統計モデリング入門 2017 (d)

model selection and statistical test
モデル選択と検定

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

霊長研の集中講義 http://goo.gl/76c4i

2017–06–19

ファイル更新時刻: 2017–11–07 15:46

今日のハナシ I

today's example: seed number data, again
1. 前回と同じ例題: 種子数データ
   植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

model selection using AIC
2. AIC を使ったモデル選択
   badness of fit
   あてはまりの悪さ: deviance

statistical test
3. 統計学的な検定
   and its asymmetricity
   そして，その非対称性

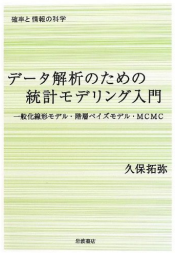
model selection　statistical test
4. モデル選択　と 統計学的な検定
   misunderstanding
   のさまざまな　誤解

今日の内容と「統計モデリング入門」との対応

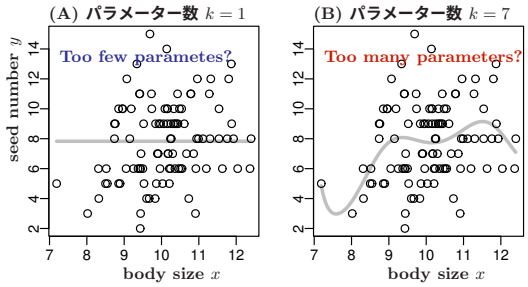
今日はおもに「第 4 章 GLM のモデル選択」と「第 5 章 GLM の尤度比検定と検定の非対称性」の内容を説明します．

- 著者: 久保拓弥
- 出版社: 岩波書店
- 2012–05–18 刊行

http://goo.gl/Ufq2



number of parameters
パラメーター数 は多くても少なくてもヘン?



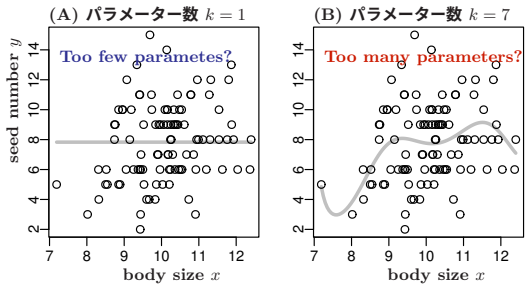
What is the "best?" parameter number k?

today's example: seed number data, again
1. 前回と同じ例題: 種子数データ

植物個体の属性，あるいは実験処理が種子数に影響?

まずはデータの概要を調べる

パラメーター数 k は多くても少なくてもヘン?



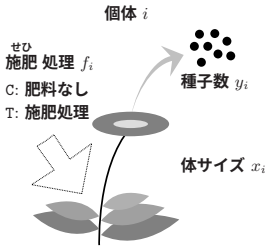
"良いモデル" とはなにか? k も重要なのか?

body size x and fertilization f change seed number y?

個体サイズと実験処理の効果を調べる例題

response variable　seed number
- **応答変数** : **種子数** $\{y_i\}$

explanatory variable
- **説明変数** :
  - body size
    - **体サイズ** $\{x_i\}$
  - fertilization
    - **施肥処理** $\{f_i\}$



sample size
標本数
control
- **無処理** (f_i = C): 50 sample ($i \in \{1, 2, \cdots 50\}$)

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

a statistical model for this example

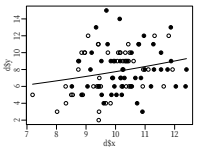
この例題のための統計モデル

ポアソン回帰のモデル

probability distribution　Poisson distribution
- **確率分布** : **ポアソン分布**

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

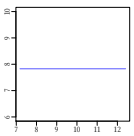
link function　log link function
- **リンク関数**: **対数リンク関数**



4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (A) constant λ

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



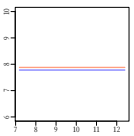
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

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


4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (B) f model

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



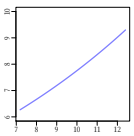
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

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


4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (C) x model

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



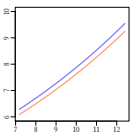
あてはまりの良さを対数尤度 (log likelihood) **で評価する**

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


4 candidate models

4 つの可能なモデル候補: (D) x + f model

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



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

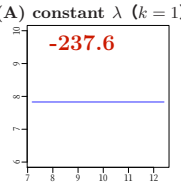
```
> logLik(glm(y ~ x + f, data = d, family = poisson))
'log Lik.' -235.29 (df=3)
```

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?

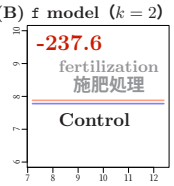
k increases $\rightarrow \log L^*$ increases

パラメーター数が多いとあてはまりが良い

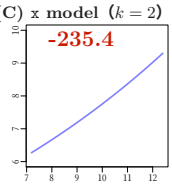
(A) constant λ ($k = 1$)



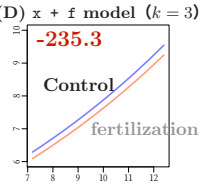
(B) f model ($k = 2$)



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



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



AIC を使ったモデル選択　あてはまりの悪さ : deviance

model selection using AIC

2. AIC を使ったモデル選択

badness of fit

あてはまりの悪さ: deviance

badness of prediction

そして予測の悪さ: AIC

AIC を使ったモデル選択　あてはまりの悪さ : deviance

output

R の glm() は deviance を 出力

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

Call:  glm(formula = y ~ x + f, family = poisson, data = d)

Coefficients:
(Intercept)            x           fT
     1.2631       0.0801      -0.0320

Degrees of Freedom: 99 Total (i.e. Null);  97 Residual
Null Deviance:      89.5
Residual Deviance: 84.8          AIC: 477
```

Residual Deviance? Null Deviance? AIC?

AIC を使ったモデル選択　あてはまりの悪さ : deviance

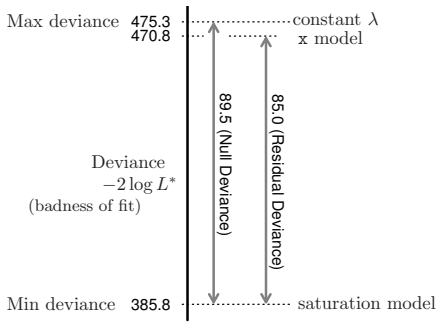
deviance $D = -2 \times \log L^*$

- 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

AIC を使ったモデル選択　あてはまりの悪さ : deviance

Null deviance, Residual deviance, ...



AIC を使ったモデル選択　あてはまりの悪さ : deviance

badness of prediction

予測の悪さ : AIC $= -2 \log L^* + 2k$

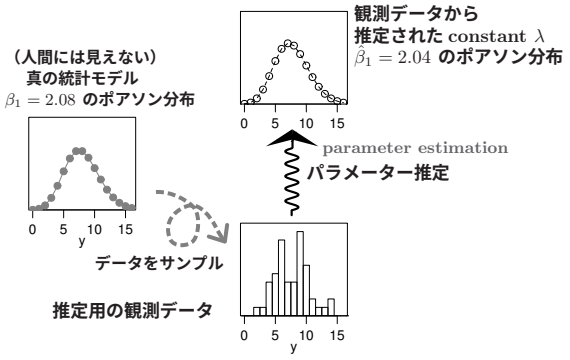
Look for a model of the smallest AIC

AIC **最小のモデルを選ぶ**

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

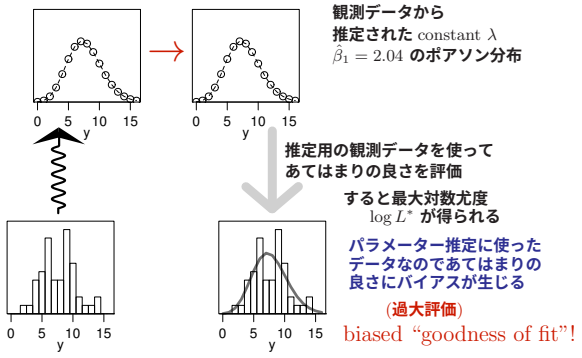
AIC: A (or Akaike) information criterion

統計モデルによる推測 (estimation) って何だっけ?

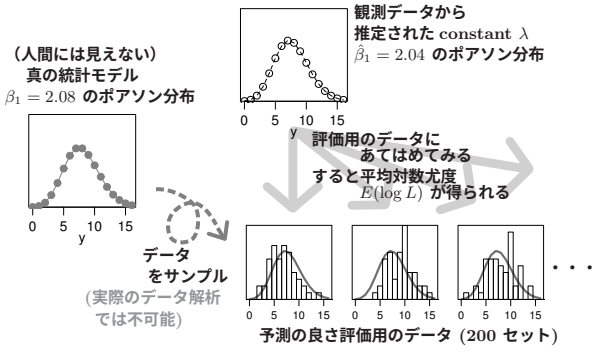


Is it OK? Goodness of fit is evaluated by using the SAME data set ...

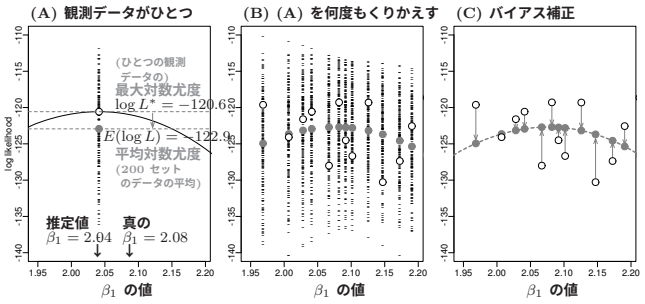
推定に使ったデータであてはまりを評価している?



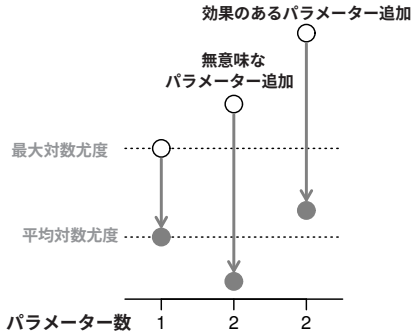
重要なこと: 新データがあてはまるかどうか



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



statistical test

3. 統計学的な検定

and its asymmetricity

そして，その非対称性

likelihood ratio test

ここでは 尤度比検定 を紹介

Although their procedures are similar ... they are totaly different!

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

model selection　　statistical test

モデル選択 と 統計学的検定 は

totally different in their objectives

その目的がぜんぜんちがう

Objective

目的?

model selection

モデル選択:

Look for a model of better prediction

よい予測をするモデルの探索

statistical test　　rejection of null hypothesis

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		Alternative hypothesis
帰無仮説	VS	対立仮説
glm(y ~ 1) is better!		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		Alternative hypothesis
帰無仮説	VS	対立仮説
glm(y ~ 1) is better!		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

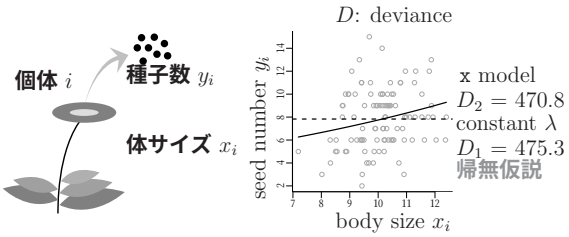
Null hypothesis		Alternative hypothesis
帰無仮説	VS	対立仮説
glm(y ~ 1) is better!		glm(y ~ x) is better!

test!

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

非対称性 asymmetricity?

また同じ例題 The same example, again



neglect fertilization treatment
(施肥処理は無視!)

test statistics
検定統計量 $\Delta D_{1,2}$

difference in deviance $\Delta D_{1,2} = D_1 - D_2 = \mathbf{4.51} \approx 4.5$
likelihood ratio? — $\log \frac{L_1^*}{L_2^*} = \log L_1^* - \log L_2^*$

model	k	$\log L^*$	Deviance $-2\log L^*$	
constant λ	1	-237.6	$D_1 = 475.3$	null hypothesis 帰無仮説
x	2	-235.4	$D_2 = 470.8$	alternative hypothesis 対立仮説

asymmetricity in test Null hypothesis is junk
検定の非対称性：**帰無仮説はゴミあつかい**
... yet we are focousing only on null hypothesis
……にもかかわらず，帰無仮説だけをしつこく調べる

How to make null model
帰無仮説のつくりかた

Null hypothesis is included in Alt hypothesis
対立仮説の中に帰無仮説がある

this is a "nested" model
(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
- alternative hypothesis 対立仮説 の一例: $\log \lambda_i = \beta_1 + \beta_2 x_i$
- null hypothesis ネストした 帰無仮説 : $\log \lambda_i = \beta_1$ (切片だけのモデル)

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

observerd
観察された逸脱度差 $\Delta D_{1,2} = 4.5$ は……

↓帰無仮説は	「めったにない差」(帰無仮説を棄却)	「よくある差」(棄却できない)
真のモデルである	第一種の過誤	(問題なし)
真のモデルではない	(問題なし)	第二種の過誤

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

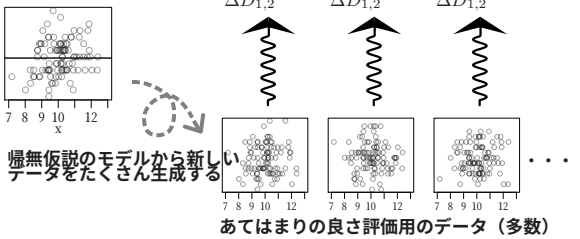
asymmetricity in test evaluating only Type-I error
検定の非対称性：**第一種の過誤だけに注目**

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

Suppose null hypothesis is TRUE!

帰無仮説 が真のモデルであるとしよう!
帰無仮説が真の統計モデルということにしてしまう
($\hat{\beta}_1 = 2.06$ のポアソン分布)

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



あてはまりの良さ評価用のデータ（多数）

How to generate $\Delta D_{1,2}$ under is TRUE?

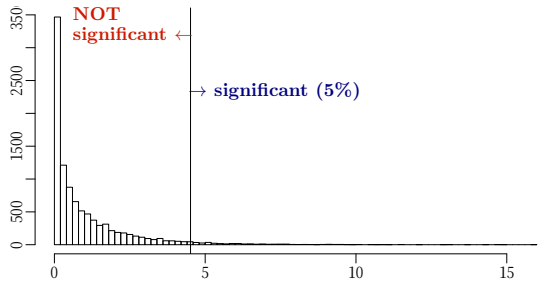
```
> d$y.rnd <- rpois(100, lambda = mean(d$y))
> fit1 <- glm(y.rnd ~ 1, data = d, family = poisson)
> fit2 <- glm(y.rnd ~ x, data = d, family = poisson)
> fit1$deviance - fit2$deviance
```

generation of random numbers virtual data
- `rpois()` による ポアソン乱数の生成 (架空データ)

fitting GLM to the virtual data
- 架空データを使って `glm()` あてはめ

You must define "rejection region" in advance
あらかじめ棄却域を決めておく

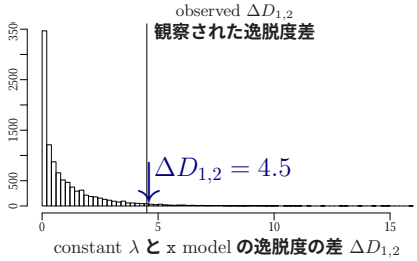
say, 5%?
たとえば 5% **とか**?



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

```
get.dd <- function(d) # データの生成と逸脱度差の評価
{
  n.sample <- nrow(d) # データ数
  y.mean <- mean(d$y) # 標本平均
  d$y.rnd <- rpois(n.sample, lambda = y.mean)
  fit1 <- glm(y.rnd ~ 1, data = d, family = poisson)
  fit2 <- glm(y.rnd ~ x, data = d, family = poisson)
  fit1$deviance - fit2$deviance # 逸脱度の差を返す
}
pb <- function(d, n.bootstrap)
{
    replicate(n.bootstrap, get.dd(d))
}
```


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



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

(R code is in the next page)

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

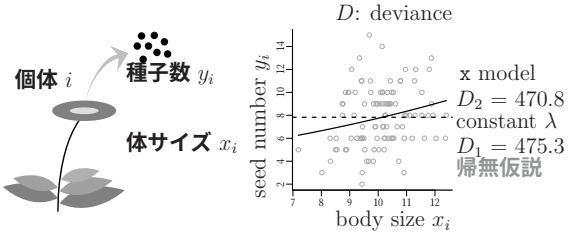
```
> source("pb.R") # reading "pb.R" text file
> dd12 <- pb(d, n.bootstrap = 1000)
> hist(dd12, 100) # to plot histogram
> abline(v = 4.5, lty = 2)
> sum(dd12 >= 4.5)
[1] 38
```

so-called "P-value" is 0.038.

In this case, null hypothesis 帰無仮説 is rejected

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

x model is better than constant λ.



D: deviance

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

You can conclude NOTHING!

何も結論できない……

You can NOT state that constant λ (Null hypothesis) is better
λ 一定のモデルが良いとは言えない

Null hypothesis is never accepted

asymmetricity in stat-test
検定の非対称性 : 帰無仮説 はけっして受容されない

model selection statistical test
4. モデル選択 と 統計学的な検定

misunderstanding
のさまざまな 誤解

とりあえず FAQ モデル選択

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