$ = rank($\Sigma$) = 2), the probability density function of a vector $[X\ Y]'$ is:

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left[\frac{(x-\mu_X)^2}{\sigma_X^2} + \frac{(y-\mu_Y)^2}{\sigma_Y^2} - \frac{2\rho(x-\mu_X)(y-\mu_Y)}{\sigma_X\sigma_Y}\right]\right)$$

where $\rho$ is the correlation between $X$ and $Y$ and where $\sigma_X > 0$ and $\sigma_Y > 0$. In this case,

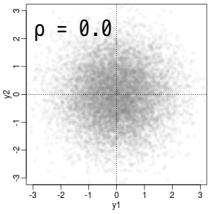
$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_X \\ \mu_Y \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_X^2 & \rho\sigma_X\sigma_Y \\ \rho\sigma_X\sigma_Y & \sigma_Y^2 \end{pmatrix}.$$

分散共分散行列　　相関係数 ρ

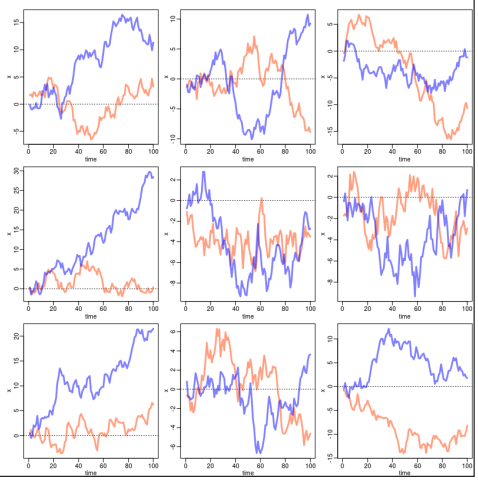
https://en.wikipedia.org/wiki/Multivariate_normal_distribution



## 二変量正規分布とランダムウォーク 例1

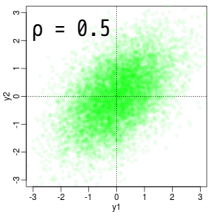



無相関





## 二変量正規分布とランダムウォーク 例2

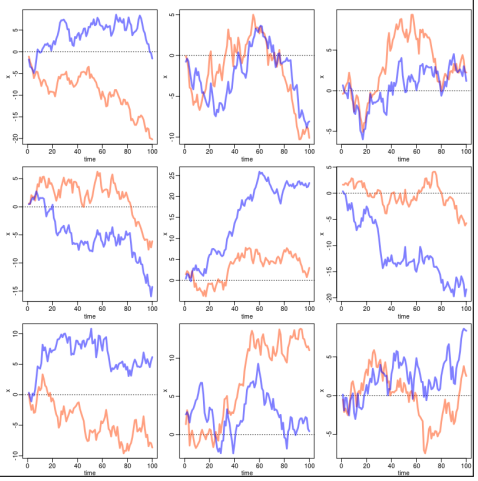



正の相関

時間があれば

demo

`sample_rvar.R`





## 二変量正規分布を部品とする状態空間モデル

```
for (i in 1:N.Y) {
    Y[i, 1:2] ~ dmnorm(mu[1:2], Omega[1:2, 1:2])
}
mu[1] ~ dunif(-1.0E+4, 1.0E+4)
mu[2] ~ dunif(-1.0E+4, 1.0E+4)
Omega[1:2, 1:2] <- inverse(VarCov[1:2, 1:2])
VarCov[1, 1] <- sigma[1] * sigma[1]
VarCov[1, 2] <- sigma[1] * sigma[2] * rho
VarCov[2, 1] <- sigma[2] * sigma[1] * rho
VarCov[2, 2] <- sigma[2] * sigma[2]
sigma[1] ~ dunif(0.0, 1.0E+4)
sigma[2] ~ dunif(0.0, 1.0E+4)
rho ~ dunif(-1.0, 1.0)
```

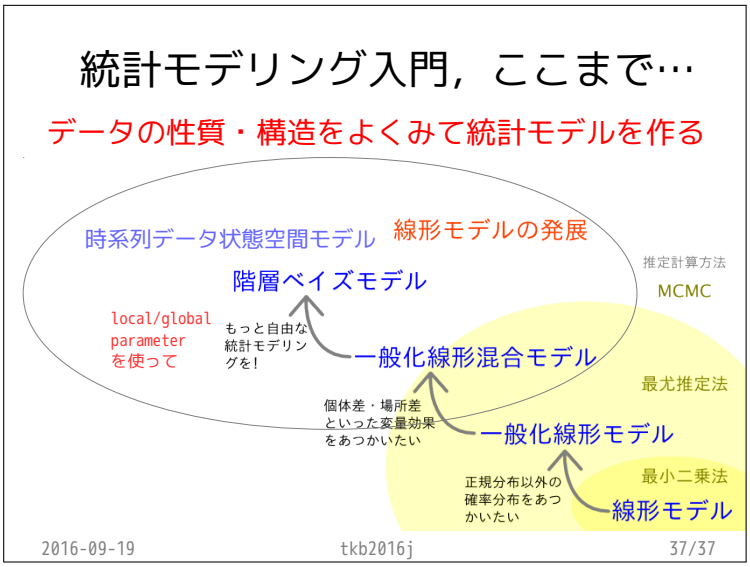
(R で実演)



## 階層ベイズモデルである
## 状態空間モデル
## から得られた事後分布

```
3 chains, each with 5200 iterations (first 200 discarded)
n.sims = 15000 iterations saved
          mean    sd   2.5%    25%    50%    75% 97.5%  Rhat n.eff
mu[1]   -0.122 0.110 -0.342 -0.195 -0.120 -0.048 0.090 1.001  6000
mu[2]   -0.157 0.100 -0.355 -0.224 -0.157 -0.091 0.041 1.002  1500
sigma[1] 1.091 0.079  0.949  1.036  1.086  1.142 1.261 1.001  6100
sigma[2] 0.993 0.074  0.864  0.941  0.987  1.039 1.151 1.001  4100
rho      0.568 0.070  0.420  0.523  0.573  0.617 0.693 1.001 11000
```

ふたつの時系列データの変動が
相関しているかどうかを特定できる


統計モデリング入門，ここまで…
データの性質・構造をよくみて統計モデルを作る
時系列データ状態空間モデル
線形モデルの発展
推定計算方法
MCMC
階層ベイズモデル
local/global parameter を使って
もっと自由な統計モデリングを！
一般化線形混合モデル
最尤推定法
個体差・場所差といった変量効果をあつかいたい
一般化線形モデル
最小二乗法
正規分布以外の確率分布をあつかいたい
線形モデル
2016-09-19
tkb2016j
37/37