応用システム工学
第3回　モデリング

平成21年6月19日

統計モデルの構築
モデリングのプロセス

- モデル化
  - 反応変数と説明変数の関係式
  - 反応変数の確率分布
- モデルパラメータの同定
- モデルの検証
- モデルを用いた検討
  - 信頼度区間
  - モデルパラメータによる仮説検定

統計モデル構築のためのデータ解析

- 測定尺度
  - 量的尺度
  - 質的尺度
- 確率分布
- 変数の関連性
  - 質的な変数間
  - 連続変数間
  - 質的な変数と連続変数間

モデルの定式化
一般化線形モデル

- モデルの構成
  - 要素
    - 確率変数
    - 説明変数(複数)
  - 確率分布
    - 一般化線形モデル←指数型分布族の確率分布
      - 正規分布，二項分布，ポアソン分布
  - 期待値と説明変数の関係式→線形結合

$$g[E(Y)] = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m$$

パラメータの同定

- 推定法
  - 最小二乗推定法
    - 期待値の式(分散共分散の式)が必要
    - 確率変数Yiの分布は不要
  - 最尤推定法
    - 確率変数Yiの同時確率分布が必要
  - 一般的に最尤推定量と最小二乗推定量は同じ

最小二乗推定1

- 独立なn個の確率変数$Y_1, Y_2, \cdots, Y_n$
  - 期待値 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n$
    - 仮定
      - 期待値はパラメータベクトルの関数(p<n)となる $\beta = [\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p]^t$

$$E(Y_i) = \mu_i(\beta)$$

- 最小二乗法
  - 確率変数(観測値)Y_iと期待値μ_iの差の平方和を最小にする推定量 $\hat{\beta}$ を見つける
    - 評価関数 $S = \sum [Y_i - \mu_i(\beta)]^2$

最小二乗推定2

- 推定量 $\hat{\beta}$ の最適値→評価関数が最小
  - 評価関数Sを各要素β_jで微分
    - 連立方程式の解

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_j} = 0,\ j = 1,2,\cdots,p$$

- 確率変数Y_i間の分散σ_i^2が等しくない場合
  - 分散の大きい(信頼性が低い)確率変数の影響を抑える
    - 重み付き平方和を最小にする

$$S = \sum w_i \left[Y_i - \mu_i(\beta) \right]^2$$

重み $w_i = \dfrac{1}{\sigma_i^2}$

最小二乗推定3

- 重み付き最小二乗推定量の一般表現
  - 確率変数ベクトル $y = [Y_1, Y_2, \cdots, Y_n]^t$
  - 平均(期待値)ベクトル $\mu = [\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n]^t$
  - 分散共分散行列 V
    - 行列の対角要素 σ_i^2(分散)
    - 行列の非対角要素 $\rho_{ij}\sigma_i\sigma_j$(共分散)
      - ρ_{ij}:Y_iとY_jの相関係数
  - 評価関数

$$S = (Y - \mu)^t V^{-1} (Y - \mu)$$

最尤推定1

- 確率変数ベクトル　　$y = \left[Y_1, Y_2, \cdots, Y_n\right]^t$
  - 確率変数n個
- Y_iの同時確率密度関数　　$f\left(y;\theta\right)$
  - パラメータのベクトル　　$\theta = \left[\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_p\right]^t$
  - パラメータθを固定した時の確率変数yが対象
- 尤度関数　　$L\left(\theta; y\right)$
  - 同時確率密度関数の数式表現と同一
    - θとyの役割の入替
    - 確率変数yを固定した時のパラメータθが対象
  - Lは確率変数となる
    - 確率変数ベクトルの関数として定義されるため

最尤推定2

- パラメータ空間Ω　　$\theta \in \Omega$
  - パラメータベクトル θ がとる全ての値を含む集合
- パラメータベクトル θ の最尤推定量 $\hat{\theta}$
  - 尤度関数を最大にする θ

$$L\left(\hat{\theta}; y\right) \geq L(\theta; y), \theta \in \Omega$$

- 対数尤度関数
  - 尤度関数の対数をとったもの　$l(\theta; y) = \log L(\theta; y)$
  - 対数関数は単調関数である
    - 対数尤度関数も単調関数となる
      - 最尤推定量は対数尤度関数を最大にする

$$l\left(\hat{\theta}; y\right) \geq l(\theta; y), \theta \in \Omega$$

最尤推定3

- 最尤推定量$\hat{\theta}$の求め方
  - 対数尤度関数の各パラメータに関する微分
    - 連立方程式

$$\frac{\partial l(\theta; y)}{\partial \theta_j} = 0,\ j = 1,2,\cdots,p$$

極値の条件

    - 極大値との対応
      - 二階導関数が負定値行列

$$\left.\frac{\partial^2 l(\theta; y)}{\partial \theta_j \partial \theta_k}\right|_{\theta=\hat{\theta}} < 0$$

» 全ての局所最大(極大)値の中で，lが最大値をとるθが最尤推定量

最尤推定4

- 最尤推定量の不変性を利用したパラメータ推定
  - パラメータθの任意の関数g(θ)
    - 最尤推定量の不変性
      - パラメータベクトルθの最尤推定量 $\hat{\theta}$
      - $g(\theta)$ の最尤推定量は $g(\hat{\theta})$ となる
      - 最尤推定量の不変性を用いた最尤推定量の求め方
        - » 最尤推定を行うのに便利な関数を見つける
        - » この関数に対して尤度関数を最大化するθを見つける
        - » 最尤推定量の不変性を用いる
        - » 得られたθは必要なパラメータの最尤推定量となる