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

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?

2. **AIC を使ったモデル選択**

   あてはまりの悪さ: deviance

3. **統計学的な検定**

   そして，その非対称性

4. **モデル選択 と 統計学的な検定**

   のさまざまな誤解

今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

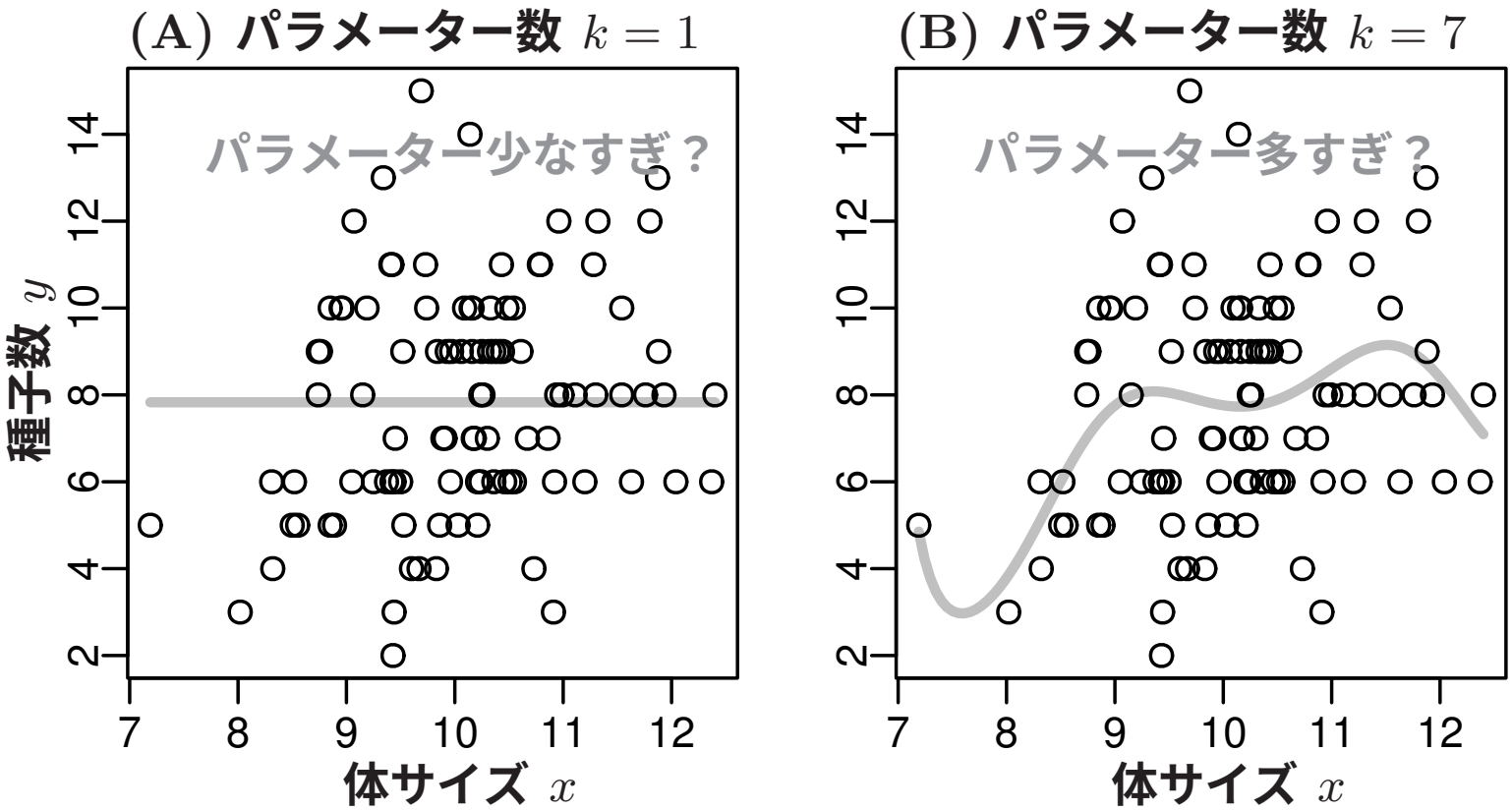
今日はおもに「第 4 章 GLM のモデル選択」と「第 5 章 GLM の尤度比検定と検定の非対称性」の内容を説明します.

http://goo.gl/Ufq2

- 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)

パラメーター数は多くても少なくてもヘン?



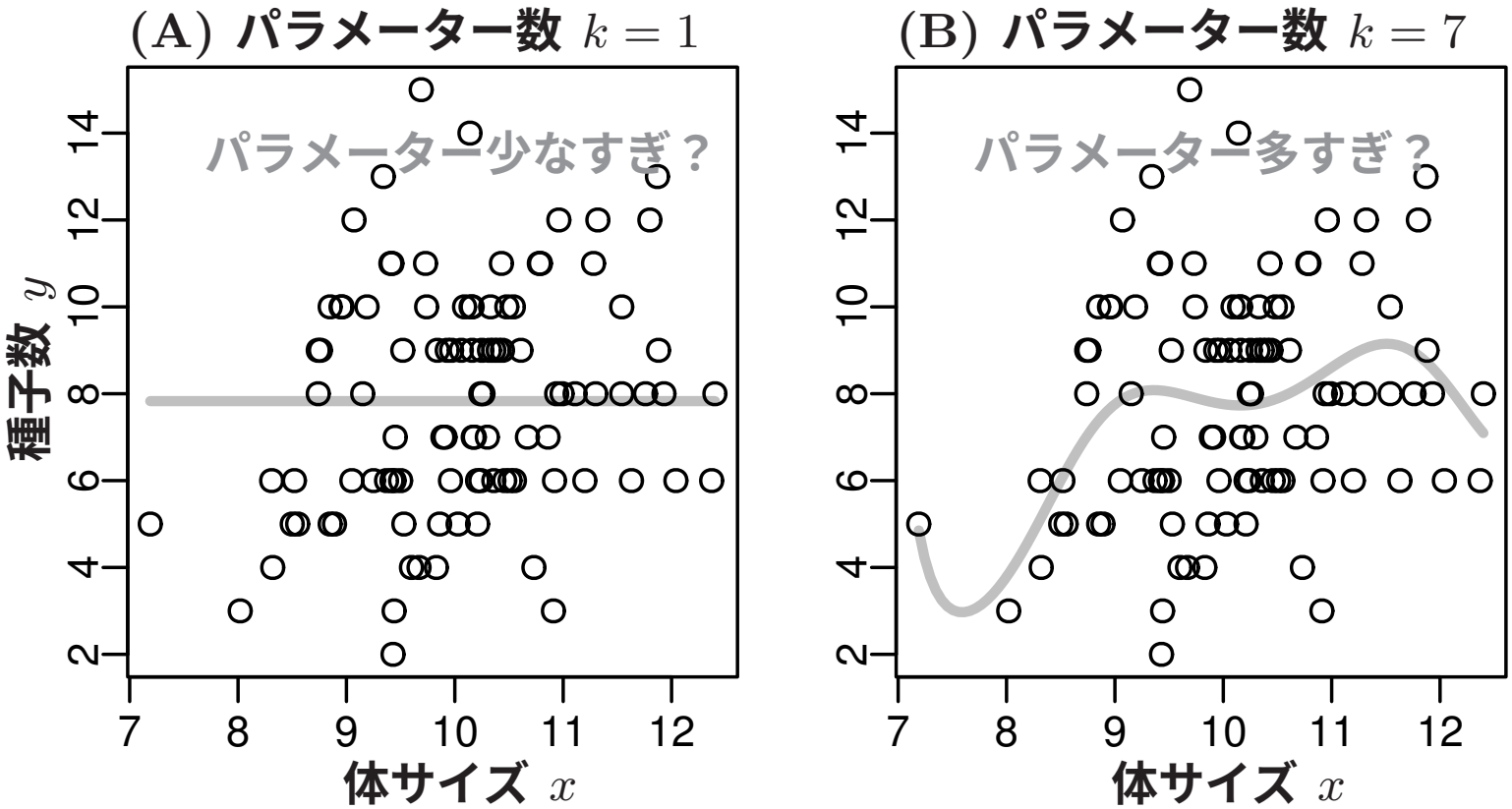
What is the **"best?"** parameter number k?

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

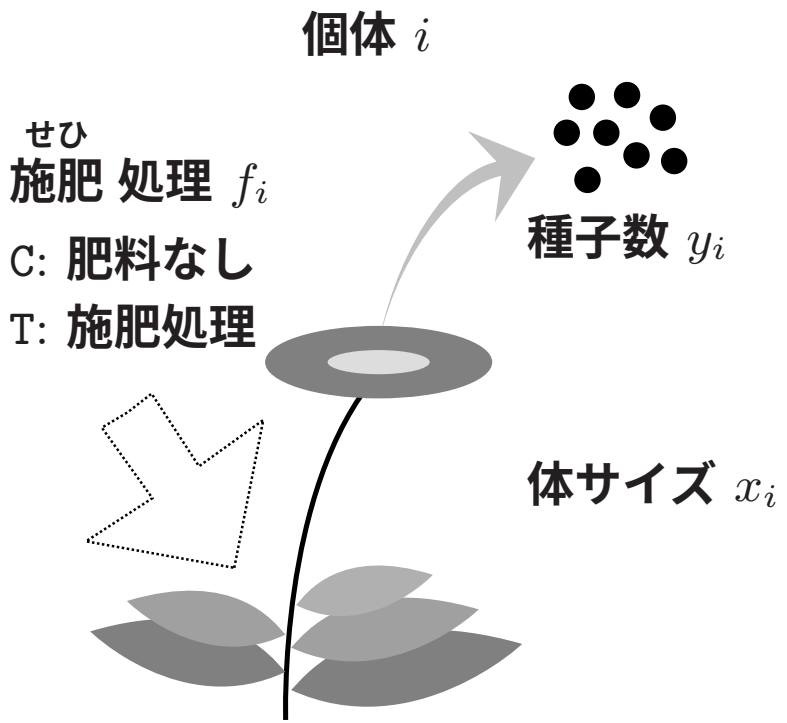
パラメーター数 k は多くても少なくてもヘン?



“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** $\{f_i\}$



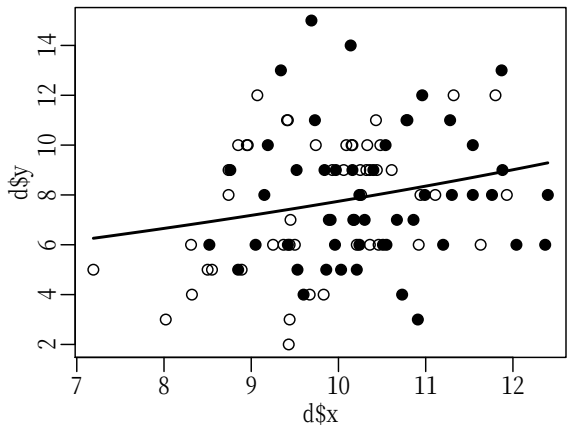
標本数

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

この例題のための統計モデル

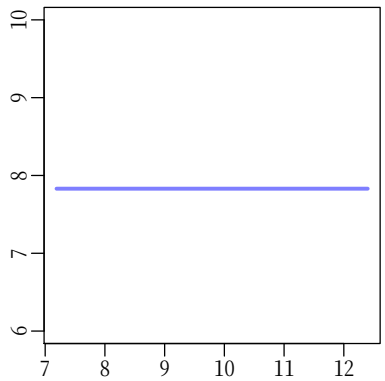
ポアソン回帰のモデル

- **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 λ

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

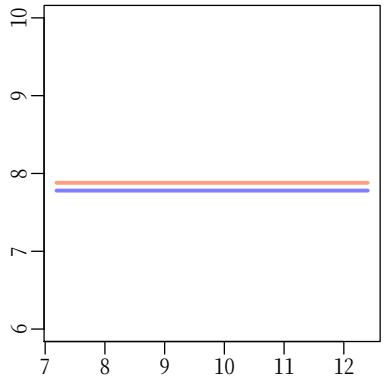


あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

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

4 つの可能なモデル候補: (B) f model

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

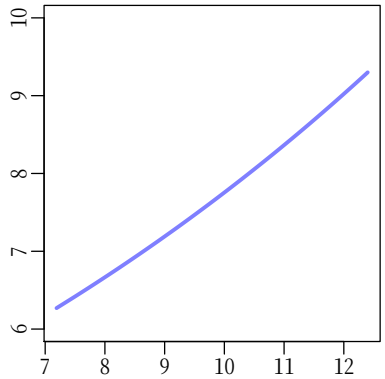


あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> 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

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

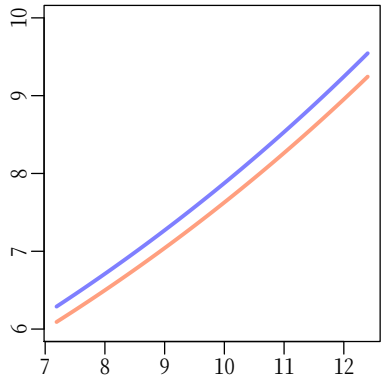


あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

```
> 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

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

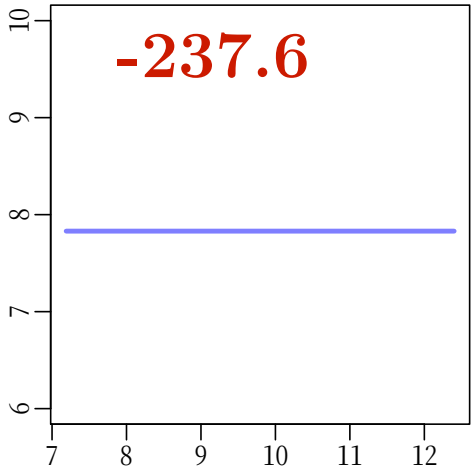


あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

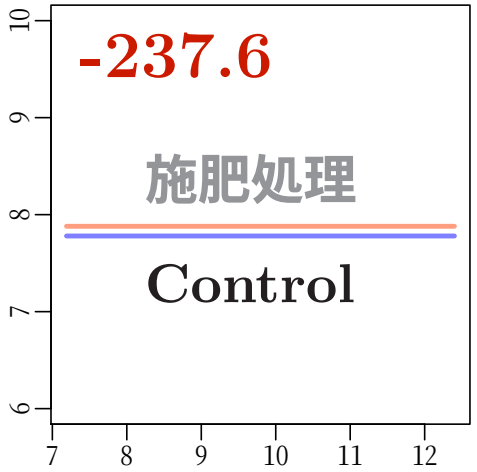
```
> logLik(glm(y ~ x + f, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -235.29 (df=3)
```

パラメーター数が多いとあてはまりが良い

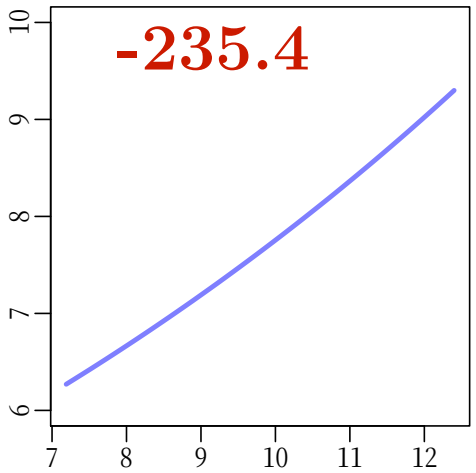
(A) constant λ ($k = 1$)



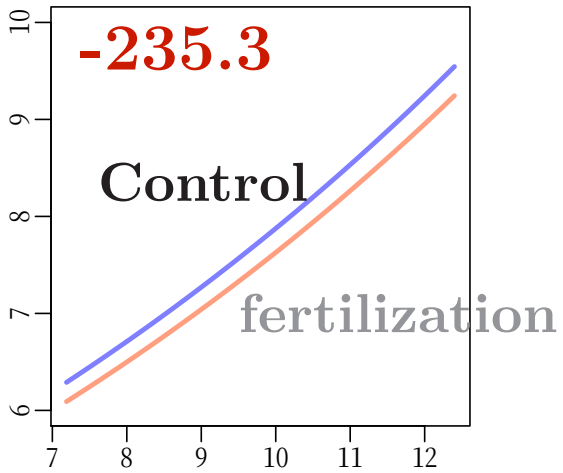
(B) f model ($k = 2$)



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



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



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
```

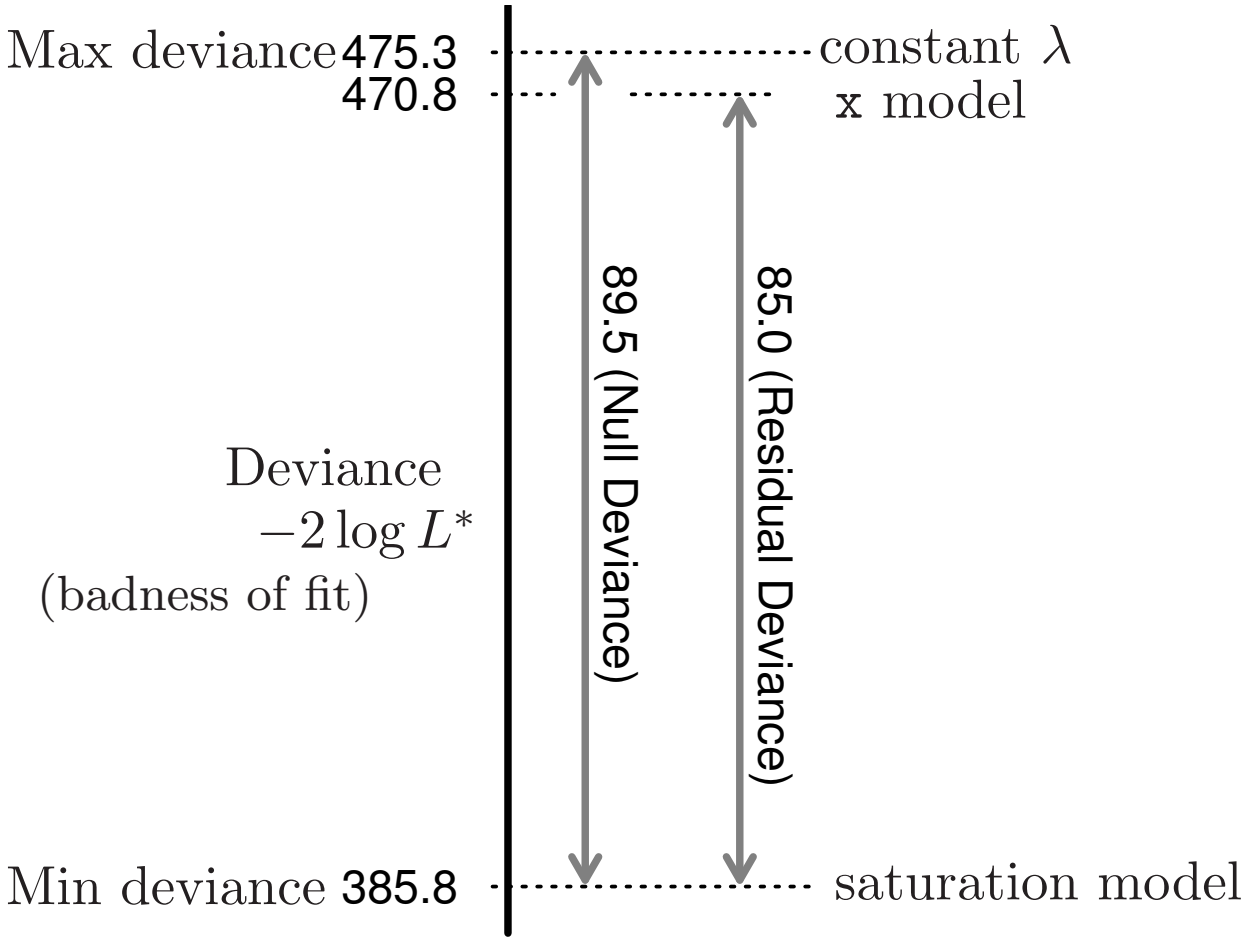
Residual Deviance? Null Deviance? AIC?

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 λ	1	-237.6	475.3	89.5
`f`	2	-237.6	475.3	89.5
`x`	2	-235.4	470.8	85.0
`x + f`	3	-235.3	470.6	84.8
saturation	100	-192.9	385.8	0.0

Null deviance, Residual deviance, ...



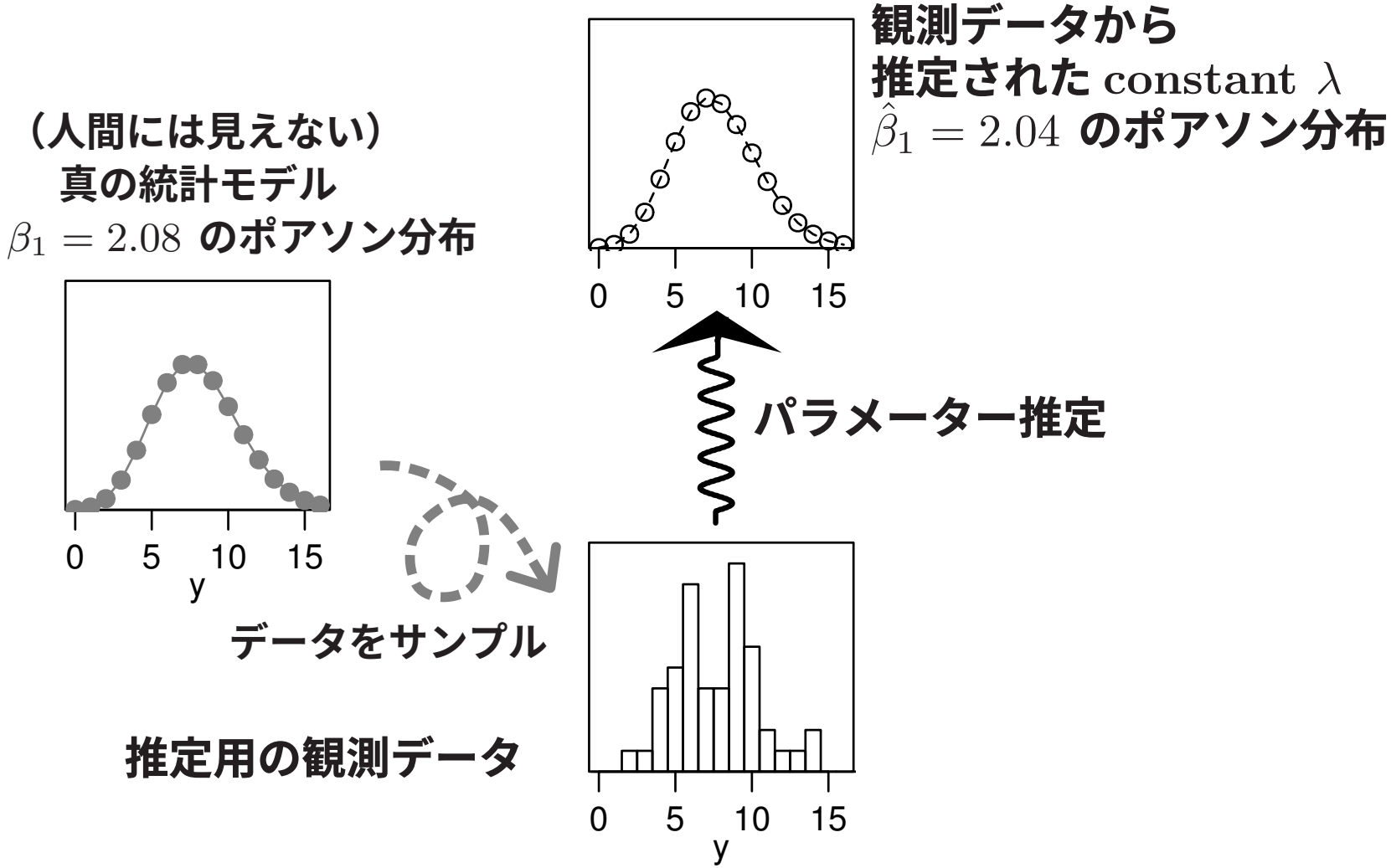
予測の悪さ: $\mathrm{AIC} = -2\log L^* + 2k$

AIC 最小のモデルを選ぶ

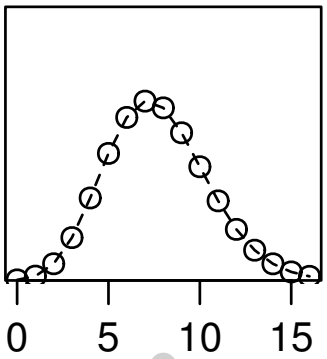
model	k	$\log L^*$	**Deviance** $-2\log L^*$	**Residual deviance**	**AIC**
constant λ	1	-237.6	475.3	89.5	477.3
`f`	2	-237.6	475.3	89.5	479.3
x	**2**	**-235.4**	**470.8**	**85.0**	**474.8**
`x + f`	3	-235.3	470.6	84.8	476.6
saturation	100	-192.9	385.8	0.0	585.8

AIC: A (or Akaike) information criterion

統計モデルによる推測って何だっけ?



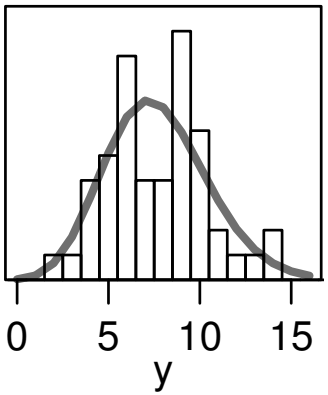
推定に使ったデータであてはまりを評価している?



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

推定用の観測データを使って
あてはまりの良さを評価

すると最大対数尤度
$\log L^*$ が得られる

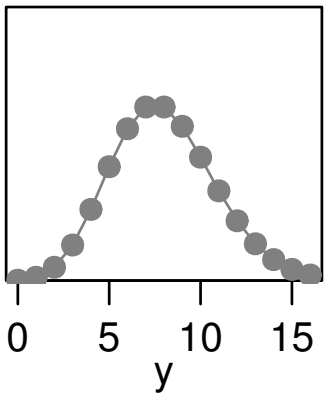


推定用の観測データ

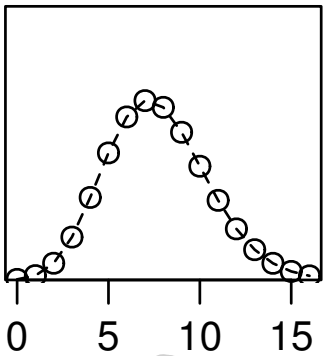
パラメーター推定に使った
データなのであてはまりの
良さにバイアスが生じる
(過大評価)

重要なこと: 新データがあてはまるかどうか

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

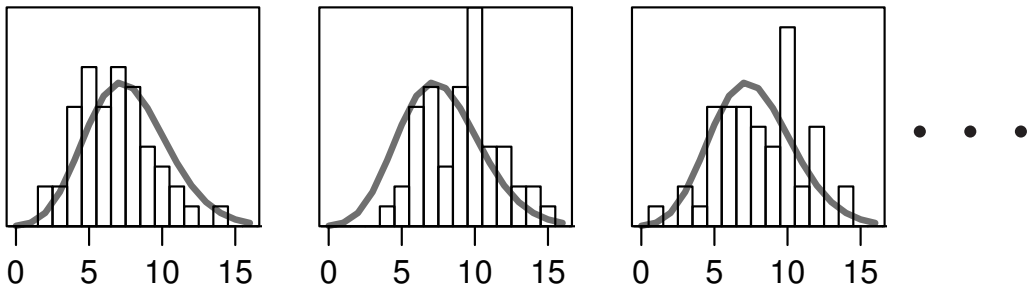


データ
をサンプル
(実際のデータ解析
では不可能)



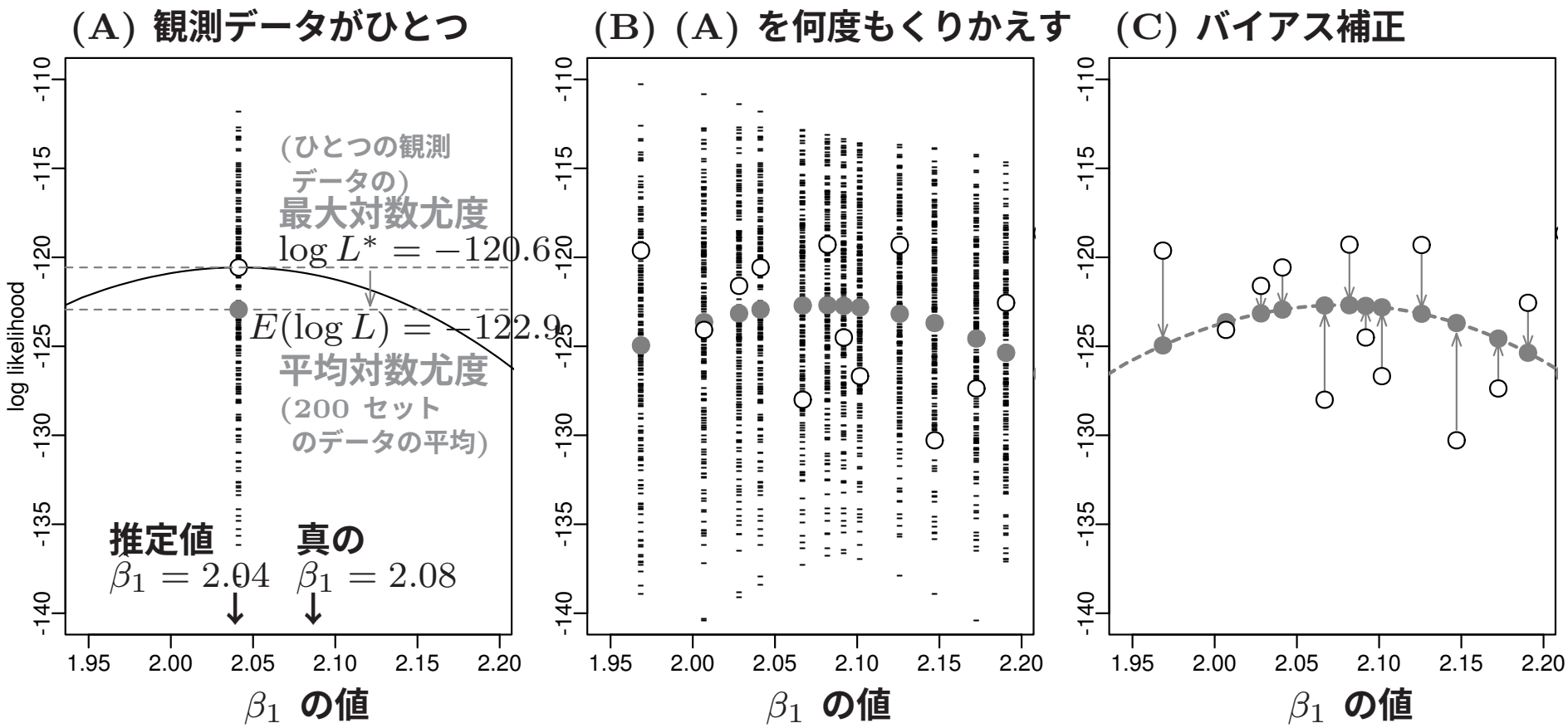
観測データから
推定された constant λ
$\hat{\beta}_1 = 2.04$ のポアソン分布

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

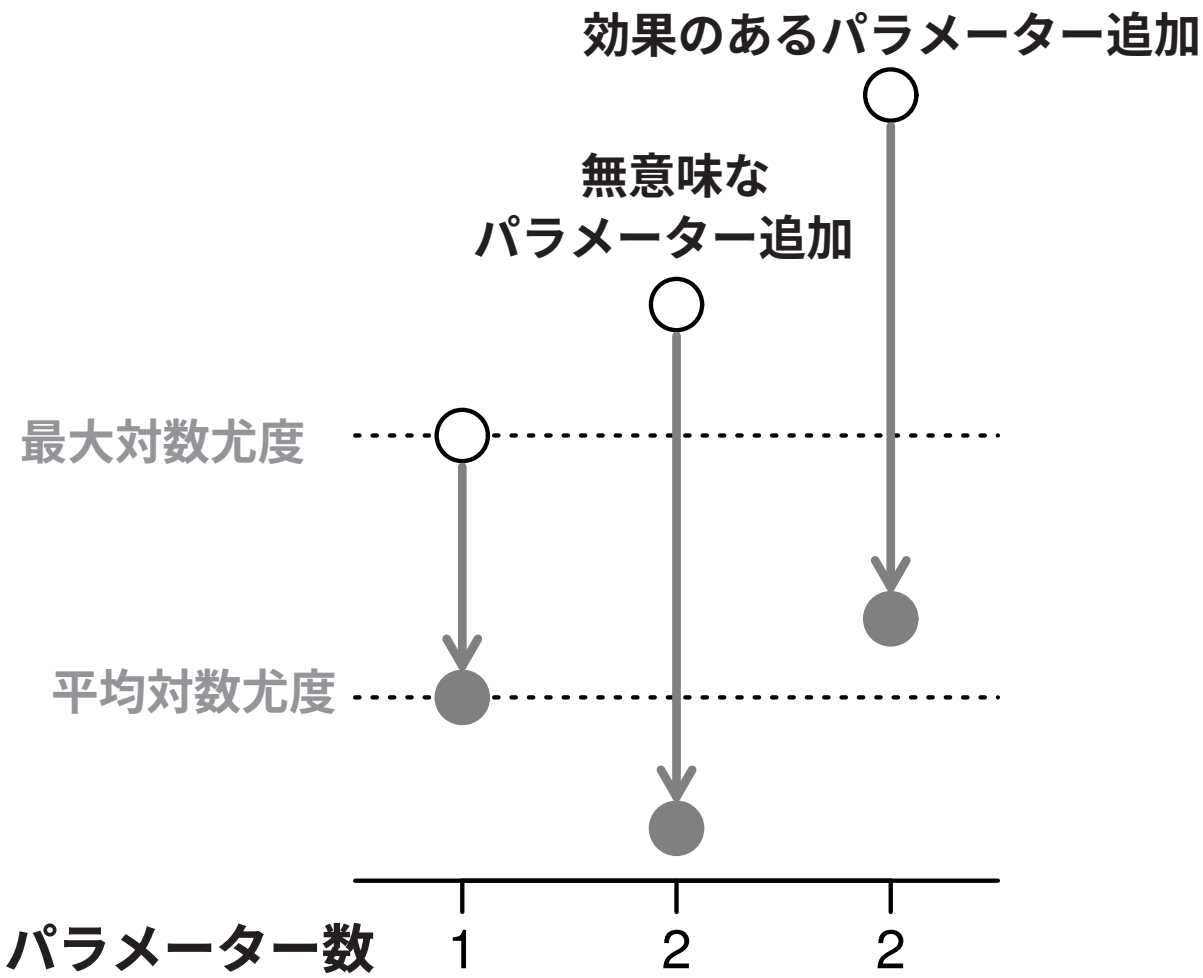


予測の良さ評価用のデータ (200 セット)

シミュレイションで予測の良さを調べる



バイアス補正を図示してみる



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!

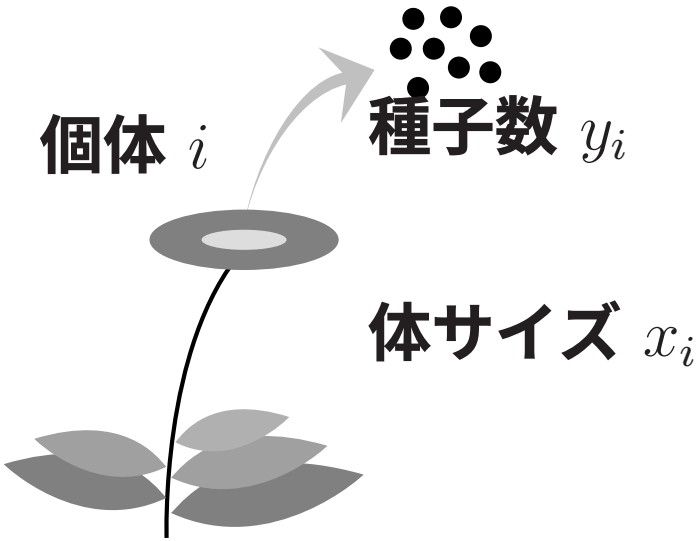
(if ...)

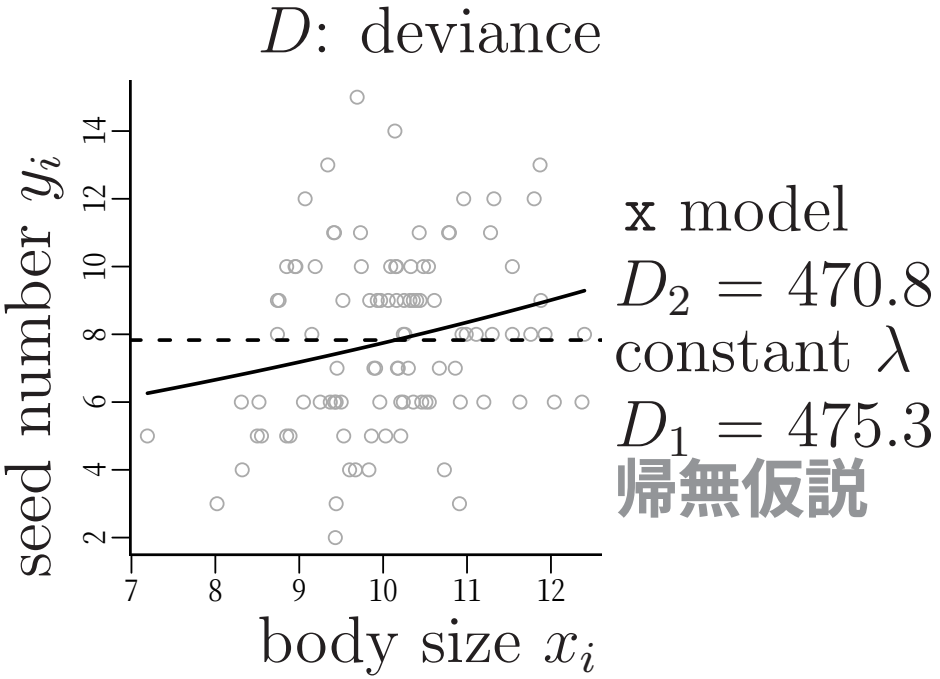
NOT reject

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 λ	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 λ_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

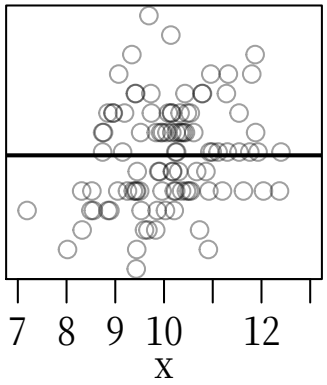
↓  is ...	significant (Reject )	not significant (Not reject )
TRUE	**Type I error**	(no problem)
NOT true	(no problem)	**Type II error**

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

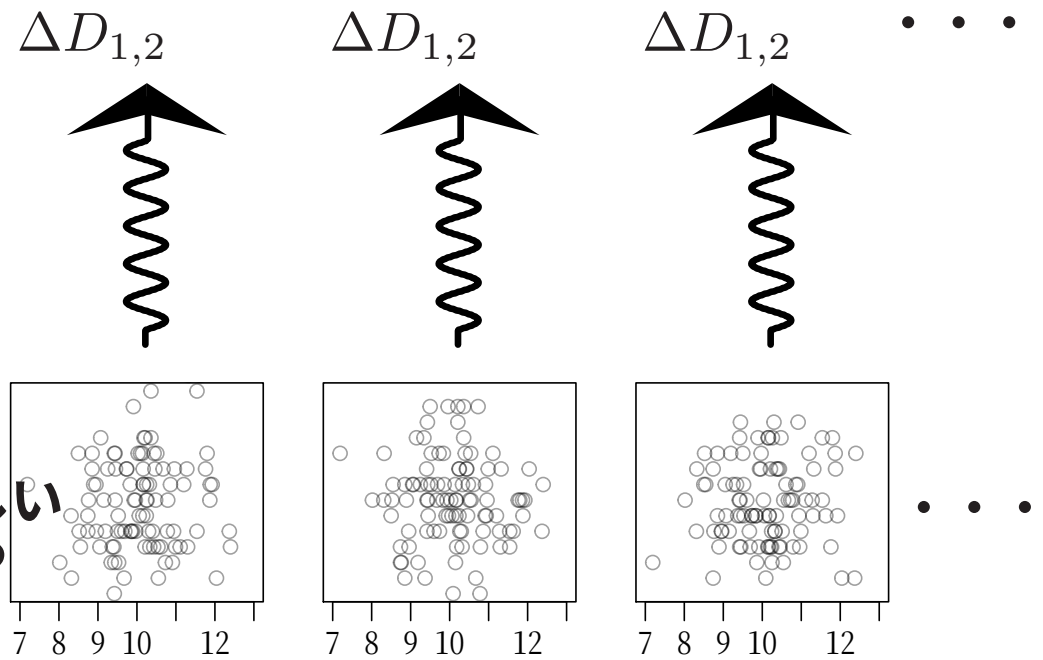
帰無仮説 が真のモデルであるとしよう!

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)



帰無仮説のモデルから新しいデータをたくさん生成する

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



あてはまりの良さ評価用のデータ（多数）

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?

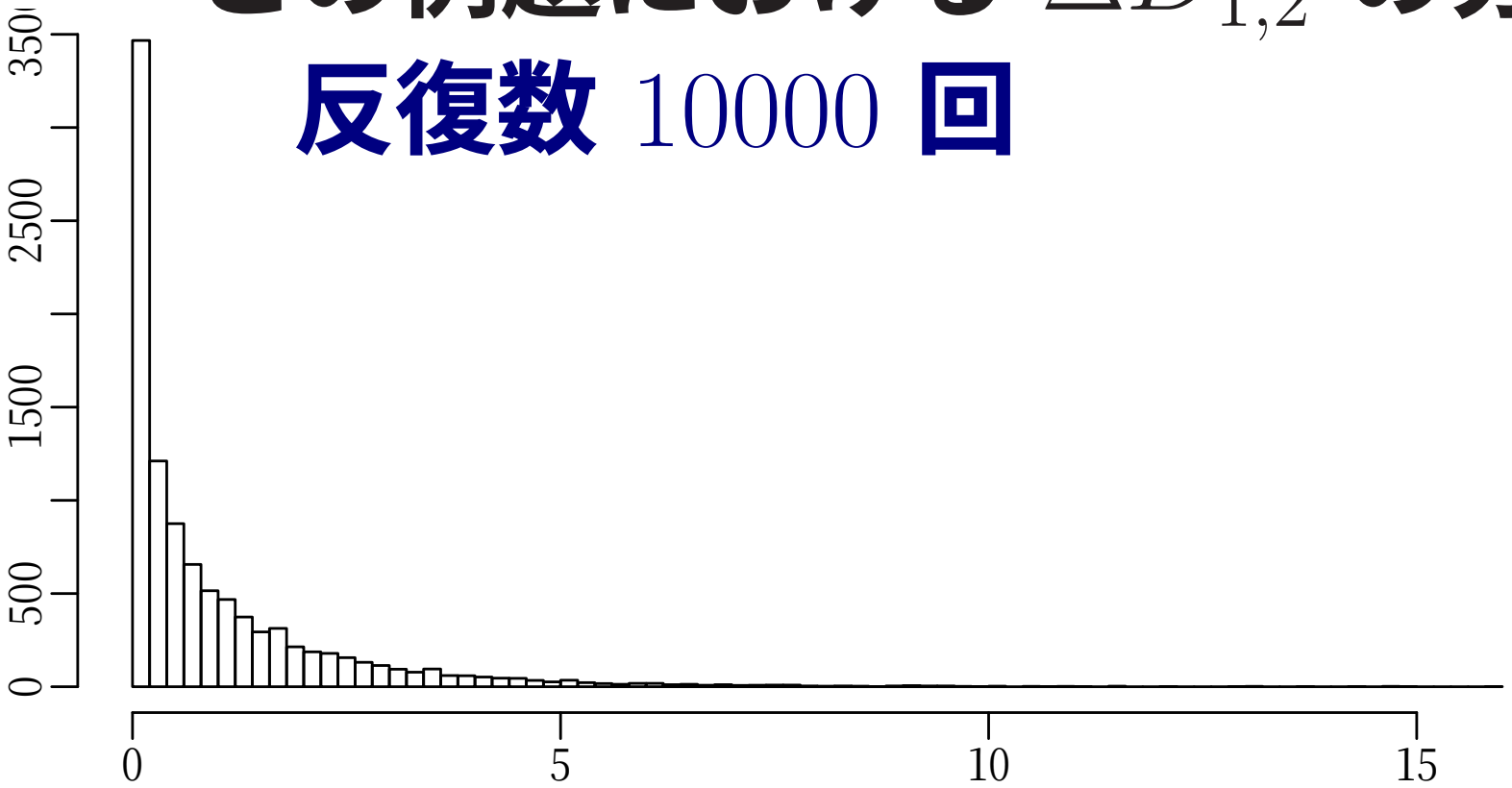
```
> d$y.rnd <- rpois(100, lambda = mean(d$y))
> fit1 <- glm(y.rnd ~ 1, data = d, family = poisson)
> fit2 <- glm(y.rnd ~ x, data = d, family = poisson)
> fit1$deviance - fit2$deviance
```

- `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

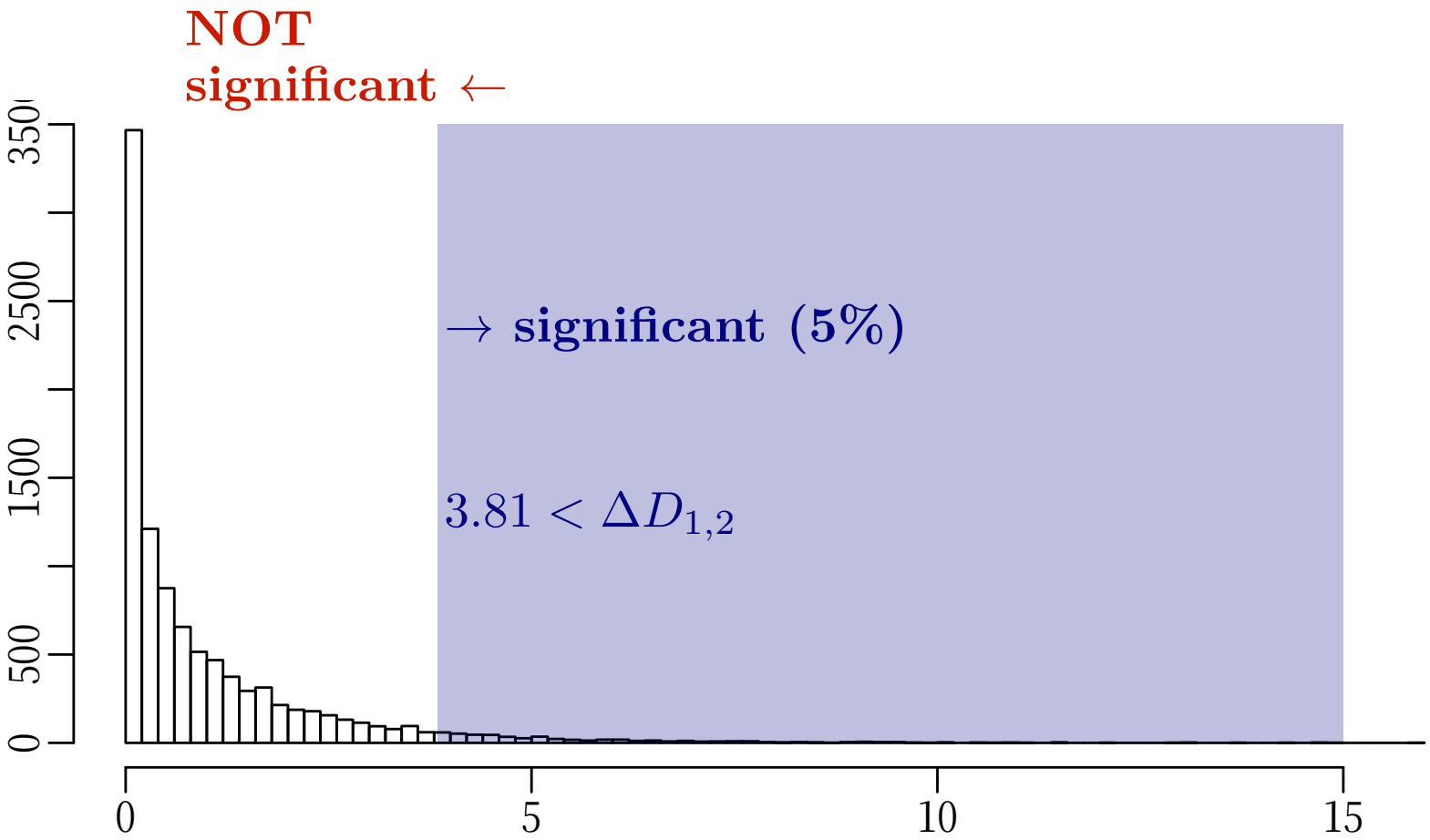
反復数 10000 **回**



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**

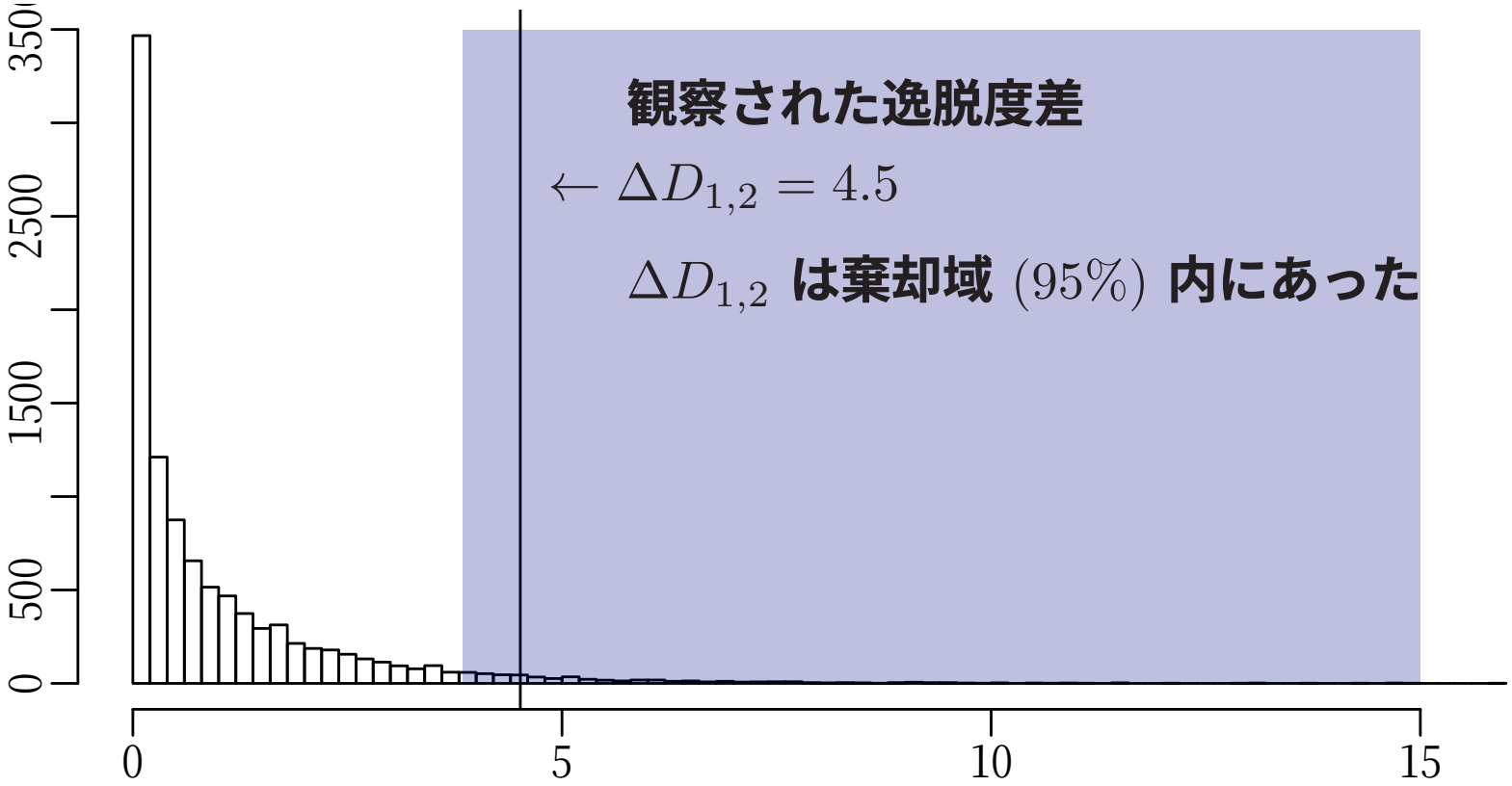
…… てきとーに決めただけ ……



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 λ と x model の逸脱度の差 $\Delta D_{1,2}$

(R code is in the next page)

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

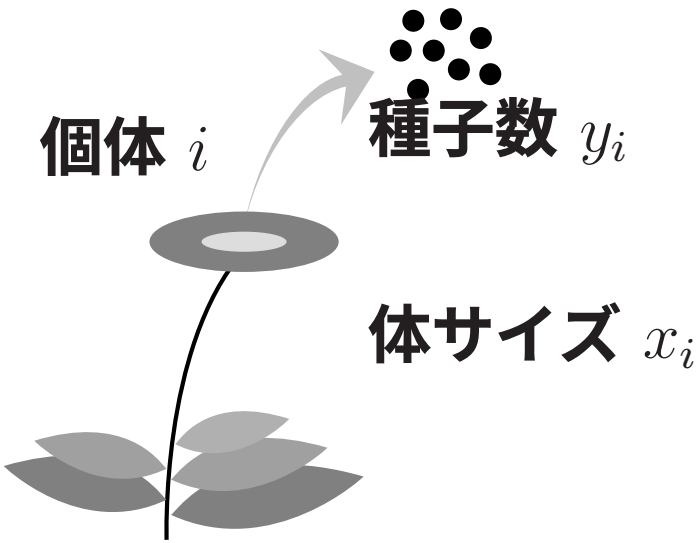
```
> source("pb.R") # reading "pb.R" text file
> dd12 <- pb(d, n.bootstrap = 10000)
> hist(dd12, 100) # to plot histogram
> abline(v = 4.5, lty = 2)
> sum(dd12 >= 4.5)
[1] 332
```

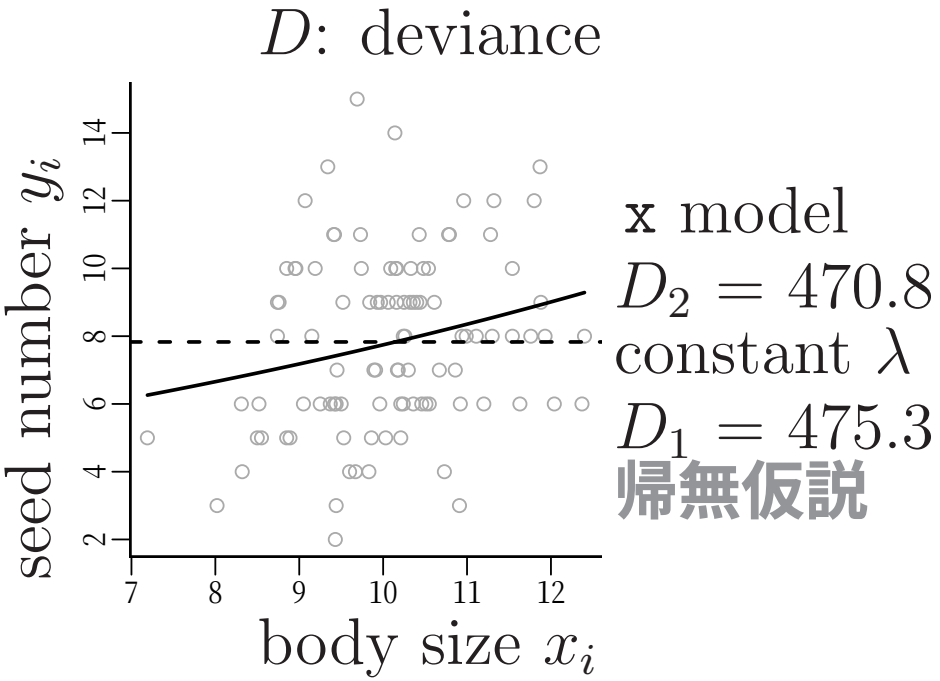
so-called "P-value" is 0.0332.

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 λ.





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

何も結論できない ……

λ 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