「データ解析」（下平英寿） 講義資料３

一変量の統計学

- 目標： 一変量（スカラ）の統計手法を理解する．
  1. MASS ライブラリの利用
  2. 平均，分散，メディアンなど，主な要約統計量を理解する．
  3. ハズレ値が統計量に及ぼす影響について理解する．
  4. ヒストグラム，カーネル密度推定など，密度関数の推定法を学ぶ．

1 MASS ライブラリ

```
> search()
[1] ".GlobalEnv"        "package:methods"   "package:stats"     "package:graphics"
[5] "package:utils"     "Autoloads"         "package:base"
> library(MASS)
> search()
[1] ".GlobalEnv"        "package:MASS"      "package:methods"   "package:stats"
[5] "package:graphics"  "package:utils"     "Autoloads"         "package:base"
> library(help=MASS)
Information on Package 'MASS'
Description:
Package: MASS
Description: The main library and the datasets
Title: Main Package of Venables and Ripley's MASS
Bundle: VR
Priority: recommended
Version: 7.2-2
Date: 2004-05-23
Depends: R (>= 1.9.0), graphics, stats, lattice, nlme, survival
Author: S original by Venables & Ripley. R port by Brian Ripley
        <ripley@stats.ox.ac.uk>, following earlier work by Kurt Hornik
        and Albrecht Gebhardt.
Maintainer: Brian Ripley <ripley@stats.ox.ac.uk>
BundleDescription: Functions and datasets to support Venables and
        Ripley, 'Modern Applied Statistics with S' (4th edition).
License: GPL (version 2 or later) See file LICENCE.
URL: http://www.stats.ox.ac.uk/pub/MASS4/
Packaged: Sun May 23 19:28:43 2004; ripley
Built: R 1.9.1; i686-pc-linux-gnu; 2004-08-12 15:49:40; unix
Index:
Aids2                   Australian AIDS Survival Data
Animals                 Brain and Body Weights for 28 Species
Boston                  Housing Values in Suburbs of Boston
Cars93                  Data from 93 Cars on Sale in the USA in 1993
Cushings                Diagnostic Tests on Patients with Cushing's Syndrome
DDT                     DDT in Kale
GAGurine                Level of GAG in Urine of Children
Insurance               Numbers of Car Insurance claims
Melanoma                Survival from Malignant Melanoma
Null                    Null Spaces of Matrices
OME                     Tests of Auditory Perception in Children with OME
Pima.tr                 Diabetes in Pima Indian Women
Rabbit                  Blood Pressure in Rabbits
Rubber                  Accelerated Testing of Tyre Rubber
SP500                   Returns of the Standard and Poors 500
Sitka                   Growth Curves for Sitka Spruce Trees in 1988
Sitka89                 Growth Curves for Sitka Spruce Trees in 1989
Skye                    AFM Compositions of Aphyric Skye Lavas
Traffic                 Effect of Swedish Speed Limits on Accidents
```



```
UScereal                Nutritional and Marketing Information on US Cereals
UScrime                 The Effect of Punishment Regimes on Crime Rates
VA                      Veteran's Administration Lung Cancer Trial
abbey                   Determinations of Nickel Content
accdeaths               Accidental Deaths in the US 1973-1978
addterm                 Try All One-Term Additions to a Model
anorexia                Anorexia Data on Weight Change
anova.negbin            Likelihood Ratio Tests for Negative Binomial GLMs
area                    Adaptive Numerical Integration
austres-MASS            Quarterly Time Series of the Number of
  Australian Residents
bacteria                Presence of Bacteria after Drug Treatments
bandwidth.nrd           Bandwidth for density() via Normal Reference
                          Distribution
bcv                     Biased Cross-Validation for Bandwidth Selection
beav1                   Body Temperature Series of Beaver 1
beav2                   Body Temperature Series of Beaver 2
biopsy                  Biopsy Data on Breast Cancer Patients
birthwt                 Risk Factors Associated with Low Infant Birth Weight
boxcox                  Box-Cox Transformations for Linear Models
cabbages                Data from a cabbage field trial
caith                   Colours of Eyes and Hair of People in Caithness
cats                    Anatomical Data from Domestic Cats
cement                  Heat Evolved by Setting Cements
chem                    Copper in Wholemeal Flour
con2tr                  Convert Lists to Data Frames for use by Trellis
confint-MASS            Confidence Intervals for Model Parameters
contr.sdif              Successive Differences contrast coding
coop                    Co-operative Trial in Analytical Chemistry
corresp                 Simple Correspondence Analysis
cov.rob                 Resistant Estimation of Multivariate Location and
                          Scatter
cov.trob                Covariance Estimation for Multivariate t Distribution
cpus                    Performance of Computer CPUs
crabs                   Morphological Measurements on Leptograpsus Crabs
deaths                  Monthly Deaths from Lung Diseases in the UK
denumerate              Transform an Allowable Formula for 'loglm'
                          into one for 'terms'
dose.p                  Predict Doses for Binomial Assay model
drivers                 Deaths of Car Drivers in Great Britain 1969-84
dropterm                Try All One-Term Deletions from a Model
eagles                  Foraging Ecology of Bald Eagles
epil                    Seizure Counts for Epileptics
eqscplot                Plots with Geometrically Equal Scales
farms                   Ecological Factors in Farm Management
fgl                     Measurements of Forensic Glass Fragments
fitdistr                Maximum-likelihood Fitting of Univariate Distributions
forbes                  Forbes' Data on Boiling Points in the Alps
fractions               Rational Approximation
galaxies                Velocities for 82 Galaxies
gamma.dispersion        Calculate the MLE of the Gamma Dispersion Parameter
  in a GLM Fit
gamma.shape             Estimate the Shape Parameter of the Gamma Distribution
  in a GLM Fit
gehan                   Remission Times of Leukaemia Patients
genotype                Rat Genotype Data
geyser                  Old Faithful Geyser Data
gilgais                 Line Transect of Soil in Gilgai Territory
ginv                    Generalized Inverse of a Matrix
glm.convert             Change a Negative Binomial fit to a GLM fit
glm.nb                  Fit a Negative Binomial Generalized Linear Model
glmmPQL                 Fit Generalized Linear Mixed Models via PQL
hills                   Record Times in Scottish Hill Races
hist.scott              Plot a Histogram with Automatic Bin Width Selection
housing                 Frequency Table from a Copenhagen Housing Conditions
  Survey
huber                   Huber M-estimator of Location with MAD Scale
hubers                  Huber Proposal 2 Robust Estimator of Location
                          and/or Scale
wtloss                  Weight Loss Data from an Obese Patient
.... 以下略
> help(huber)
```



```
huber                   package:MASS                   R Documentation
Huber M-estimator of Location with MAD Scale
Description:
     Finds the Huber M-estimator of location with MAD scale.
Usage:
     huber(y, k = 1.5, tol = 1e-06)
Arguments:
       y: vector of data values
       k: Winsorizes at 'k' standard deviations
     tol: convergence tolerance
Value:
     list of location and scale parameters
      mu: location estimate
       s: MAD scale estimate
References:
     Huber, P. J. (1981) _Robust Statistics._ Wiley.
     Venables, W. N. and Ripley, B. D. (2002) _Modern Applied
     Statistics with S._ Fourth edition.  Springer.
See Also:
     'hubers', 'mad'
Examples:
     huber(chem)
```

2 データの「中心」,「バラツキ」，そして「ハズレ値」

2.1 chem データセットを見る

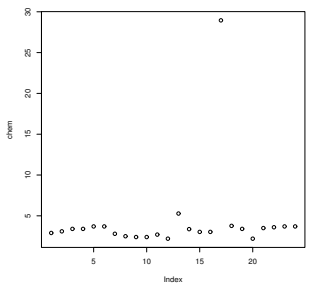
```
> chem
 [1]  2.90  3.10  3.40  3.40  3.70  3.70  2.80  2.50  2.40  2.40  2.70  2.20
[13]  5.28  3.37  3.03  3.03 28.95  3.77  3.40  2.20  3.50  3.60  3.70  3.70
> help(chem)
chem                    package:MASS                   R Documentation
Copper in Wholemeal Flour
Description:
     A numeric vector of 24 determinations of copper in wholemeal
     flour, in parts per million.
Usage:
     data(chem)
Source:
     Analytical Methods Committee (1989) Robust statistics - how not to
     reject outliers. _The Analyst_ *114*, 1693-1702, 1989
References:
     Venables, W. N. and Ripley, B. D. (2002) _Modern Applied
     Statistics with S._ Fourth edition.  Springer.
```

```
# run0019.R
# chem データを見る

library(MASS) # MASS ライブラリのロード
print(length(chem)) # データサイズ
plot(chem) #  縦軸＝データ，横軸＝番号
dev.copy2eps(file="chem-sp.eps")
boxplot(chem) #  箱ヒゲ図 (Box プロット)
dev.copy2eps(file="chem-bp.eps")
truehist(chem,nbins=20) # ヒストグラム（２０分割）
rug(chem) # 「ラグ」をプロット（下部にデータを示す線分）
lines(density(chem),col=2) # 密度関数をカーネル法で推定しプロット
```

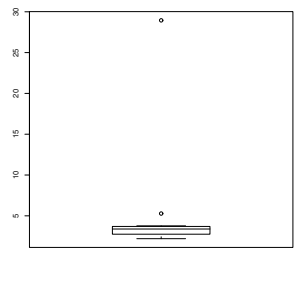


```
dev.copy2eps(file="chem-h.eps")
chem2 <- chem[chem < 5] # ５未満の要素だけ取り出して再描画
print(length(chem2))
truehist(chem2,nbins=8)
rug(chem2)
lines(density(chem2),col=2)
dev.copy2eps(file="chem-h2.eps")
```

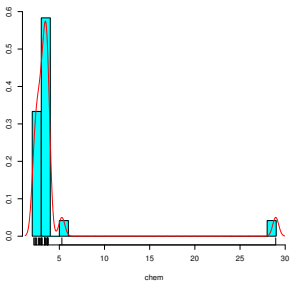
```
> source("run0019.R")
[1] 24
[1] 22
```



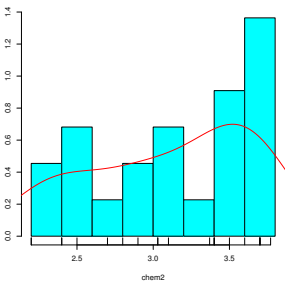
chem-sp



chem-bp



chem-h



chem-h2

2.2 平均，標準偏差

- サイズ n のデータ

$$x_1, \ldots, x_n$$

- (標本) 平均 $\bar{x}$

$$\bar{x} = \frac{x_1 + \cdots + x_n}{n} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

- 不偏標本分散 S_x^2

$$S_x^2 = \frac{(x_1 - \bar{x})^2 + \cdots + (x_n - \bar{x})^2}{n-1} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$$

ただし分母の $n-1$ を n で置き換えたものは，(不偏ではない) 標本分散．実際には，「不偏」や「標本」を省いて書いてしまうことが多いので注意．

- 標本標準偏差 S_x.

$$S_x = \sqrt{S_x^2}$$

```
# run0020.R
# chem データの平均，標準偏差

print(mean(chem)) # 平均
print(sum(chem)/length(chem)) # 定義に戻って計算
mymean <- function(x) sum(x)/length(x) # 関数定義
print(mymean(chem)) # 関数呼び出し

print(sqrt(var(chem))) # 標準偏差
mysd <- function(x) sqrt(sum((x-mymean(x))^2)/(length(x)-1)) # 関数定義
print(mysd(chem)) # 関数呼び出し
```

```
> source("run0020.R")
[1] 4.280417
[1] 4.280417
[1] 4.280417
[1] 5.297396
[1] 5.297396
```

2.3 メディアン，四分位偏差

- chem データセットには「ハズレ値」(outlier) とみなせるような大きな値が含まれる（5.28 と 28.95).
- この 2 個の「ハズレ値」を取り除いたデータセットが chem2.

- 平均や標準偏差などの統計量はハズレ値に弱い．つまり，測定のミスなどによって少数のハズレ値が混入するだけで，統計量の値が大きく変化してしまう．
- ハズレ値に強い統計量としては，メディアンや四分位偏差が知られている．つまり，平均 $\Rightarrow$ メディアン，標準偏差 $\Rightarrow$ 四分位偏差と置き換えると，少数のハズレ値によって統計量が大きく変化することは無くなる．
- ハズレ値に強いということは，裏を返せば，データの微妙な変化を捉えることができず感度が悪いことを意味する．またハズレ値に強い統計量は，一般にデータの一部を捨てるので，推定の効率が悪い（標準誤差が大きい）．このように，ハズレ値に強いということと推定効率はトレードオフの関係にある．

```
# run0021.R
# chem データの平均 (mean)，標準偏差 (sd)，メディアン (median)，四分位偏差 (iqr)

myfournum <- function(x) {
  m1 <- mean(x) # 平均
  s1 <- sqrt(var(x)) # 標準偏差
  m2 <- median(x) # メディアン
  s2 <- IQR(x)/1.3489795 # 四分位偏差 (Interquartile Range) を調整したもの

  list(mean=m1,sd=s1,meadian=m2,iqr=s2)
}

print(unlist(myfournum(chem)))
print(unlist(myfournum(chem2)))
```

```
> source("run0021.R")
     mean        sd   meadian       iqr
4.2804167 5.2973960 3.3850000 0.6857035
     mean        sd   meadian       iqr
3.1136364 0.5299375 3.2350000 0.6301059
```

- chem の median と iqr は，chem2 の mean と sd にかなり近い値を与えている．つまり，meadian と iqr は，自動的にハズレ値を取り除いてから mean と sd を計算することに，相当する（大体の話）．
- このようにハズレ値を取り除くことが，そもそも適切か不適切かは，意見の分かれるところである．

```
> x <- rnorm(10000,mean=5,sd=1)
> unlist(myfournum(x))
     mean        sd   meadian       iqr
4.9955791 0.9984380 4.9979840 0.9974582
```



```
> myfournum(x) # unlist をつけないと，こうなる
$mean
[1] 4.995579

$sd
[1] 0.998438

$meadian
[1] 4.997984

$iqr
[1] 0.9974582
```

- メディアンと四分位偏差は，分位点 (quantile) またはパーセンタイル (percentile) から計算される．(quantile と percentile は，ほぼ同義語として使われている)
- p-分位点（$100p$ パーセンタイル）は，データ $x = (x_1, \ldots x_n)$ を小さい順にソートしたとき，$1 + (n-1)p$ 番目の数値に相当する．これが整数値でない場合には前後の値から線形補間などする．大雑把に言えば，np 番目に小さい値である．これを計算する関数は quantile(x,p) である． p にベクトルも可能．help(quantile) を参照.

```
> quantile(chem,c(0,0.25,0.5,0.75,1))
    0%    25%    50%    75%   100%
 2.200  2.775  3.385  3.700 28.950
```

- メディアン=50 パーセンタイル，つまりちょうど真ん中．左右対称にデータが分布していれば，平均値に等しい．
- 四分位偏差=75 パーセンタイル $-$ 25 パーセンタイル．IQR(x) は x の四分位偏差を与える．IQR(x) = quantile(x,3/4) - quantile(x,1/4). ただし run0021.R で計算している irq は，これを 2*qnorm(3/4) = 1.3490 で割っている．これは，もし x が正規分布に従うとき，(十分に n が大きければ，) 標準偏差に等しい値を与えるためである． help(IQR) を参照.
- 箱ヒゲ図 (Box プロット) の箱の中心=メディアン，箱の両端 (hinges)=ほぼ 25% と 75% のパーセンタイル点.

```
IQR                   package:stats                   R Documentation
The Interquartile Range
Description:
     computes interquartile range of the 'x' values.
Usage:
     IQR(x, na.rm = FALSE)
Arguments:
       x: a numeric vector.
   na.rm: logical. Should missing values be removed?
Details:
     Note that this function computes the quartiles using the
     'quantile' function rather than following Tukey's recommendations,
     i.e., 'IQR(x) = quantile(x,3/4) - quantile(x,1/4)'.
     For normally N(m,1) distributed X, the expected value of 'IQR(X)'
     is '2*qnorm(3/4) = 1.3490', i.e., for a normal-consistent estimate
     of the standard deviation, use 'IQR(x) / 1.349'.
References:
     Tukey, J. W. (1977). _Exploratory Data Analysis._ Reading:
     Addison-Wesley.
See Also:
     'fivenum', 'mad' which is more robust, 'range', 'quantile'.
Examples:
     IQR(rivers)
```


2.4 刈り込み平均

- 平均よりハズレ値に強い「中心」の推定量は，メディアンだけではなく，他にもいろいろある．
- オリンピックの採点．5 人の採点結果から，最高点と最低点を除いた 3 人の平均値.
- より一般的には，刈り込み平均 (trimmed mean)．100α パーセントの刈り込み平均では，100α パーセンタイルと $100(1-\alpha)$ パーセンタイルの間のデータの平均．つまり両側であわせて 200α パーセントのデータを捨ててから平均を取る．$(0 \le \alpha \le 0.5$ とする．)
- $\alpha = 0.5$ とすれば，メディアンに一致.
- mean(x,trim=a) は刈り込み平均 (a=α) を計算する.

```
> mean(chem) # 0%の刈り込み平均
[1] 4.280417
> mean(chem,trim=0.1) # 10%の刈り込み平均
[1] 3.205
> median(chem) # 50%の刈り込み平均
[1] 3.385
> sapply(c(0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5),function(a) mean(chem,trim=a))
[1] 4.280417 3.205000 3.239375 3.273000 3.283333 3.385000
```

2.5 MAD

- 標準偏差よりハズレ値に強い「バラツキ」の推定量は，四分位偏差だけでなく，他にもいろいろある．
- まず $x = (x_1, \ldots, x_n)$ のメディアンを $\mathrm{median}_i(x_i)$ と書く.
- バラツキの推定量である MAD (Median Absolute Deviation) は，

$$\mathrm{MAD} = \mathrm{median}_i(|x_i - \mathrm{median}_j(x_j)|)/0.6745$$

- つまりデータのメディアンを中心として，データのズレの絶対値をメディアンで測る．最後に 0.6745 で割るのは，正規分布の場合の標準偏差に一致させるため.

```
> mad(chem)  # MAD
[1] 0.526323
> myfournum(chem)$iqr # 四分位偏差
[1] 0.6857035
```

2.6 頑健統計量について

- ハズレ値に強い統計量を頑健統計量（ロバスト統計量）という．たとえば,「中心」: メディアン，刈り込み平均.「バラツキ」: 四分位偏差，MAD.
- これ以外にもさまざまな手法が提案されている．一般理論は 1980 年代に整備された．M-推定量というクラスが理論の中心．(M は「MLE と類似の」というところから来ている．MLE というのは後述する最尤推定量の意味)
- M-推定量の例として，MASS ライブラリの huber 関数と hubers 関数は，どちらも中心とバラツキを同時に計算する．ただし huber の返すバラツキは MAD．詳細は help(huber)，help(hubers) を参照.
- いろいろ提案されていて，性能の理論的な比較もあるが，結局どれが良いのか，意見の分かれるところであろう.(「場合による」ということ.)

```
> unlist(huber(chem)) # Huber 法．mu=中心，s=バラツキ
      mu         s
3.206724 0.526323
> unlist(hubers(chem)) # Huber 法その２．mu=中心，s=バラツキ
      mu         s
3.205498 0.673652
```

2.7 最尤推定量

- 最尤推定量 (maximum likelihood estimator の頭文字をとって MLE とも呼ばれる) は，最尤法（最大尤度法）によって得られる推定量.
- 最尤法は非常に一般的な概念で，統計学において中心的な役割を果たしている.
- まずデータの従う確率モデルを一つ指定し，それが真実であると仮定する．たとえば，$x_1, \ldots, x_n$ が平均 μ，標準偏差 σ の正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ に従うと仮定する.
- 仮定したモデルから観測したデータが得られる確率 (密度) を計算する.

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i|\theta)$$

$$f(x_i|\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

ただし，$\theta = (\mu, \sigma)$ は未知パラメタである．ここではデータ x はすでに観測されていて固定しているので，$L(\theta)$ はパラメタ θ の関数とみなす．このとき $L(\theta)$ を尤度 (likelihood) と呼ぶ.

- $L(\theta)$ を最大にするような θ を探索し，これを $\hat{\theta}$ と置く．つまり，

$$\max_{\theta\in\Theta} L(\theta) = L(\hat{\theta})$$

である．Θ は θ が取る値の集合．正規分布の場合なら，

$$\Theta = \{(\mu, \sigma) : -\infty < \mu < \infty, 0 < \sigma < \infty\}$$

このようにして求めた $\hat{\theta}$ が，最尤推定量である.

- 対数尤度 (log-likelihood) とは，尤度の対数．つまり，$\ell(\theta) = \log L(\theta)$ のこと.

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log f(x_i|\theta)$$

$L(\theta)$ よりも，$\ell(\theta)$ のほうが取り扱いが容易なことが多い．正規分布の場合なら，

$$\ell(\theta) = -\frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2$$

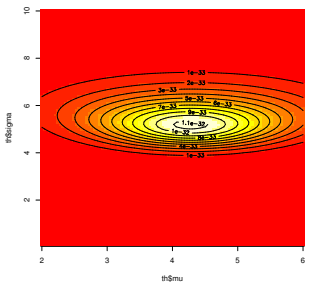
- 数値的最適化には optim 関数が使える．これは標準で最小化を行うので，最大化を実行するにはオプションで control=list(fnscale=-1) を指定する．$\ell(\theta)$ の最大化を行う代わりに，$-\ell(\theta)$ の最小化を行うことにすれば，この control オプションは不要である．optim は内部で反復計算を実行しているので，その初期値を与える必要がある．optim 内部で採用している最適化アルゴリズムは数種類あり，それを method オプションで指定できる．method = c("Nelder-Mead", "BFGS", "CG", "L-BFGS-B", "SANN"). アルゴリズムの説明などは help(optim) を参照.

```
# run0022.R
# 最尤推定量（正規分布）.

x <- chem # chem データセット
lik <- function(th) sum(log(dnorm(x,mean=th[1],sd=th[2]))) # 対数尤度

th <- list(mu=seq(2,6,length=100),
           sigma=seq(0.1,10,length=100)) # プロットする範囲
z <- matrix(apply(expand.grid(th),1,lik),
            length(th[[1]])) # すべての格子点で対数尤度を計算
image(th$mu,th$sigma,exp(z)) # 尤度の２次元プロット（赤＝低い，白＝高い）
contour(th$mu,th$sigma,exp(z),add=T) # 等高線の表示
dev.copy2eps(file="run0022-cp1.eps")
z2 <- pmax(z,-100) # プロットのレンジを調整
image(th$mu,th$sigma,z2) # 対数尤度の２次元プロット（赤＝低い，白＝高い）
contour(th$mu,th$sigma,z2,add=T) # 等高線の表示
dev.copy2eps(file="run0022-cp2.eps")
```

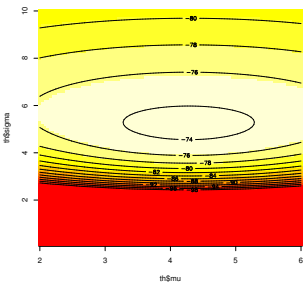


```
opt <- optim(c(4,5),lik,control=list(fnscale=-1)) # 数値的最適化
print(opt$par) # 最尤推定量の表示
truehist(x,nbins=20) # ヒストグラム
rug(x)
x0 <- seq(min(x),max(x),length=300)
lines(x0,dnorm(x0,mean=opt$par[1],sd=opt$par[2]),col=2) # 密度関数
dev.copy2eps(file="run0022-h.eps")

print(fitdistr(x,"normal")) # これでも良い.

print(mean(x)) # 平均
print(sqrt(sum( (x-mean(x))^2 )/length(x))) # （不偏でない）標本標準偏差
```

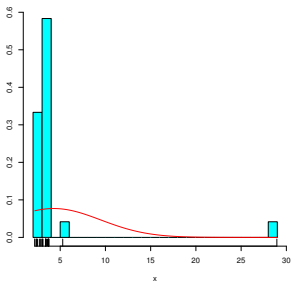
```
> source("run0022.R")
[1] 4.279753 5.185585
     mean          sd
  4.2804167   5.1858594
 (1.0585591) (0.7485143)
[1] 4.280417
[1] 5.185859
```



run0022-cp1



run0022-cp2



run0022-h

- 簡単な確率モデルの最尤推定量は，数値的最適化の必要はなく，解析的に解が求まる．正規分布の場合なら，

$$\frac{\partial\ell(\theta)}{\partial\mu} = 0, \quad \frac{\partial\ell(\theta)}{\partial(\sigma^2)} = 0$$

を解くと，$\hat{\theta} = (\hat{\mu}, \hat{\sigma})$ として，

$$\hat{\mu} = \frac{x_1 + \ldots + x_n}{n}, \quad \hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\hat{\mu})^2}$$

結局，$\hat{\mu} = \bar{x}$ は平均，$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{n-1}{n}}S_x$ (不偏でない) 標本標準偏差になる.

- 従って，正規分布を仮定した最尤推定量は，ハズレ値に弱く，ロバストでない．前節で説明した M-推定量は，実は，最尤推定量を一般化してロバストにしたものである．しかし最尤推定量でも，次の示すようにロバストにすることも可能である.

2.8 最尤推定量（その２）

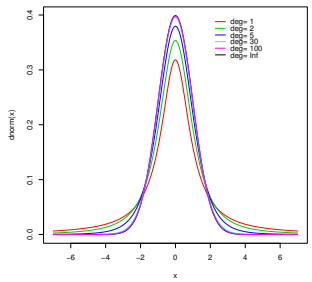
- 以上では説明のために正規分布を用いたが，たとえば t-分布をモデルとして仮定しても良い．自由度 m の t-分布の密度関数は

$$f(x_i|\theta) = \frac{\Gamma((m+1)/2)}{\sqrt{m\pi\sigma^2}\Gamma(m/2)}\left(1 + \frac{(x_i-\mu)^2}{m\sigma^2}\right)^{-(m+1)/2}$$

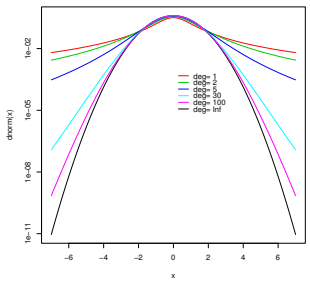
である．t-分布は正規分布より，分布のスソが重く，ハズレ値に強い推定量が得られる．自由度パラメタ m を小さくするとスソが重くなり，m を大きくするとスソが軽くなる．$m = 1$ がコーシー分布，$m \to \infty$ が正規分布である．分布の中心は μ である．σ はバラツキの程度を表す．分散は $V(X) = \sigma^2 n/(n-2)$ ただし $n > 2$ である.

```
# run0026.R
```

```
# t-分布の密度関数

x <- seq(-7,7,length=400) # プロットする範囲
deg <- c(1,2,5,30,100) # 自由度
col <- 2:6 # 色
plot(x,dnorm(x),type="l") # 縦軸＝確率密度
for(i in 1:length(deg)) lines(x,dt(x,df=deg[i]),col=col[i])
legend(2,0.4,paste("deg=",c(deg,Inf)),col=c(col,1),lty=1,bty="n")
dev.copy2eps(file="run0026-dt1.eps")

plot(x,dnorm(x),type="l",log="y")  # 縦軸＝確率密度の対数
for(i in 1:length(deg)) lines(x,dt(x,df=deg[i]),col=col[i])
legend(0,1e-3,paste("deg=",c(deg,Inf)),col=c(col,1),lty=1,bty="n")
dev.copy2eps(file="run0026-dt2.eps")
```



run0026-dt1



run0026-dt2

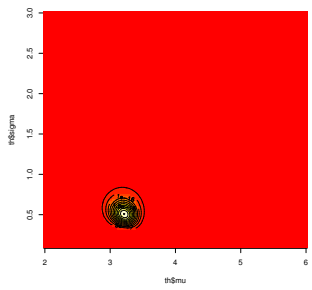
```
# run0023.R
# 最尤推定量（t-分布）.

x <- chem # chem データセット
deg <- 2 # 自由度は２にしておく.
mydt <- function(x,mean,sd,df)
  dt((x-mean)/sd,df=df)/sd # 標準の dt は mean=0,sd=1 に相当
lik <- function(th) sum(log(mydt(x,th[1],th[2],deg))) # 対数尤度

th <- list(mu=seq(2,6,length=100),
           sigma=seq(0.1,3,length=100)) # プロットする範囲
z <- matrix(apply(expand.grid(th),1,lik),
```



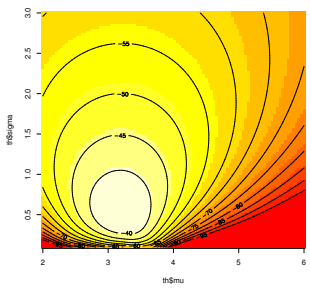
```
           length(th[[1]])) # すべての格子点で対数尤度を計算
image(th$mu,th$sigma,exp(z)) # 尤度の２次元プロット（赤＝低い，白＝高い）
contour(th$mu,th$sigma,exp(z),add=T) # 等高線の表示
dev.copy2eps(file="run0023-cp1.eps")
z2 <- pmax(z,-100) # プロットのレンジを調整
image(th$mu,th$sigma,z2) # 対数尤度の２次元プロット（赤＝低い，白＝高い）
contour(th$mu,th$sigma,z2,add=T) # 等高線の表示
dev.copy2eps(file="run0023-cp2.eps")

opt <- optim(c(3,1),lik,control=list(fnscale=-1)) # 数値的最適化
print(opt$par) # 最尤推定量の表示
truehist(x,nbins=20) # ヒストグラム
x0 <- seq(min(x),max(x),length=300)
lines(x0,mydt(x0,mean=opt$par[1],sd=opt$par[2],df=deg),col=2) # 密度関数
dev.copy2eps(file="run0023-h.eps")

print(fitdistr(x,"t",df=deg)) # これでも良い.
print(fitdistr(x,"t")) # 自由度も推定できるが，数値的に不安定になる.
print(sapply(c(1,2,5,10,100,1000),
             function(deg) fitdistr(x,"t",df=deg)$estimate))
```

```
> source("run0023.R")
[1] 3.2169429 0.5051544
       m           s
  3.2169663   0.5051234
 (0.1400725) (0.1100541)
       m           s           df
  3.2484136   0.4553490   1.3670314
 (0.1475079) (0.1190068) (0.4974041)
      [,1]      [,2]      [,3]      [,4]      [,5]      [,6]
m 3.285039 3.2169663 3.1853242 3.2001124 4.048658 4.256082
s 0.412430 0.5051234 0.6421415 0.8326225 4.619992 5.131446
Warning message:
NaNs produced in: dt(x, df, log)
```

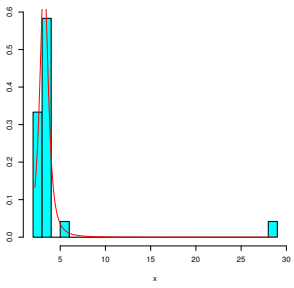
最後の Warning は `fitdistr(x,"t")` が出したもの.



run0023-cp1



run0023-cp2



run0023-h

- 正規分布に従うデータに t-分布を当てはめる場合を考える.
- このとき，t-分布の σ をそのまま用いると，正規分布の標準偏差を過小評価してしまう. 従って，これを補正する係数を求めておく．n が十分に大きい場合を想定して $n \to \infty$ とする.
- t-分布の密度関数 $(\mu = 0, \sigma > 0)$ の対数に正規分布（平均 0, 分散 1) の密度関数をかけて積分する

$$\ell(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2}) \log \left\{ \frac{\Gamma((m+1)/2)}{\sqrt{m\pi\sigma^2}\Gamma(m/2)} \left(1 + \frac{x^2}{m\sigma^2}\right)^{-(m+1)/2} \right\} dx$$

これを σ で微分すると，

$$\frac{d\ell(\sigma)}{d\sigma} = \frac{1+m}{s} \left\{ \frac{m}{m+1} + \frac{\Phi(\sqrt{m}\sigma) - 1}{\phi(\sqrt{m}s)/(\sqrt{m}s)} \right\}$$

ただし $\phi(x)$ と $\Phi(x)$ は $N(0,1)$ の密度関数と分布関数．従って，$d\ell(\sigma)/d\sigma = 0$ を数値的に解いた値を $\tilde{\sigma}_m$ とする．たとえば，$\tilde{\sigma}_5 = 0.85662$

- データに自由度 m の t-分布を当てはめて得られた $\hat{\sigma}$ を $\tilde{\sigma}_m$ で割れば，補正済みの標準偏差になる.
- 研究者の方へ： この補正項の導出に関する文献をご存知の方は，下平までお知らせ願えれば幸いです.

```
# run0040.R
# t-分布の補正
tsdcorrection <- function(m) { # 補正項の計算
  dlik <- function(x) m/(1+m) + (pnorm(x)-1)/(dnorm(x)/x)
  f <- uniroot(dlik,c(0,sqrt(m)))
  f$root/sqrt(m)
}
m0 <- 1:10 ; names(m0) <- m0 # 1から10まで自由度を変えて
print(sapply(m0,tsdcorrection)) # 補正項を表示
x <- rnorm(10000) # 乱数N(0,1)を10000個つくりデータとする.
print(sd(x)) # 標準偏差
s <- sapply(m0,function(m)
            fitdistr(x,"t",df=m)$estimate["s"]/tsdcorrection(m)) # 補正済み
print(s)
```

```
> source("run0040.R")
        1         2         3         4         5         6         7         8
0.6120098 0.7326011 0.7935125 0.8310038 0.8566214 0.8753183 0.8896034 0.9008930
        9        10
0.9100508 0.9176348
[1] 1.006540
     1.s      2.s      3.s      4.s      5.s      6.s      7.s      8.s
1.001654 1.003168 1.004288 1.004766 1.005143 1.005333 1.005699 1.005746
     9.s     10.s
1.005665 1.005914
```

3 密度推定

- 中心，バラツキの統計量は，データを要約する統計量として有用であった．頑健統計量を用いれば，多少のハズレ値に対して自動的に対応できた.
- ところが，中心，バラツキといった概念は，分布の形状が一つ山（＋多少のハズレ値）の場合は良いが，分布の形状が二つ山になると，要約統計量として不十分である.

- やはり，データの従う確率密度関数を推定して分布の形状を直接表現することが有用である．つまり,「まずデータを見る」ということ．

3.1 geyser データセットを見る

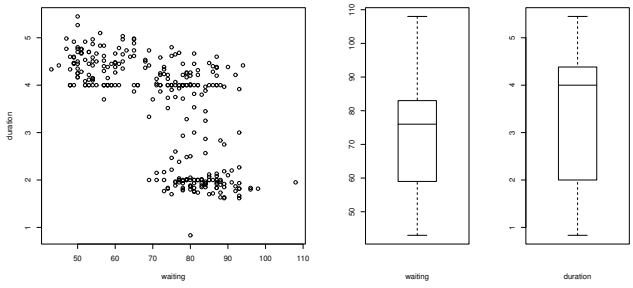
```
geyser                  package:MASS                  R Documentation
Old Faithful Geyser Data
Description:
     A version of the eruptions data from the 'Old Faithful' geyser in
     Yellowstone National  Park,  Wyoming. This version comes from
     Azzalini and Bowman (1990) and is of continuous measurement from
     August 1 to August 15, 1985.
     Some nocturnal duration measurements were coded as 2, 3 or 4
     minutes, having originally been described as 'short', 'medium' or
     'long'.
Usage:
     data(geyser)
Format:
     A data frame with 299 observations on 2 variables.
       'duration'  numeric  Eruption time in mins
       'waiting'   numeric  Waiting time to next eruption
References:
     Azzalini, A. and Bowman, A. W. (1990) A look at some data on the
     Old Faithful geyser.  _Applied Statistics_ *39*, 357-365.
     Venables, W. N. and Ripley, B. D. (2002) _Modern Applied
     Statistics with S._ Fourth edition.  Springer.
See Also:
     'faithful'
```

```
# run0024.R
# geyser データを見る

library(MASS) # MASS ライブラリのロード
print(names(geyser)) # 変量の名前
print(dim(geyser)) # データサイズ
plot(geyser)
dev.copy2eps(file="geyser-sp.eps")
par(mfrow=c(1,2))
boxplot(geyser$waiting,xlab="waiting") #  箱ヒゲ図 (Box プロット)
boxplot(geyser$duration,xlab="duration") #  箱ヒゲ図 (Box プロット)
dev.copy2eps(file="geyser-bp.eps")
par(mfrow=c(1,1))

print(unlist(myfournum(geyser$waiting))) # 平均等
truehist(geyser$waiting) # ヒストグラム
rug(geyser$waiting) # 「ラグ」をプロット（下部にデータを示す線分）
lines(density(geyser$waiting),col=2) # 密度関数をカーネル法で推定しプロット
dev.copy2eps(file="geyser-waiting-h.eps")

print(unlist(myfournum(geyser$duration))) # 平均等
truehist(geyser$duration) # ヒストグラム
```

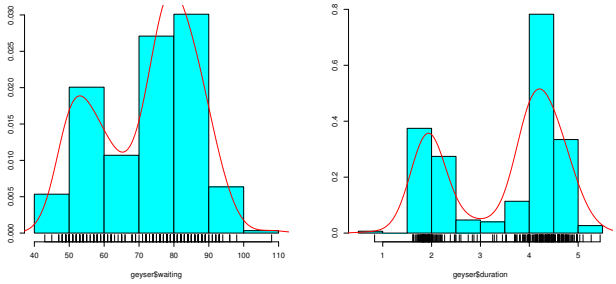


```
rug(geyser$duration) # 「ラグ」をプロット（下部にデータを示す線分）
lines(density(geyser$duration),col=2) # 密度関数をカーネル法で推定しプロット
dev.copy2eps(file="geyser-duration-h.eps")
```

```
> source("run0024.R")
[1] "waiting"  "duration"
[1] 299   2
    mean       sd  meadian      iqr
72.31438 13.89032 76.00000 17.79123
    mean       sd  meadian      iqr
3.460814 1.147904 4.000000 1.766768
```



geyser-sp　　geyser-bp



geyser-waiting-h　　geyser-duration-h

- waiting も duration も二つ山があるが，その特徴を平均や標準偏差は表現できない．小さいほうの山を「ハズレ値」としては捨てられない．

- 単に平均や標準偏差だけでは不十分．密度関数を推定すれば，分布の形状もわかる．

3.2 最尤法による密度推定

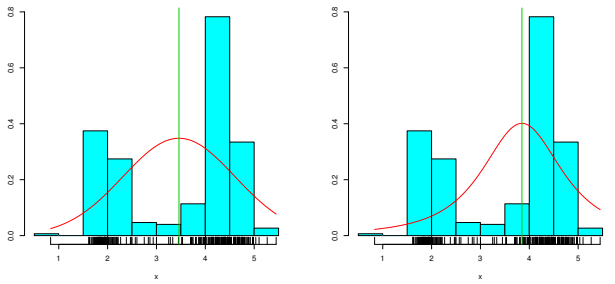
- モデルをいろいろ変えて，最尤法を適用して分布を推定する．
- (1) 正規分布，(2) t-分布，(3) 2 個の混合正規分布，(4) 3 個の混合正規分布

```
# run0030.R
# 最尤推定量 (duration データ)

x <- geyser$duration # データ
x0 <- seq(min(x),max(x),length=300) # 密度関数を推定する範囲
drawx <- function(y,na,v=NULL) {
  truehist(x) # ヒストグラム
  rug(x) # 「ラグ」をプロット（下部にデータを示す線分）
  lines(x0,y,col=2)
  sapply(v,function(i) abline(v=i,col=3))
  dev.copy2eps(file=paste("run0030-",na,".eps",sep=""))
}
mydt <- function(x,mean,sd,df) # t-分布の密度関数
  dt((x-mean)/sd,df=df)/sd # 標準の dt は mean=0,sd=1 に相当

# 正規分布
m1 <- mean(x); s1 <- sqrt(sum( (x-mean(x))^2 )/length(x))
print(c(m1,s1))
drawx(dnorm(x0,mean=m1,sd=s1),"d1",m1)

# t-分布
deg <- 2; fit <- fitdistr(x,"t",df=deg)
m2 <- fit$estimate["m"]; s2 <- fit$estimate["s"]
print(c(m2,s2,deg))
drawx(mydt(x0,mean=m2,sd=s2,df=deg),"d2",m2)

# 2 個の正規分布の混合分布
mydnorm2 <- function(x,th) # 密度関数
  th[5]*dnorm(x,mean=th[1],sd=th[2]) +
  (1-th[5])*dnorm(x,mean=th[3],sd=th[4])
lik <- function(th) sum(log(mydnorm2(x,th))) # 対数尤度
opt <- optim(c(2,1,5,1,0.3),lik,
             control=list(fnscale=-1)) # 数値的最適化
print(opt$par) # 最尤推定量の表示
```

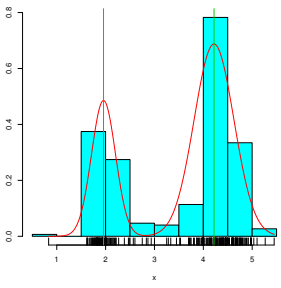


```
drawx(mydnorm2(x0,opt$par),"d3",opt$par[c(1,3)])

# 3 個の正規分布の混合分布
mydnorm3 <- function(x,th) # 密度関数
  th[7]*dnorm(x,mean=th[1],sd=th[2]) +
  th[8]*dnorm(x,mean=th[3],sd=th[4])+
  (1-th[7]-th[8])*dnorm(x,mean=th[5],sd=th[6])
lik <- function(th) sum(log(mydnorm3(x,th))) # 対数尤度
opt <- optim(c(2,1,3,1,4,1,0.3,0.3),lik,
             control=list(fnscale=-1)) # 数値的最適化
print(opt$par) # 最尤推定量の表示
drawx(mydnorm3(x0,opt$par),"d4",opt$par[c(1,3,5)])
```

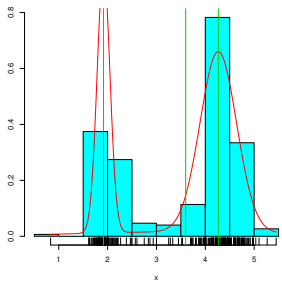
```
> source("run0030.R")
[1] 3.460814 1.145982
        m         s
3.8493845 0.8806723 2.0000000
[1] 1.9569665 0.2447000 4.2188958 0.4074268 0.2978477
[1] 1.91654783 0.13097639 3.59800767 2.12497798 4.26608951 0.37341999 0.30965333
[8] 0.08658342
There were 26 warnings (use warnings() to see them)
```



run0030-d1　　run0030-d2



run0030-d3



run0030-d4

- 正規分布，t-分布では，山が一つしかないので不自然．(単に平均や標準偏差だけでは，duration データがうまく表現できない．)
- 二つの正規分布を混合すれば，二つの山が表現できる．

$$f(x|\mu_1,\sigma_1,\mu_2,\sigma_2,p_1) = \frac{p_1}{\sqrt{2\pi\sigma_1^2}}\exp\left(-\frac{(x_i-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}\right) + \frac{1-p_1}{\sqrt{2\pi\sigma_2^2}}\exp\left(-\frac{(x_i-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2}\right)$$

- 数値的最適化の問題（不安定）．山の数を推定する必要があることも問題．

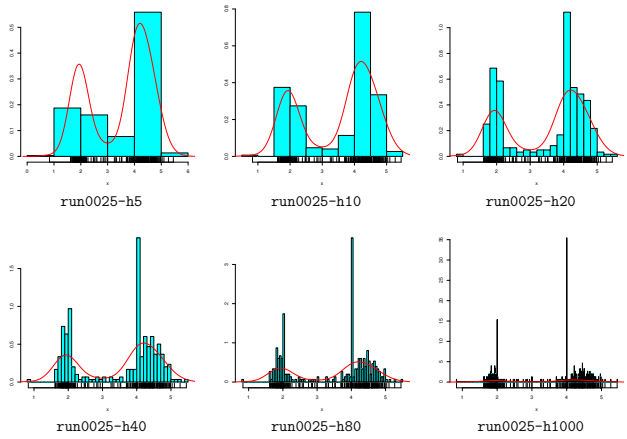
3.3 ヒストグラム

- ヒストグラムは密度推定の一種．
- 分割数をいくつにするかが重要．分割数を減らすと細かい形状が見えなくなるし，分割数を増やすと（各 bin に入るデータ数が減るので）推定精度が悪くなる．
- hist や truehist 関数では，あるアルゴリズムに従って自動的に分割数を決めている．hist では breaks オプション，truehist では nbins オプションで分割数を指定する．自動決定のアルゴリズムも数種類用意されており，そのアルゴリズム名を文字列で指定することも可能．デフォルトは breaks = "Sturges"と nbins = "Scott"．

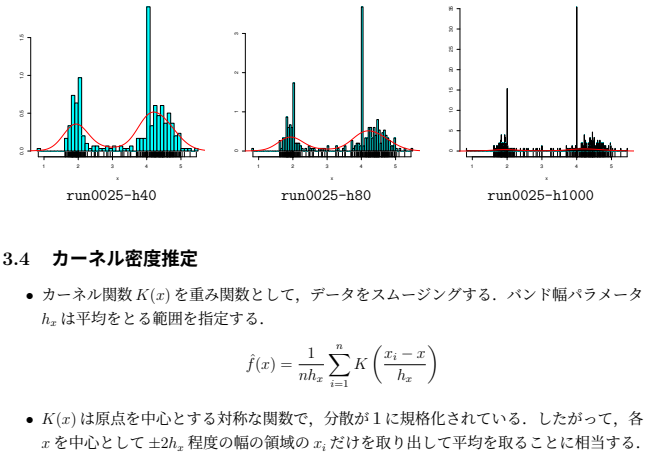
```
# run0025.R
# duration のヒストグラム

drawhist <- function(x,nb,name) {
  truehist(x,nbins=nb)
  rug(x)
  lines(density(x),col=2)
```



```
  dev.copy2eps(file=paste(name,nb,".eps",sep=""))
}

bins <- c(5,10,20,40,80,1000) # 分割数
for(i in bins) drawhist(geyser$duration,i,"run0025-h")
```



run0025-h5　run0025-h10　run0025-h20



run0025-h40　run0025-h80　run0025-h1000

3.4 カーネル密度推定

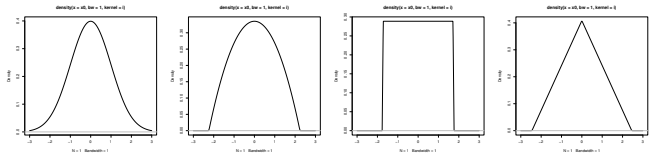
- カーネル関数 $K(x)$ を重み関数として，データをスムージングする．バンド幅パラメータ h_x は平均をとる範囲を指定する．

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{nh_x}\sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x_i - x}{h_x}\right)$$

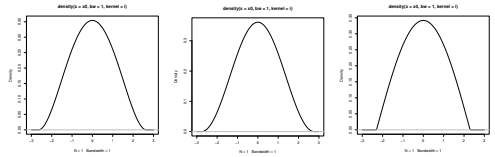
- $K(x)$ は原点を中心とする対称な関数で，分散が 1 に規格化されている．したがって，各 x を中心として $\pm 2h_x$ 程度の幅の領域の x_i だけを取り出して平均を取ることに相当する．
- density 関数の実装されているカーネル関数：$K(x)$ のデフォルトは平均 0, 分散 1 の正規分布の密度関数 (gaussian)．$K(x)$ はすべて密度関数の一種であり，その標準偏差は 1 に規格化されている．以下に示す 7 種類が kernel オプションで指定できる．
- デフォルトでは h_x は自動的に調整されるアルゴリズムが呼び出されるがユーザが bw オプションで数値を指定することも可能．adjust=1 オプションで倍率を指定すれば，実際には bw*adjust のバンド幅が使われる．

- 密度関数を推定してプロットするには，x を少しずつ変化させながら多数の点（たとえば 500 個）の値で $\hat{f}(x)$ を評価するので，計算がすこし大変．
- このような計算を一般に「畳み込み」(convolution) という．畳み込みには高速フーリエ変換 (FFT) を利用した効率の良い計算法が知られており，これを density 関数では実装している．あらかじめ x_i を離散化しデフォルトで 512 個の代表点にまとめる．この離散化したデータの FFT と，カーネル関数の FFT を単純に掛け算して，それから逆 FFT を実行すると，512 個の代表点すべての $\hat{f}(x)$ の値が一度に求まる．詳細は，help(density) 参照．また，> density [enter] とすれば，density オブジェクトの定義が見れるので，やっていることが大体想像できるだろう．

```
# run0027.R
# カーネル関数のプロット
x0 <- c(0) # 原点に 1 個だけ．これに density を適用すればよい．
krn <- c("gaussian", "epanechnikov", "rectangular", "triangular",
         "biweight", "cosine", "optcosine")  #  カーネル関数
for(i in krn) {
  plot(density(x0,bw=1,kernel=i))
  dev.copy2eps(file=paste("run0027-",i,".eps",sep=""))
}
```



run0027-gaussian　run0027-epanechnikov　run0027-rectangular　run0027-triangular

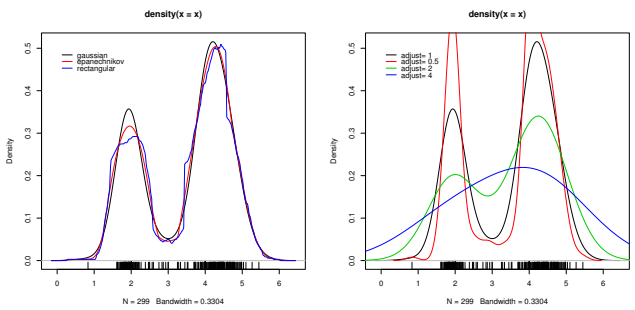


run0027-biweight　run0027-cosine　run0027-optcosine

```
# run0028.R
# カーネル関数とバンド幅を変更する

x <- geyser$duration

plot(density(x))
```



```
rug(x)
krn <- c("gaussian","epanechnikov","rectangular") # カーネル関数の変更
lines(density(x,kernel=krn[2]),col=2)
lines(density(x,kernel=krn[3]),col=4)
legend(0,0.5,krn,col=c(1,2,4),lty=1,bty="n")
dev.copy2eps(file="run0028-d1.eps")

plot(density(x))
rug(x)
adj=c(1,0.5,2,4) # バンド幅の倍率の変更
for(i in 2:4) lines(density(x,adjust=adj[i]),col=i)
legend(0,0.5,paste("adjust=",adj),col=1:4,lty=1,bty="n")
dev.copy2eps(file="run0028-d2.eps")
```



run0028-d1　run0028-d2

- カーネル関数を変えても，結果は大して変わらない．ただし，$K(x)$ の両端は連続に値が 0 になるものを使うべき．“rectangular” は連続でないので，$\hat{f}(x)$ がギザギザする．
- バンド幅の変更の影響は大きい．ヒストグラムの分割数の選択とまったく同じ問題である．

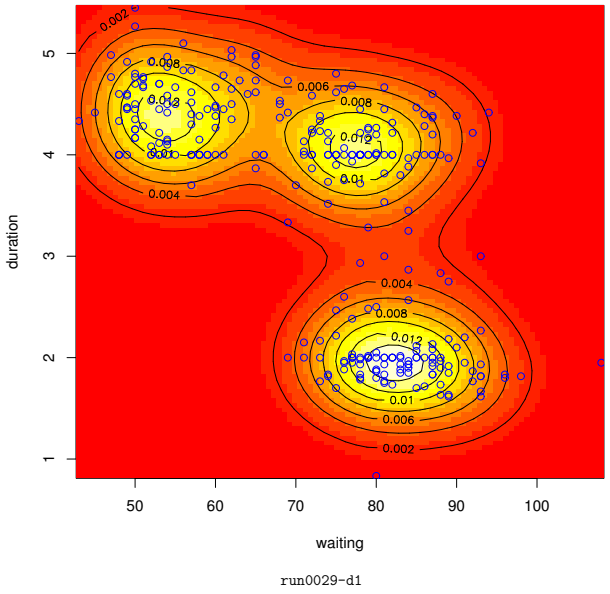
3.5 2 次元の密度推定

- カーネル密度推定を 2 次元（多次元）に拡張するのは容易．
- データは $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ とする．
- 点 (x, y) における密度関数の推定は，

$$\hat{f}(x,y) = \frac{1}{nh_xh_y}\sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x_i - x}{h_x}\right) K\left(\frac{y_i - y}{h_y}\right)$$

- バンド幅 h_x と h_y の指定に関しては，１次元のときと同様の問題がある．
- kde2d 関数が２次元版の密度推定である．

```
# run0029.R
# ２次元の密度推定（help(kde2d) の例題を参照）

x <- geyser$waiting; y <- geyser$duration
f <- kde2d(x,y,n=100) # 100*100 の格子点で密度推定
image(f,xlab="waiting",ylab="duration") # 密度を色で表示
contour(f,add=T) # 等高線
points(x,y,col=4) # データ点
dev.copy2eps(file="run0029-d1.eps")
```



run0029-d1

4 課題

4.1 課題 3-1

データセット dat0002 から変量を二つ選び，それぞれについて，以下を実行せよ．

- ヒストグラムの描画し，ラグを描き込む．
- カーネル密度推定を行い，上図に重ね描きする．
- 平均，メディアン，刈り込み平均 ($\alpha = 0.1$)，t-分布の最尤推定 ($df = 5$) から得られる m を示し，それらの違いについてコメントする．
- 標本標準偏差，四分位偏差（run0021.R で計算している irq），MAD，t-分布の最尤推定 (自由度=5) から得られる s を補正したもの (run0040.R で計算しているように tsdcorrection(5) で割る) を示し，それらの違いについてコメントする．

4.2 課題 3-2

上で選んだ二変量について，run0029.R を参考にして２次元の密度推定を実行せよ．