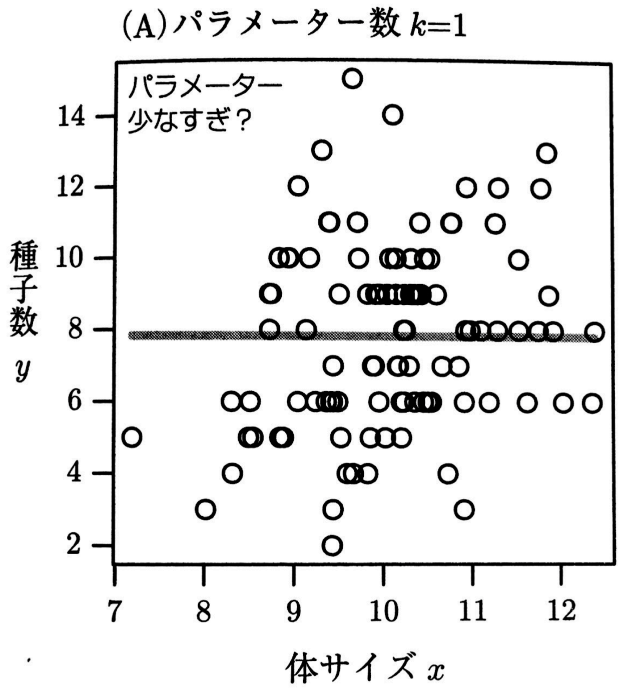
第4章:GLMのモデル選択(前半)

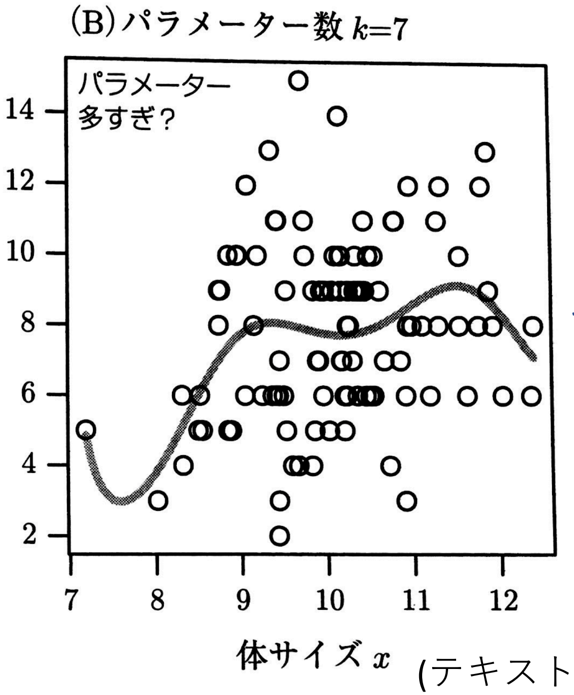
太田研究室 学部4年 和田

章の概要：「良い」モデルとは何か？どのような規準で選択すればいいか？

パラメーター数(k)を多くすればする分、**最大対数尤度**は大きくなる



$$\log\lambda = \beta_1$$
$$k = 1$$
最大対数尤度：小



(テキストより)

$$\log\lambda = \beta_1 + \beta_2 x + \ \dots + \beta_7 x^6$$
$$k = 6$$
最大対数尤度・大

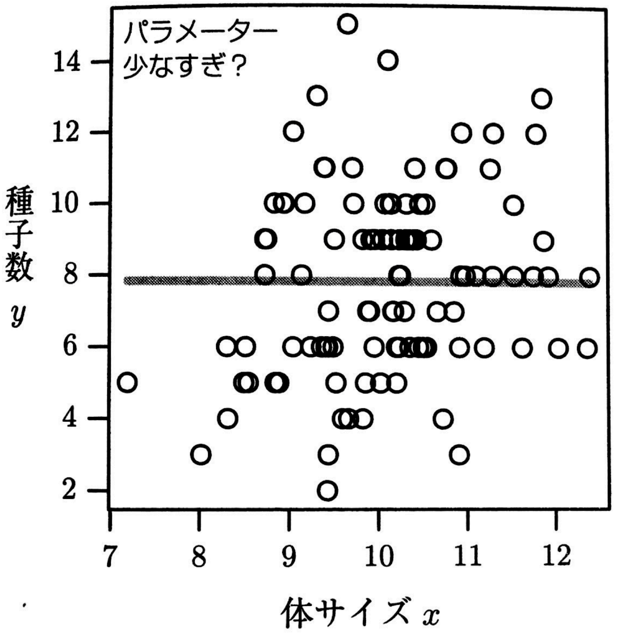
こちらの方がモデルとして
優れている
……とは限らない！

章の概要：「良い」モデルとは何か？どのような基準で選択すればいいか？

パラメーター数(k)を多くすればする分、**最大対数尤度**は大きくなる

観測データへのあてはまりの良さ

(A)パラメーター数 k=1

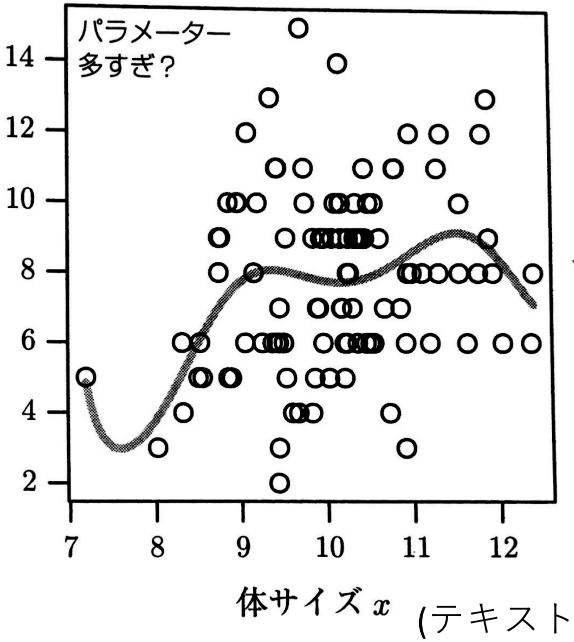


$\log \lambda = \beta_1$

$k = 1$

最大対数尤度：小

(B)パラメーター数 k=7



(テキストより)

$\log \lambda = \beta_1 + \beta_2 x + \ldots + \beta_7 x^6$

$k = 6$

最大対数尤度・大

こちらの方がモデルとして優れている

……とは限らない！

要確認

【理由】
- 計算処理
- 実際の現象との乖離

最大対数尤度以外の、新しいモデルの評価法・選択規準：
「当てはまりの悪さ」→**逸脱度**
「そのモデルは良い予測をするのか？」→ **AIC**

4.1 データはひとつ、モデルはたくさん

モデル候補の選定
「あてはまりの良さ」基準は万能ではない

逸脱度
「あてはまりの悪さ」という評価法

AIC
「予測の良さ」という選択規準

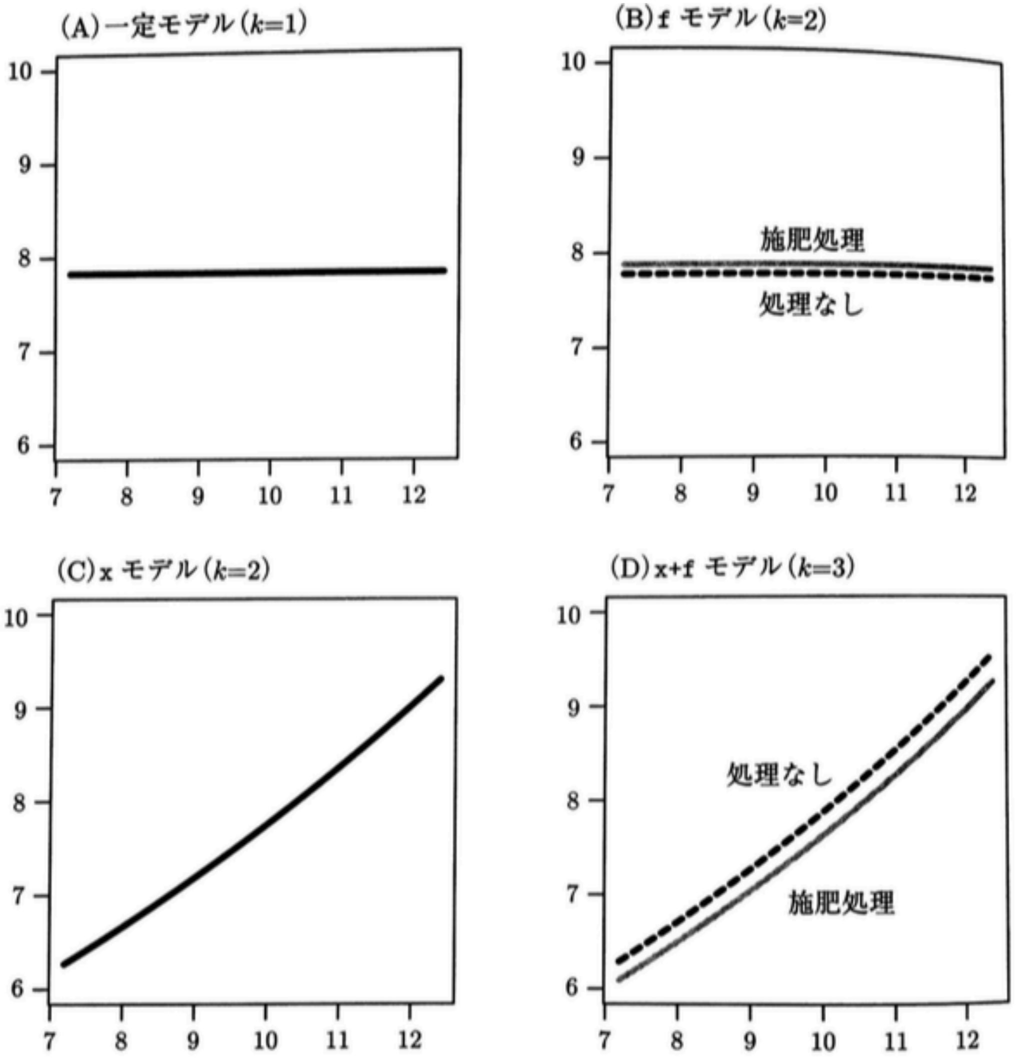
ネストの問題
ネストとは

AICの有用性
なぜAICはモデル選択基準として有用なのか

一つのデータに対し、考慮する説明変数のパターン(=候補となるモデル)はたくさんある

体のサイズx_iも施肥の有無も、種子の量y_iに影響しない

施肥の有無f_iのみが種子の量y_iに影響する



体のサイズx_iのみが種子の量y_iに影響する

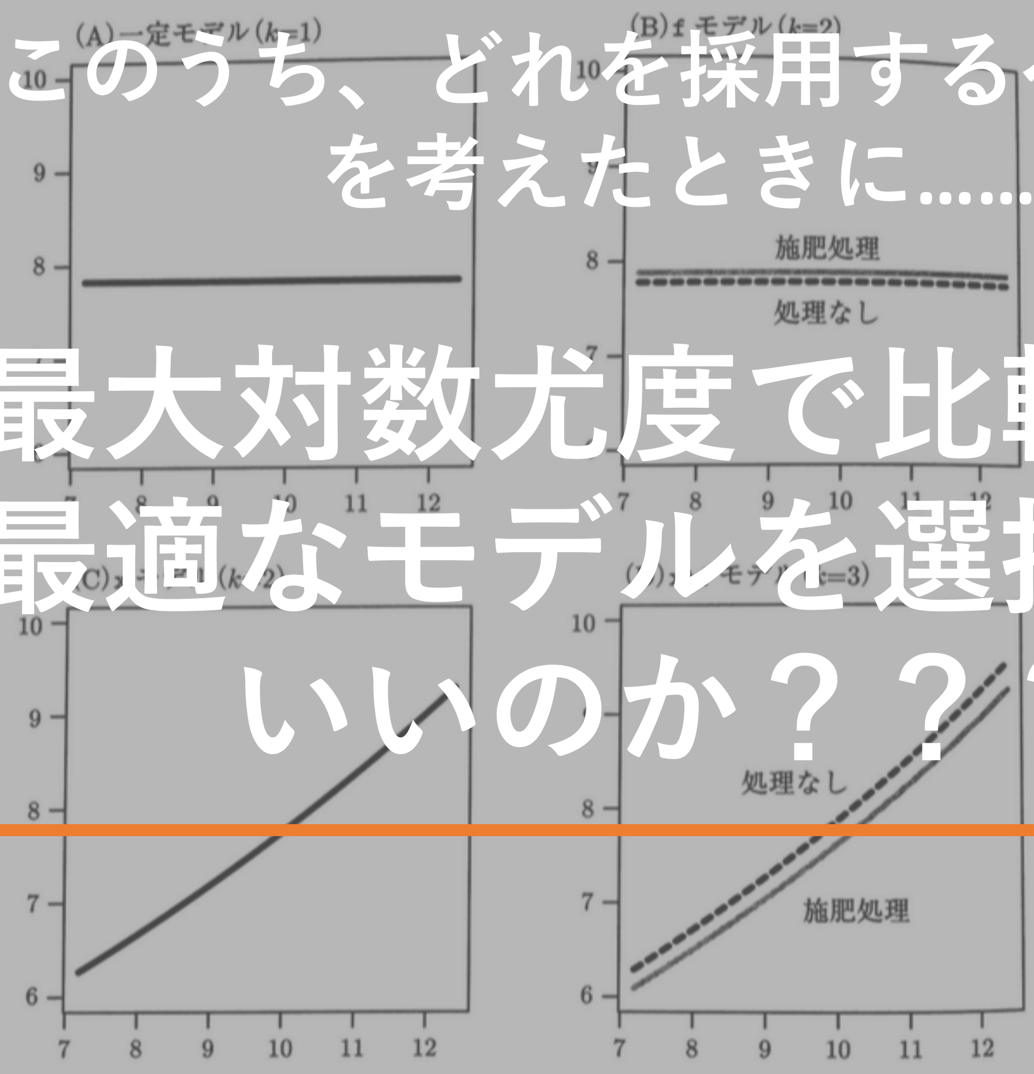
施肥の有無f_iと、体のサイズx_iの両方が、種子の量y_iに影響する

(テキストより)

一つのデータに対し、考慮する説明変数のパターン(=候補となるモデル)はたくさんある

体のサイズx_iも施肥の有無も、種子の量y_iに影響しない

体のサイズx_iのみが種子の量y_iに影響する



(テキストより)

施肥の有無f_iのみが種子の量y_iに影響する

施肥の有無f_iと、体のサイズx_iの両方が、種子の量y_iに影響する

このうち、どれを採用するべきか？
を考えたときに……

最大対数尤度で比較し、最適なモデルを選択していいのか？？？

4.2 統計モデルのあてはまりの悪さ：逸脱度

モデル候補の選定
「あてはまりの良さ」基準は万能ではない

逸脱度
「あてはまりの悪さ」という評価法

AIC
「予測の良さ」という選択規準

ネストの問題
ネストとは

AICの有用性
なぜAICはモデル選択基準として有用なのか

モデルのデータへのあてはまりの悪さ「逸脱度」は、最大対数尤度の変形

- 「**逸脱度**」, Deviance, D
- 統計モデルの、データへの「あてはまりの悪さ」の指標

$$D = -2\ logL^*$$

$logL(\{\beta_j\})$を$logL$、
その最大対数尤度を$logL^*$と表記

glm()コマンドの出力結果に表示

名前	In English	定義
逸脱度 (D)	Deviance	$-2\ logL^*$
最小の逸脱度	Minimum deviance	フルモデル(後述)をあてはめたときのD
残差逸脱度	Residual deviance	D – 最小のD
最大の逸脱度	Maximum deviance	Nullモデル(後述)をあてはめたときのD
Null 逸脱度	Null deviance	最大のD – 最小のD

フルモデル、Nullモデルはそれぞれ、パラメーター数を最大、最小(1)にした場合のモデルである①

「**フルモデル**」(full model)　…　最もあてはまりがいいモデル

- 個々のデータに、一対一対応でパラメーター**λ**が定まっている
  - 100個のデータがあれば100個の**λ**を定めている

例：$y_i = \{6,6,6,12,\ldots\}$のとき、
$i \in \{1,2,3\}$の y_i は6なので、$\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\} = \{6,6,6\}$
$i = 4$のy_4は12なので、$\lambda_4 = 12$
…(以後同上)

フルモデルを当てはめた時の
逸脱度＝最小のD(minimum deviance)

- (同じ回帰で)他のどのモデルを使った時よりも、必然的に対数尤度は最大、逸脱度は最小になる
- 「現象を説明しうる理想のモデルを考えている」のではなく、「現在のデータ(のみ)にモデルを近づけている」ので、モデルとしての価値はない

フルモデル、Nullモデルはそれぞれ、パラメーター数を最大、最小(1)にした場合のモデルである②

「**Nullモデル**」(Null model)　…　最もあてはまりが悪いモデル

- パラメーター数が1
  - つまり、この文脈においては$\lambda = \exp(\beta_1)$
- パラメーターは、全ての説明変数から完全に独立である
- (同じ回帰で)他のどのモデルを使った時よりも、必然的に対数尤度は最小、逸脱度は最大になる

Nullモデルを当てはめた場合の逸脱度
＝最大のD (Maximum deviance)

種々の逸脱度の関係性は以下

(あてはまりが悪い)

最大のD

一つのデータ
に対し固定

Nullモデル

結果を見てみたい
任意のモデル

モデルAのD

モデルA

Null deviance(Null逸脱度)

そのモデルの当てはまりの良さ

Residual deviance
(残差逸脱度)

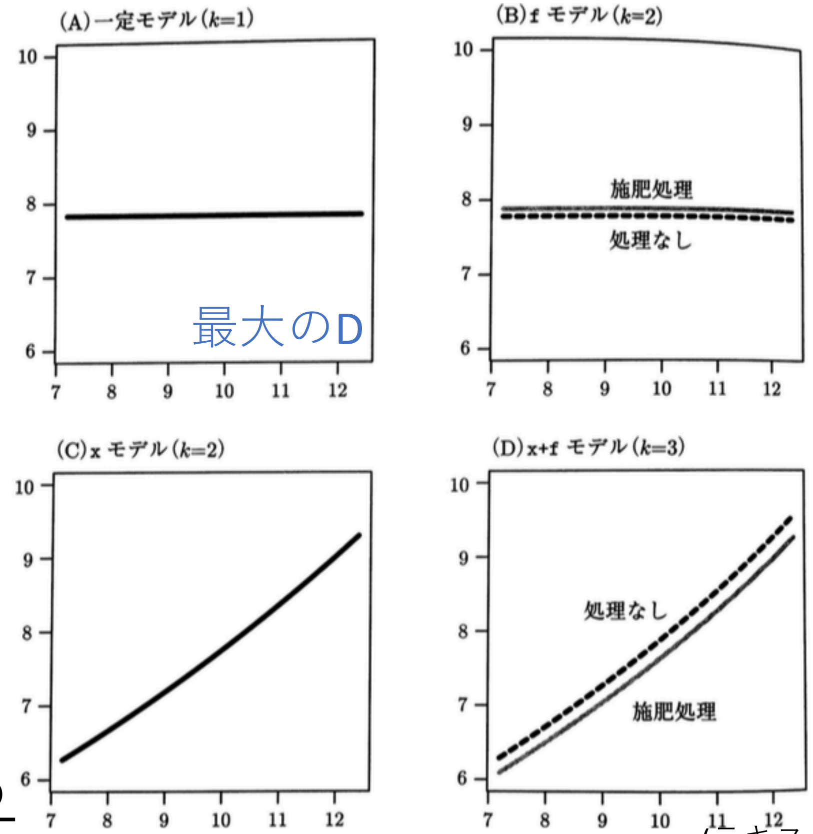
モデルAの
残差逸脱度

Decianve=逸脱度
$-2\ logL$

最小のD

フルモデル

(あてはまりがいい)

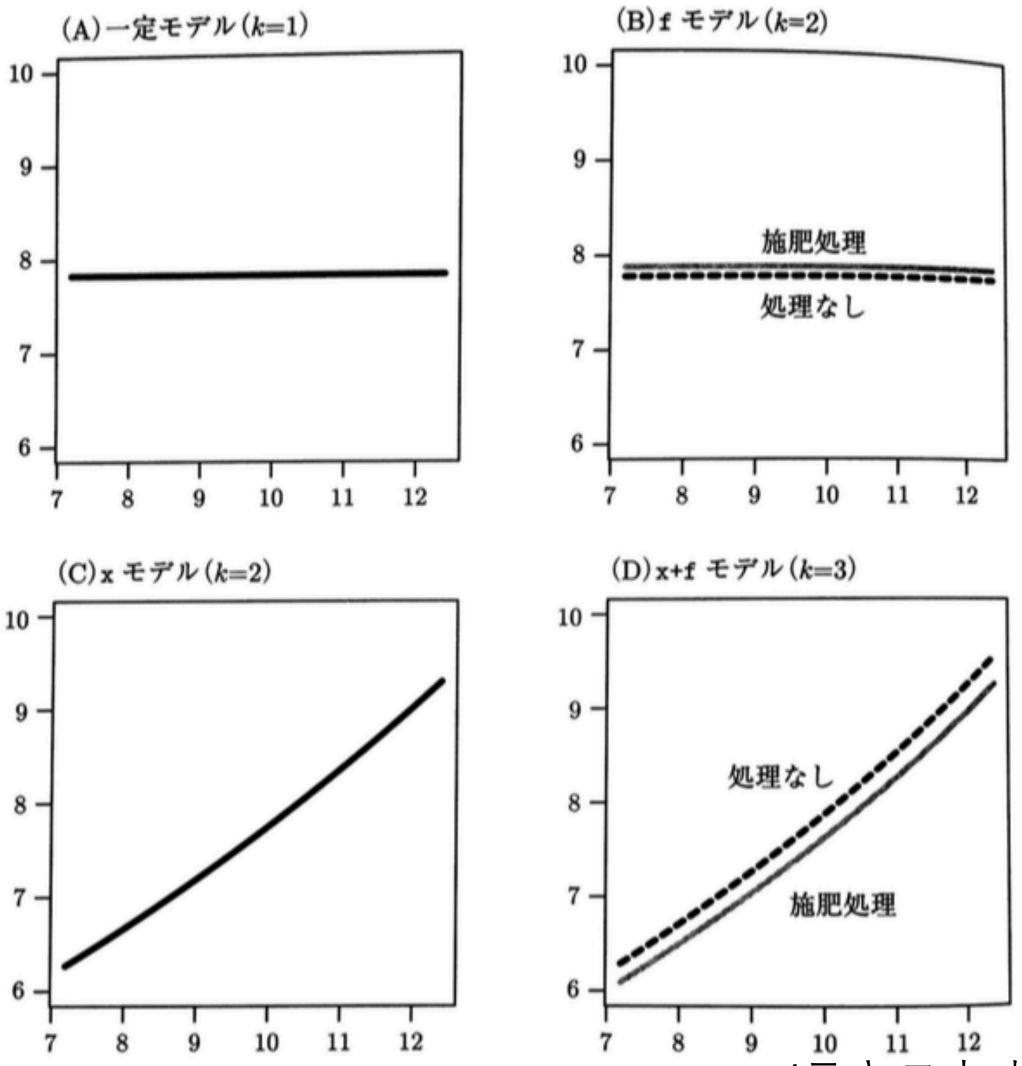


(テキストより)

<u>パラメーター数が増えるほど、(残差)逸脱度は減る</u>

R実践：残差逸脱度の算出・比較

R実践：残差逸脱度の算出・比較



(テキストより)

モデル	k	logL*	Deviance	Residual D
A:一定	1	-237.6	475.3	89.5
B: f	2	-237.6	475.3	89.5
C: x	2	-235.4	470.8	85.0
D: x+f	3	-235.3	470.6	84.8
フル	100	-192.9	385.8	0.0

4.3 モデル選択規準AIC

- **モデル候補の選定**
  「あてはまりの良さ」基準は万能ではない
- **逸脱度**
  「あてはまりの悪さ」という評価法
- **AIC**
  「予測の良さ」という選択規準
- **ネストの問題**
  ネストとは
- **AICの有用性**
  なぜAICはモデル選択基準として有用なのか

AICの比較により「予測の良さ」を重視したモデル選択を行うことができる

AIC (Akaike's information criiterion)

- 「モデル選択規準」(model selection criterion)の一つ
- 予測の良さを重視する　　(~~当てはまりの良さ~~)
- 小さい方が「良い」モデル

$$AIC = -2\{(最大対数尤度) - (パラメーター数)\}$$
$$= -2(logL^* - k)$$
$$= \boxed{\boldsymbol{-2logL^*}} \boldsymbol{+2k}$$

要確認

「基準」と「規準」の違いとは？

「**規準**」…何を測定するか。何の指標を用いるか。
辞書「何かを行う際に手本・標準とすべきもの」
Eg「道徳の規準」「社会生活の規準」

「**基準**」…どこまで達成できたか。測定された値に基づく評価。
辞書「物事を判断するためのよりどころ。標準と見なす数値など」
Eg「選考基準」「前年を基準に予算を決める」

AICの比較により「予測の良さ」を重視したモデル選択を行うことができる

AIC (Akaike's information criiterion)

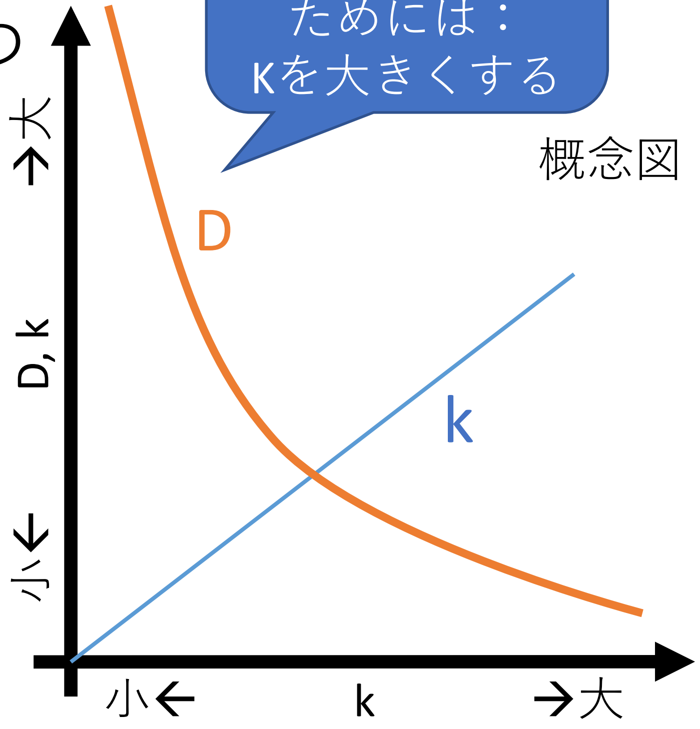
- 「モデル選択規準」(model selection criterion)の一つ
- 予測の良さを重視する　　　(~~当てはまりの良さ~~)
- 小さい方が「良い」モデル

ジレンマ
Dを小さくするためには：Kを大きくする

$$AIC = -2\{(\text{最大対数尤度}) - (\text{パラメーター数})\}$$
$$= -2(logL^* - k)$$
$$= \boldsymbol{D + 2k}$$

これを小さくしたい

右辺の二項、両方を小さくしたい



逸脱度とパラメーター数の両方が小さい→「良い」モデル

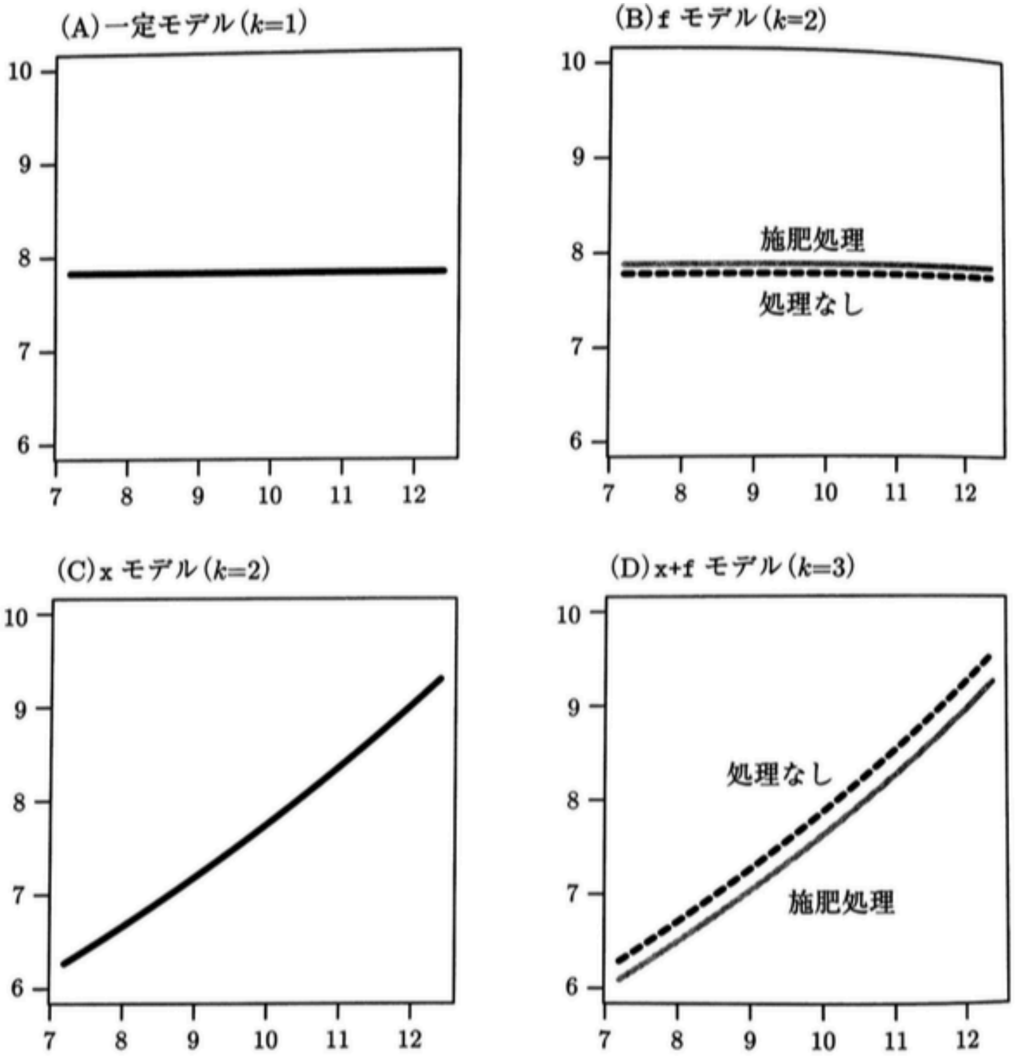
疑問

逸脱度の概念は必要か？最大対数尤度じゃダメなのか？
残差逸脱度の概念が必要なのは分かるのだが…

(AICが選択規準として有用である理由は以後)

R実践：AICの算出・比較

R実践：AICの算出・比較



(テキストより)

モデル	k	$\log L^*$	Deviance	Residual D	AIC
A:一定	1	-237.6	475.3	89.5	477.3
B: f	2	-237.6	475.3	89.5	479.3
C: x	2	-235.4	470.8	85.0	474.8
D: x+f	3	-235.3	470.6	84.8	476.6
フル	100	-192.9	385.8	0.0	585.8

残差逸脱度がDより大きいのに、AICはCが最小

ここまでのまとめ

- **最大対数尤度**は「あてはまりの良さ」を表現している
- 最大対数尤度は、モデルの良さの評価規準としてふさわしいのか？？
  - 「一つのデータセット」の説明に終始→実際の現象と乖離する可能性が高い
- **逸脱度**＝「あてはまりの悪さ」という値でモデルを評価可能
- **残差逸脱度**は、他のモデルの逸脱度と比較した相対的な規準である
  - **フルモデル**採用時の逸脱度=最小のDとの比較
- **モデル選択規準 AIC**の値が小さいほど「良い」モデルと言える
- AICは「モデルの予測の良さ」を判断規準とする
- パラメーター数kと逸脱度Dの双方が程よく小さい時：AICが最小
- 「良い予測をする」モデルは、kとDが小さい

4.4 AICを説明するためのまた別の問題

モデル候補の選定
「あてはまりの良さ」基準は万能ではない

逸脱度
「あてはまりの悪さ」という評価法

AIC
「予測の良さ」という選択規準

ネストの問題
ネストとは

AICの有用性
なぜAICはモデル選択基準として有用なのか

モデルAがモデルBの部分集合であるとき、モデルA,Bは「**ネストしている**」

「ネストしている/した」(nested)

- 一方のモデルが他方に含まれている状態

モデルA: $\log \lambda = \boxed{\beta_1 + \beta_2 x_1}$

モデルB: $\log \lambda = \boxed{\beta_1 + \beta_2 x_1} + \beta_3 x_2$

- 上記の場合、モデルAはモデルBの部分集合

 ＝「モデルAとBはネストしている」

- どんなモデルも、フルモデルの部分集合

 ＝フルモデルは、必然的にどんなモデルともネストしている

- ネストしたモデル間の検定：Wald検定、尤度比検定など

4.5 なぜAICでモデル選択して良いのか？

モデル候補の選定
「あてはまりの良さ」基準は万能ではない

逸脱度
「あてはまりの悪さ」という評価法

AIC
「予測の良さ」という選択規準

ネストの問題
ネストとは

AICの有用性
なぜAICはモデル選択基準として有用なのか