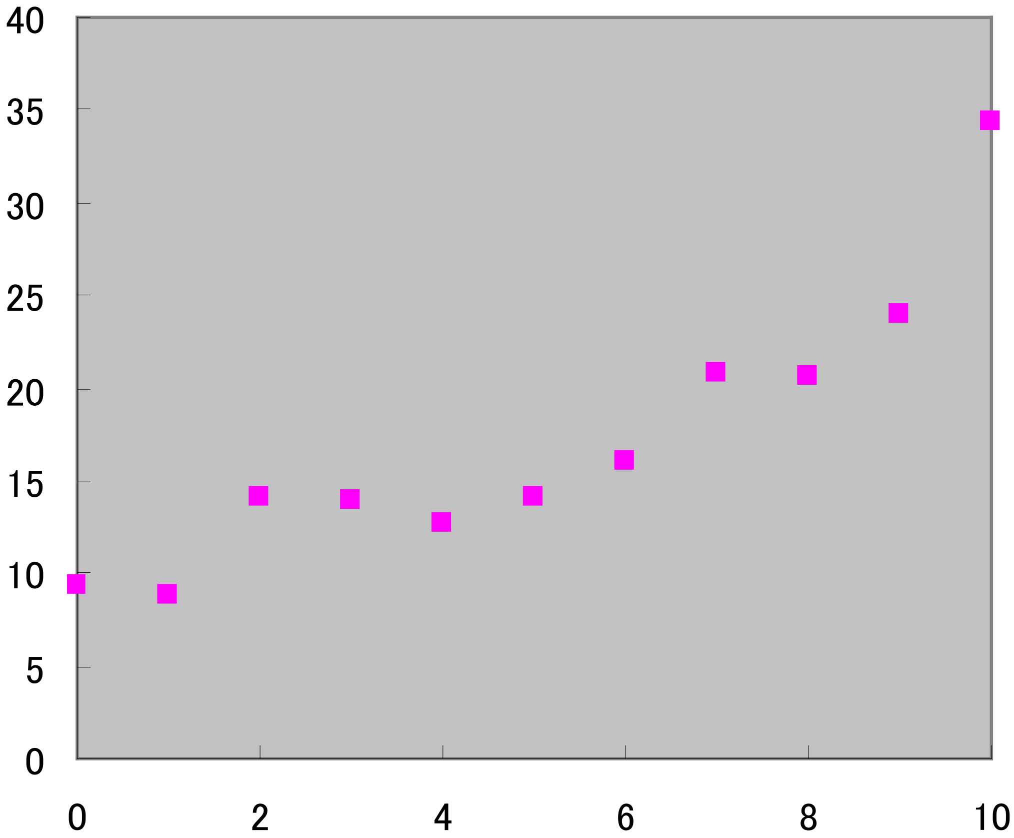
赤池情報量規準
Akaike's Information Criterion
AIC

北海道大学大学院水産科学研究院
松石　隆

理論曲線のあてはめ
Curve Fitting



手順
curve fitting procedure

１. モデルを決める　/ decide a model

$$y = a + bx + cx^2$$

２. 初期値を決める / set initial parameters

$$y = 6 + 0.2x + 0.3x^2$$

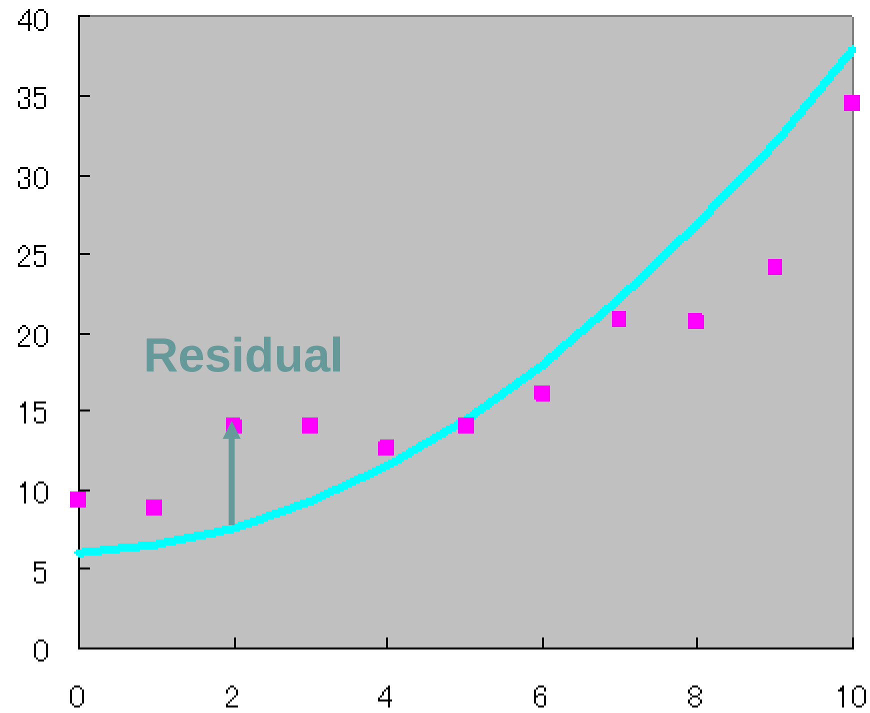
手順
curve fitting procedure

3 残差平方和の計算

sum of square residuals

$$SS = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2$$

$$\hat{y}_i = 6 + 0.2x_i + 0.3x_i^2$$



手順
Curve fitting procedure

4 残差平方和が最少になるパラメータを探す

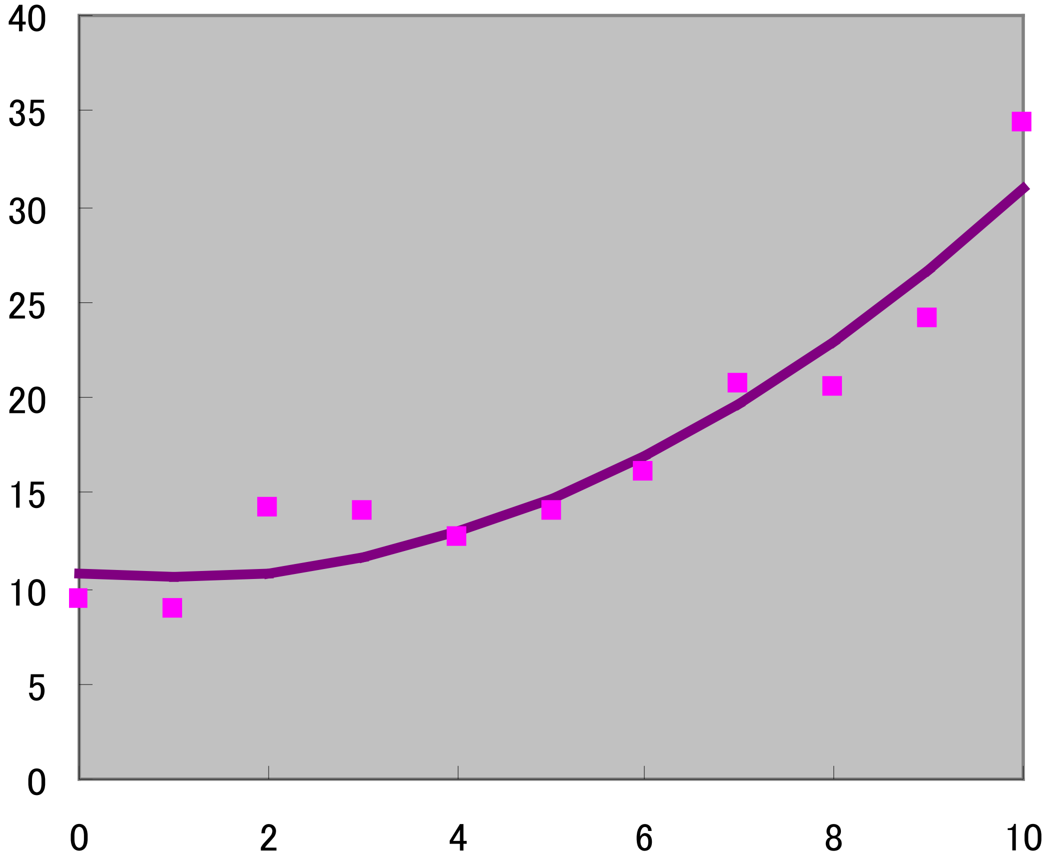
Find the parameters that minimize the SS

- 微分　differential equations

$$\frac{\partial SS}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial SS}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial SS}{\partial c} = 0$$

- 非線形最適化法 NL optimization method
  SOLVER addin (MS EXCEL) etc

$$\hat{y} = 10.7 - 0.43x + 0.25x^2$$

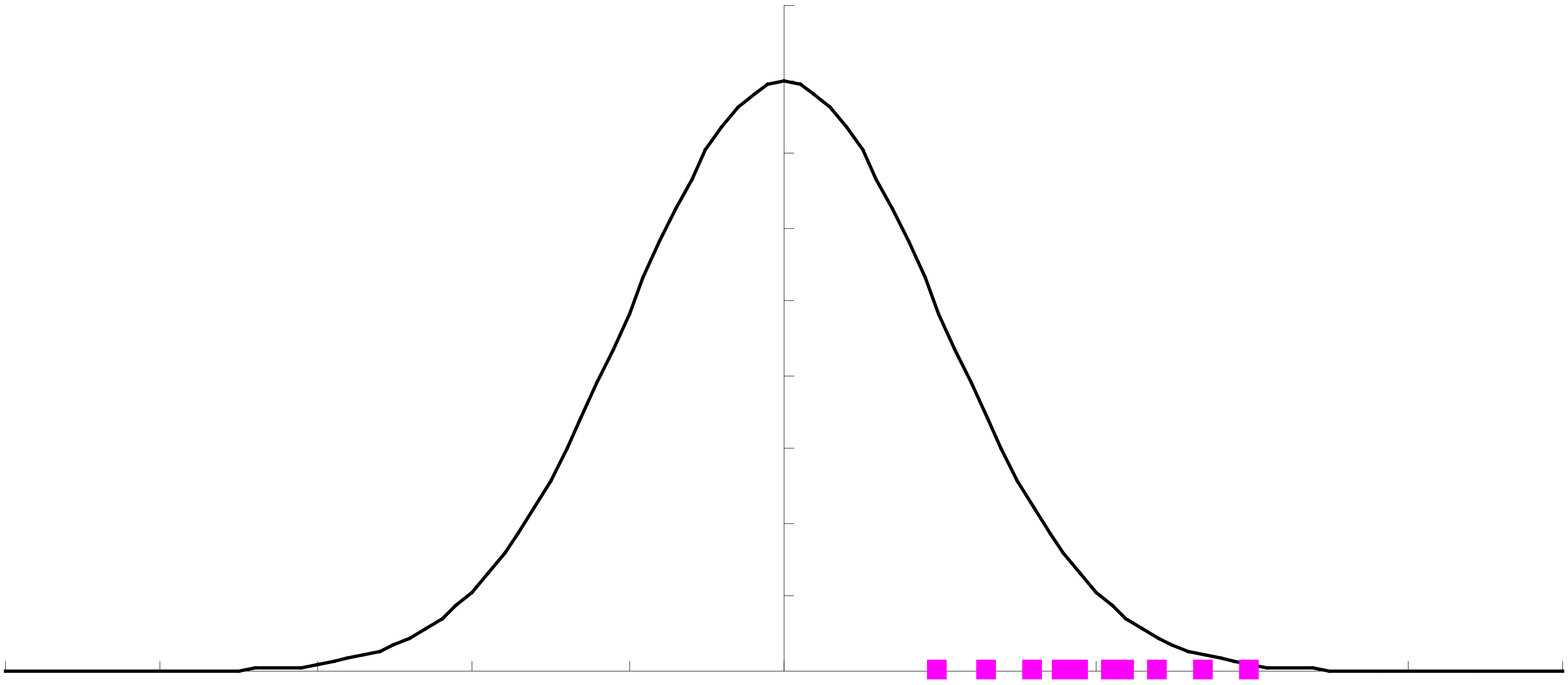


最尤推定量

Maximum Likelihood Estimator

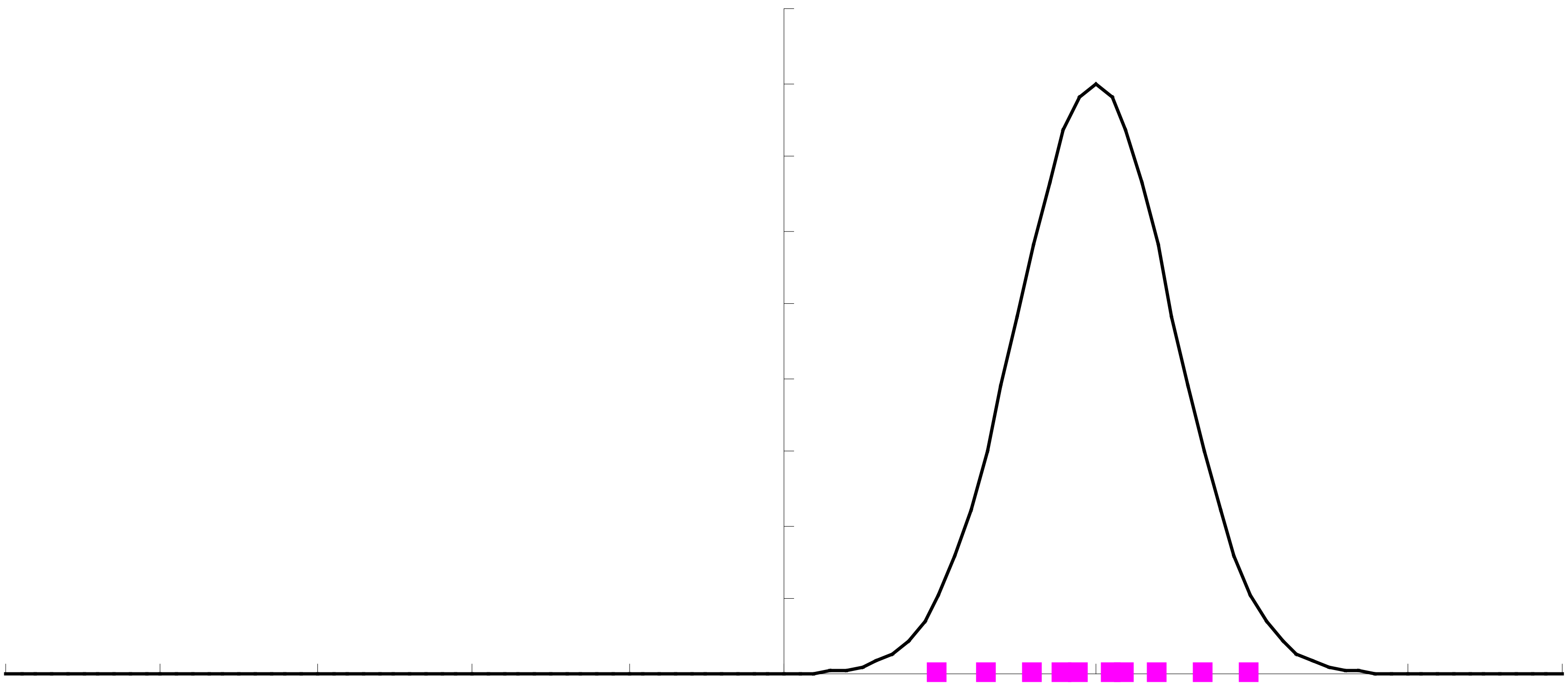
- このデータ■は$N(0,1^2)$に従う母集団から取られた標本のデータだという。尤もらしいか?

$N(0,1^2)$の確率密度分布

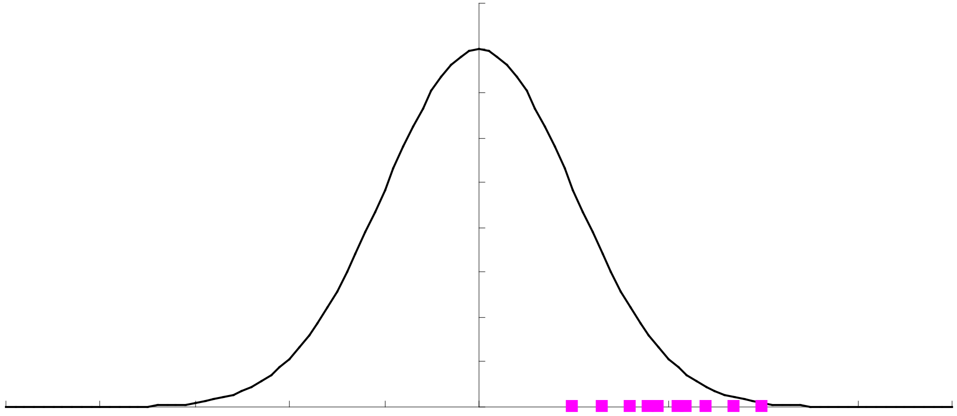


- このデータ■は$N(2,0.5^2)$に従う母集団から取られた標本のデータだという。尤もらしいか?

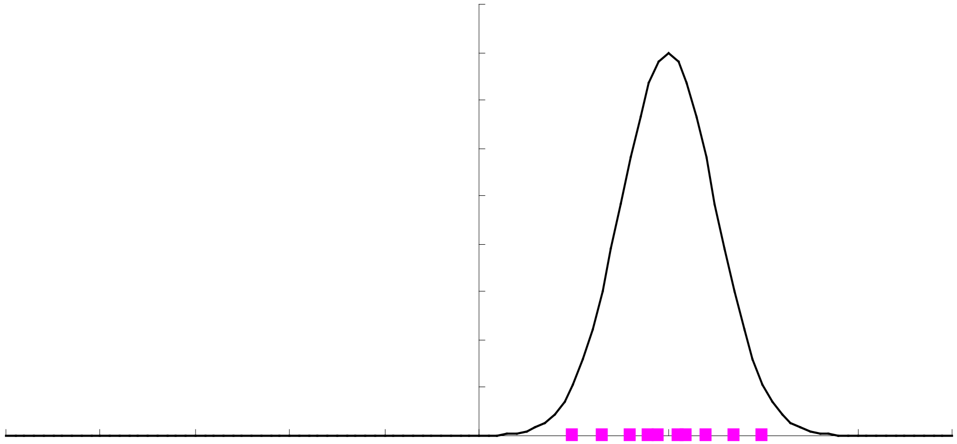
$N\left(2,0.5^2\right)$の確率密度分布



何が尤もらしいのか

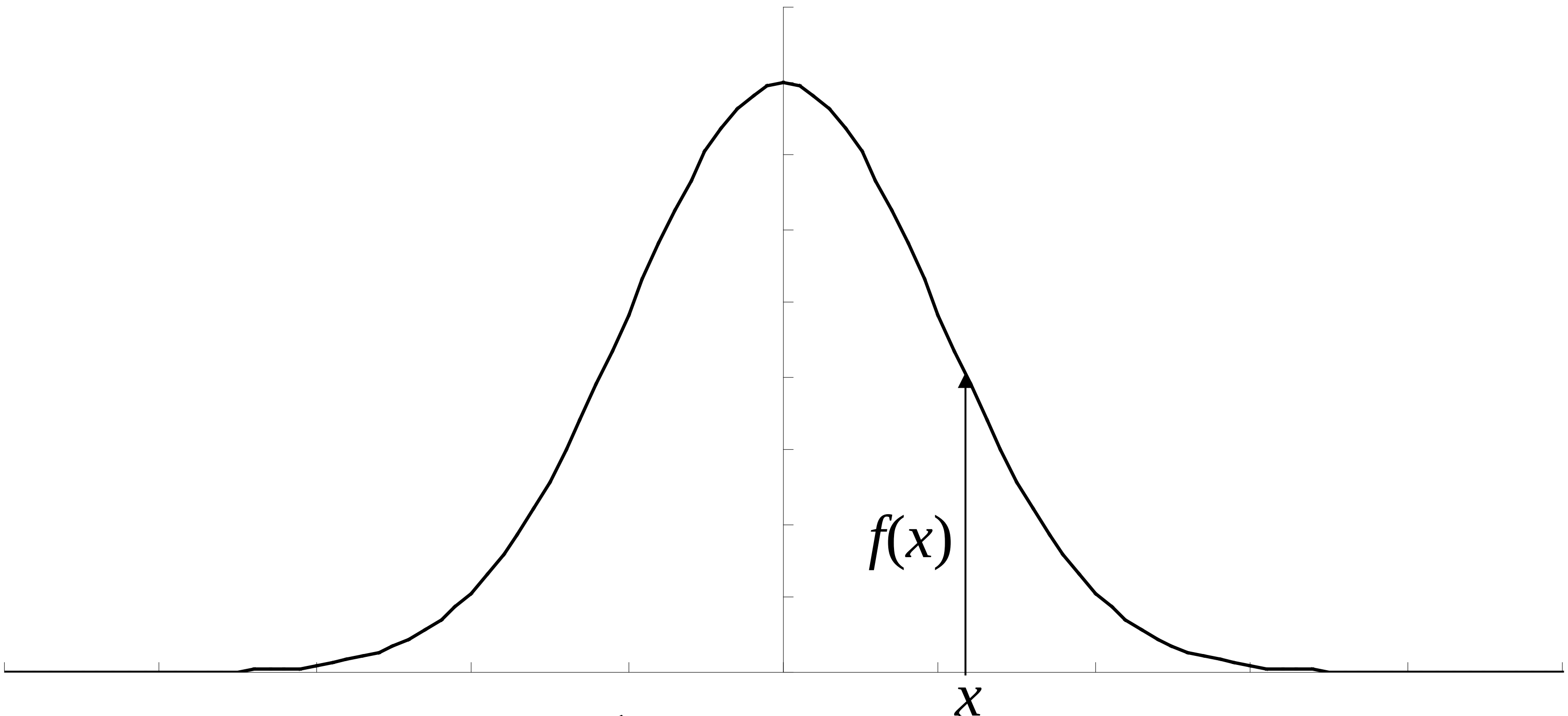


←山が低いところに
データが沢山ある



←山が高いところに
データが沢山ある

確率密度分布関数の値が，そのデータが出てくる確率（尤もらしさ）を表している



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

- データxが生じる確率は$f(x)$に比例する。
- これを尤度と呼ぶ。
- データx_1,x_2 が同時に生じる確率は$f(x_1)f(x_2)$と積に比例するので，その時の尤度を$f(x_1)f(x_2)$とする。
- 尤もらしさは$f(x)$を決定するパラメータ（ここではμとσ^2）によって変化する

尤度

- もっともらしさ
- 「パラメータθをもつ確率密度関数に従う確率分布からデータxが出た」もっともらしさは$f(x;\theta)$で表す
- 「パラメータθをもつ確率密度関数に従う確率分布からデータ$x_i, i=1,n$が出た」もっともらしさは$f(x_1,..x_n;\theta)$で表す

- これを尤度という

$$l(\theta; x_{1,\ldots,} x_n) = f(x_1,\ldots, x_n; \theta)$$

- x_iが互いに独立の場合

$$\begin{aligned} l(\theta; x_1,\ldots, x_n) &= f(x_{1,} \ldots, x_n; \theta) \\ &= f(x_1;\theta)\cdot f(x_2;\theta)\cdots f(x_n;\theta) \\ &= \prod_{i=1}^{n} f(x_i;\theta) \end{aligned}$$

最尤推定量

- 最も尤度が高くなる時のパラメータを以て，推定値とする方法
- $\hat{\theta}(X_1,\ldots,X_n)$と表記する
- 尤度が最大になるとき対数尤度
  $\log l(\theta;x_1,\ldots,x_n)$
  も最大になることから，対数尤度を用いて，最尤推定量を計算するともある。

例：正規分布
Example Normal Distribution

$$f\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$\ln f\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) = -\frac{1}{2}\ln\left(2\pi\sigma^2\right) - \frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2$$

$$LL = \sum_{i=1}^{n} \ln f\left(x_i \mid \mu, \sigma^2\right) = \underbrace{-\frac{n}{2}\ln\left(2\pi\sigma^2\right)}_{\text{データ数とパラメータが与えられると決まる値}} - \frac{1}{2\sigma^2}\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2}_{\text{μからの残差平方和}}$$

データ数とパラメータが与えられると決まる値

μからの残差平方和

ではどうやってモデルを決めるのか?
How do you decide the model?

候補となるモデル
candidate polinomials

$$\hat{y} = c_0$$

$$\hat{y} = c_0 + c_1 x$$

$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$

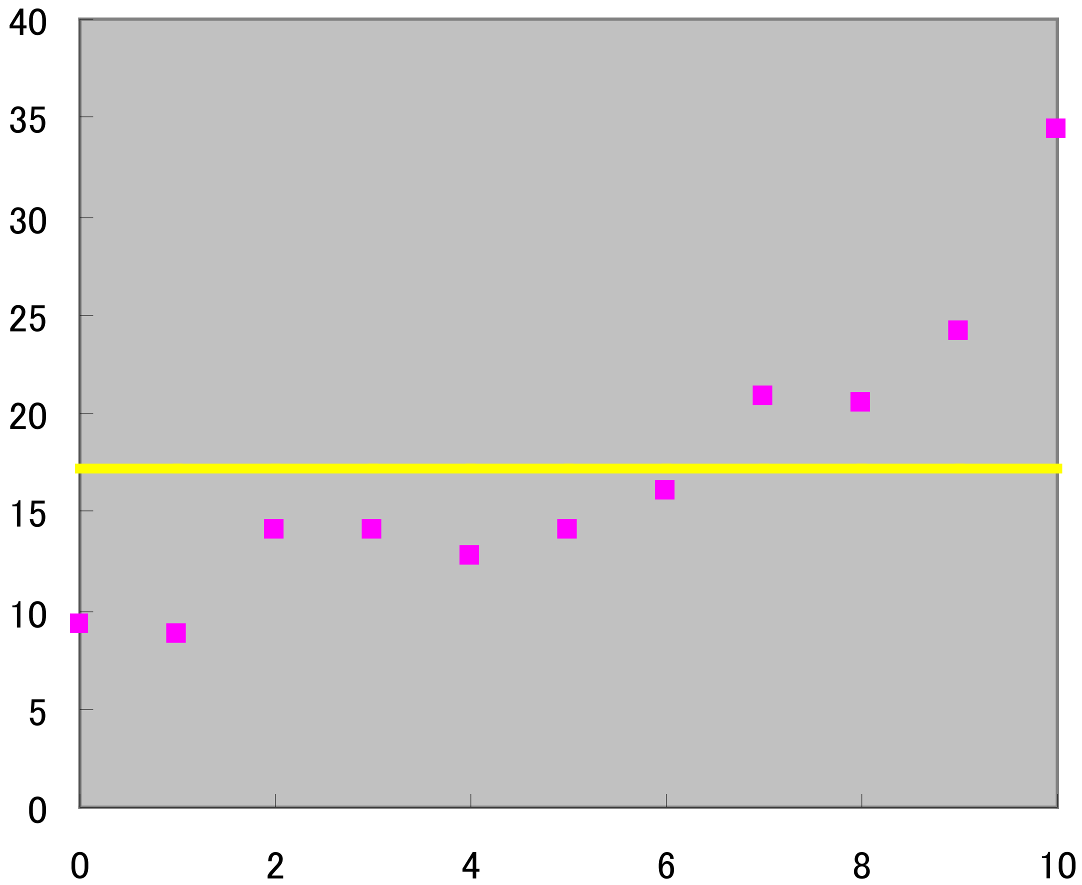
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$$

$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4$$

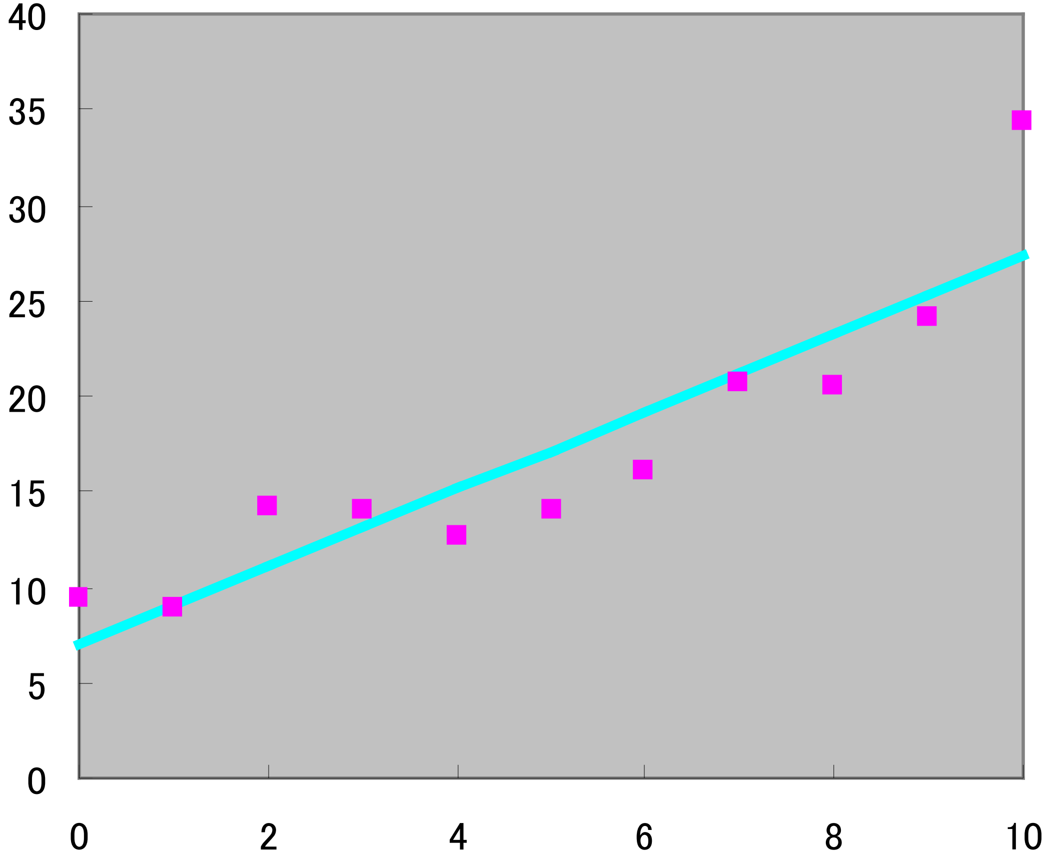
$$\vdots$$

$$\hat{y} = \sum_{i=0}^{m} c_i x^i$$

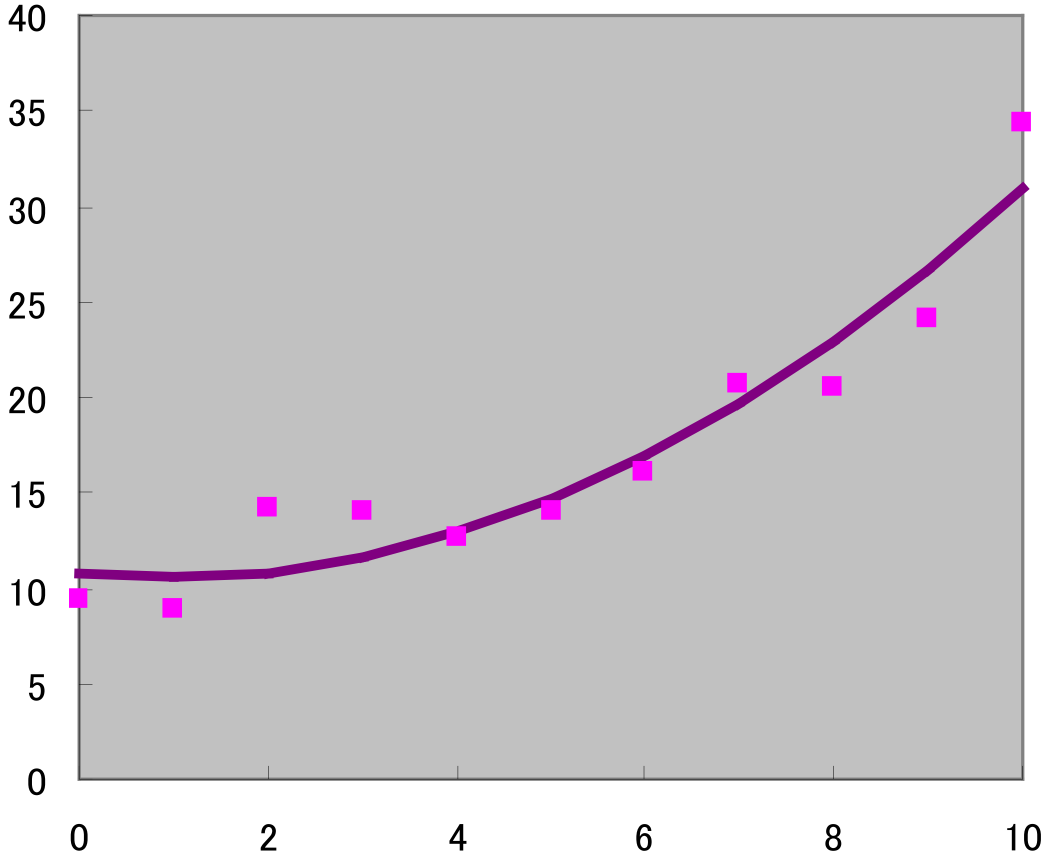
$$\hat{y} = c_0$$



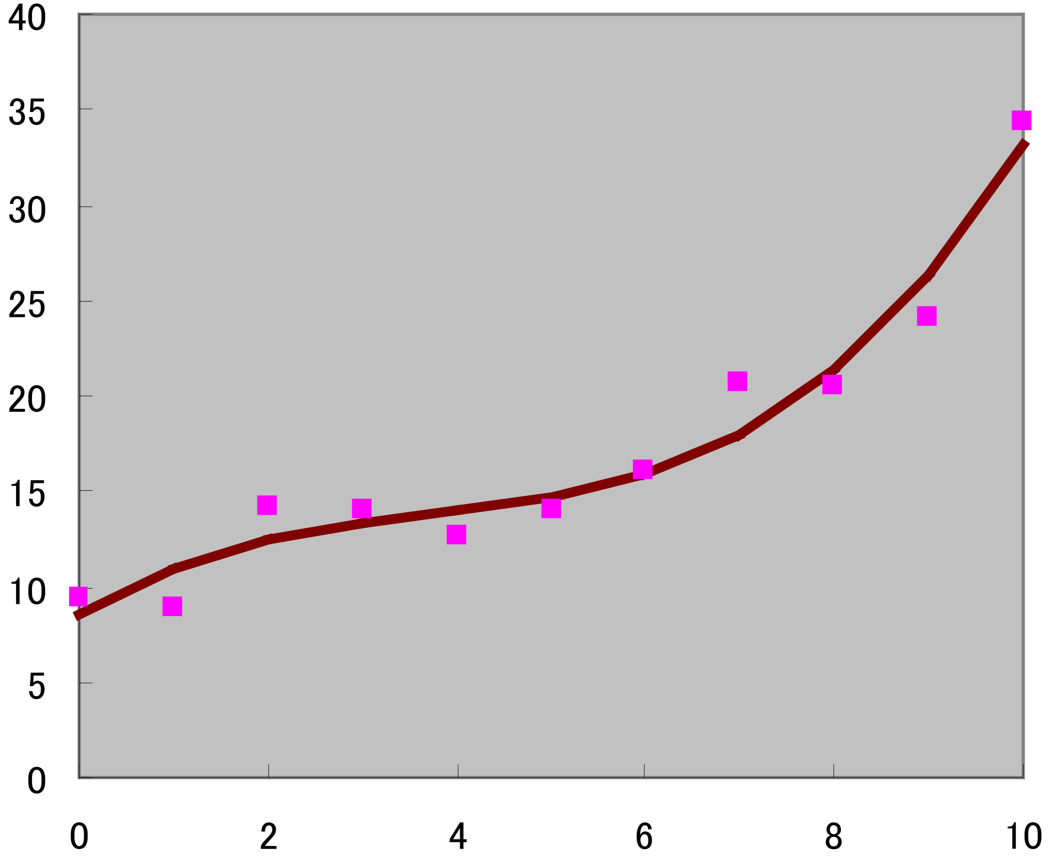
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x$$



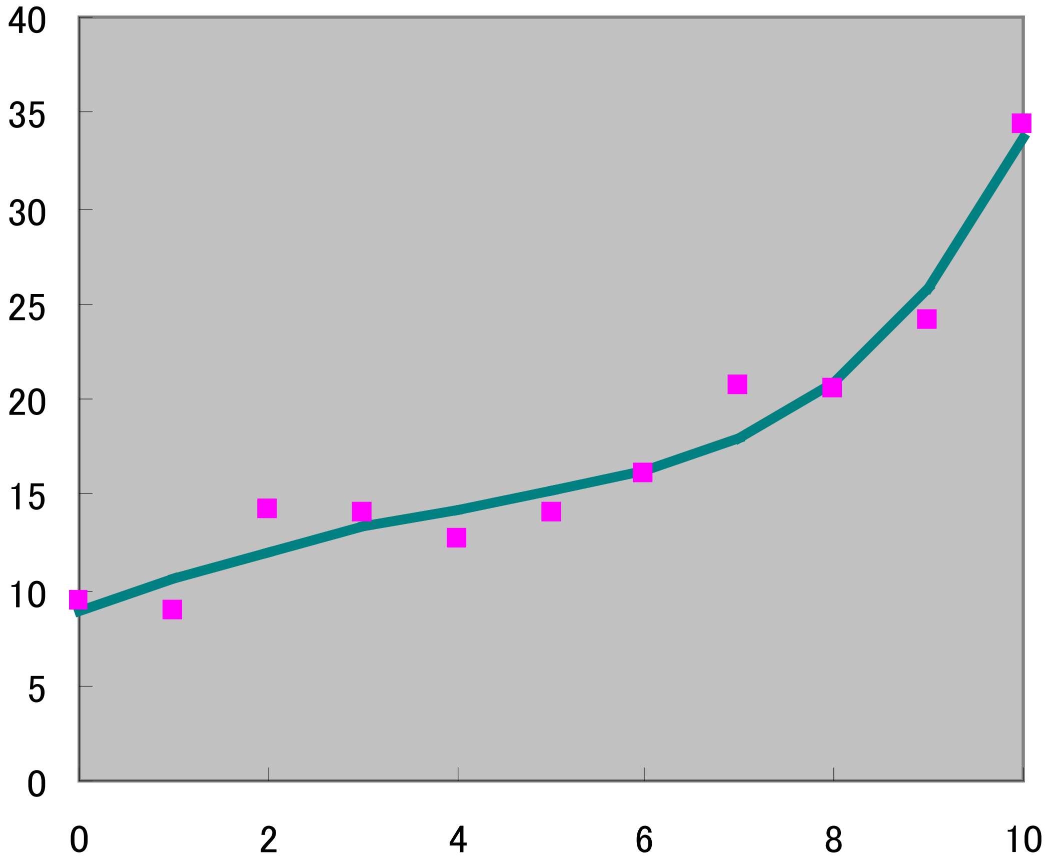
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$



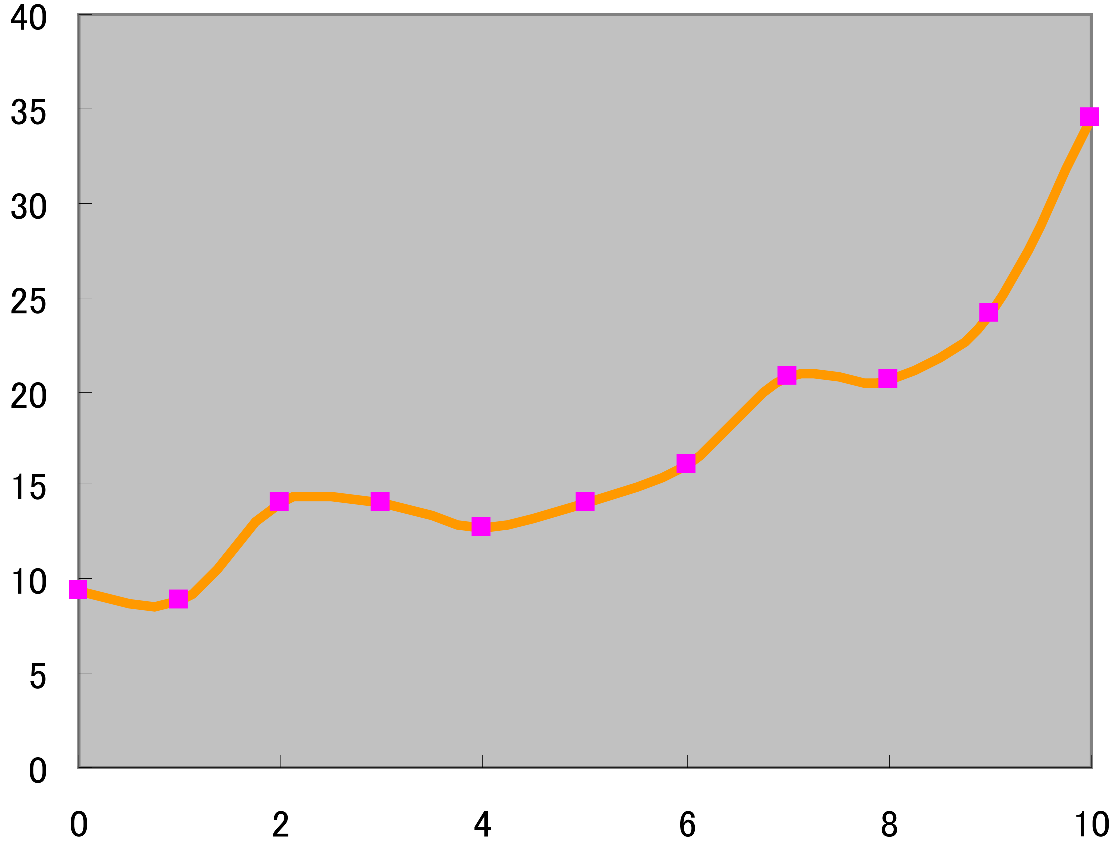
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$$



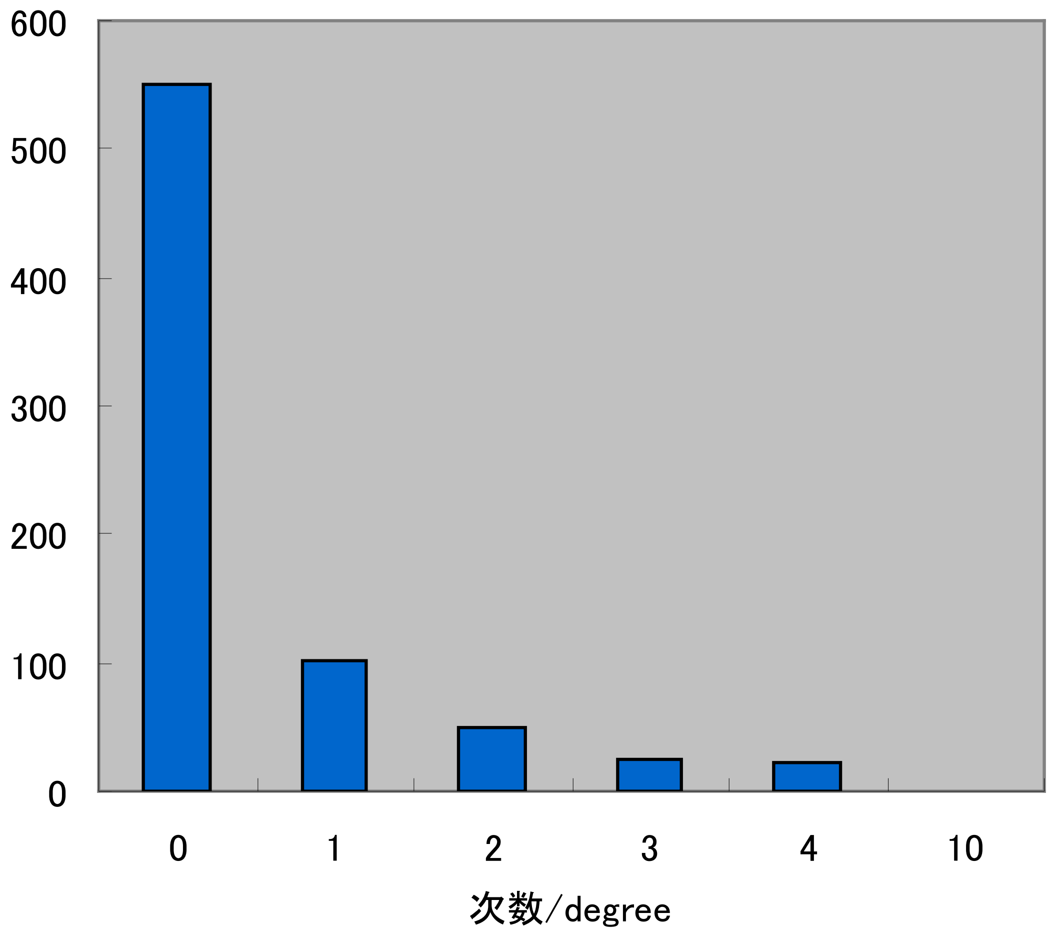
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4$$



$$\hat{y} = \sum_{i=0}^{10} c_i x^i$$



残差平方和 SS



当てはまりと次数

Fitting and degree of polynomials

- 次数が高いほど残差平方和は小さい
  The higher the degree is, the smaller the SS is

$$SS = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2$$

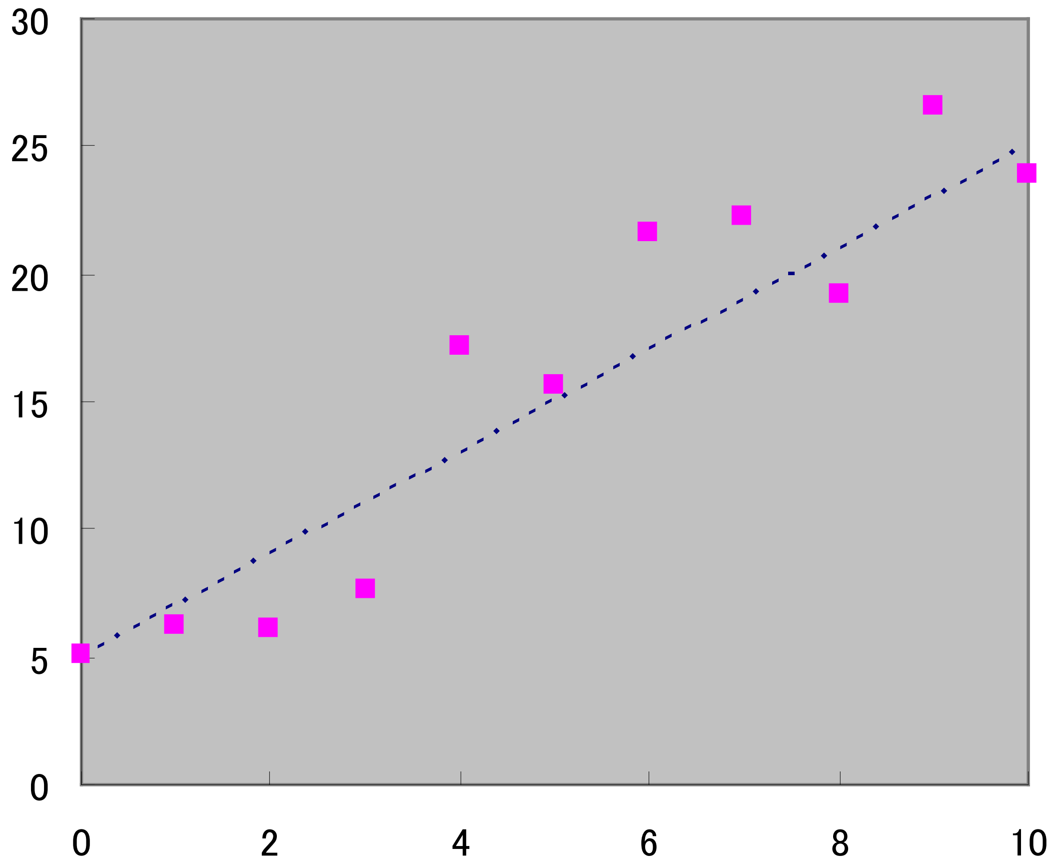
- 次数がデータ数と等しくなると完璧にデータに当てはめる事が可能
  Theoretically, when the degree is equal to the number of data, the curve is perfectly fit the data.

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{n} c_i x^i = \prod_{i=1}^{n} \left(x_i - x \right)$$

次数は多ければ多いほど良いのか
Really the more the better?

別の乱数を振る

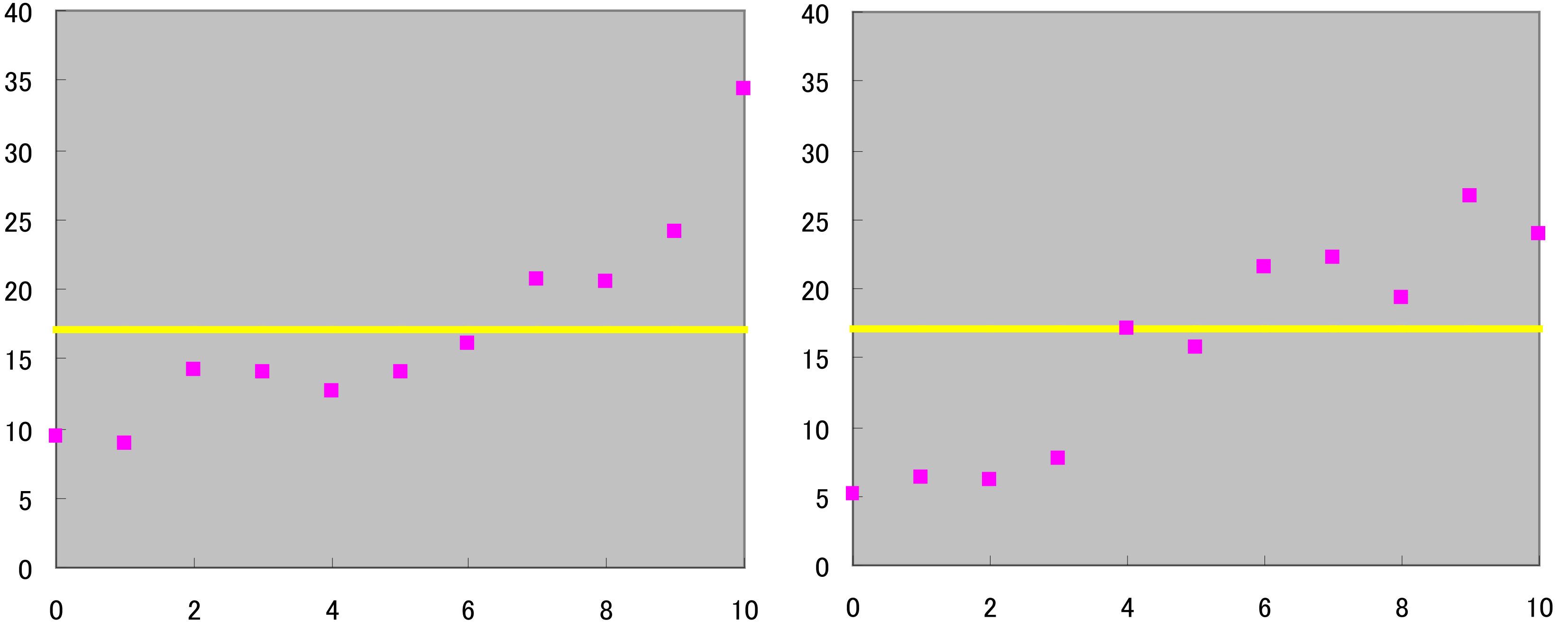
Make other data from the same liner equation



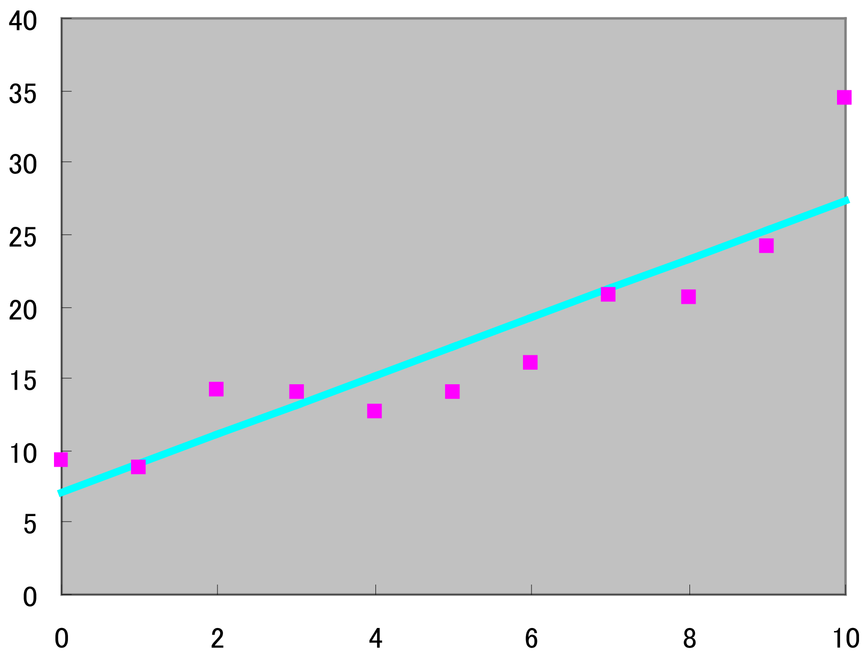
先ほど推定したモデルは
新しいデータを予測できているか？

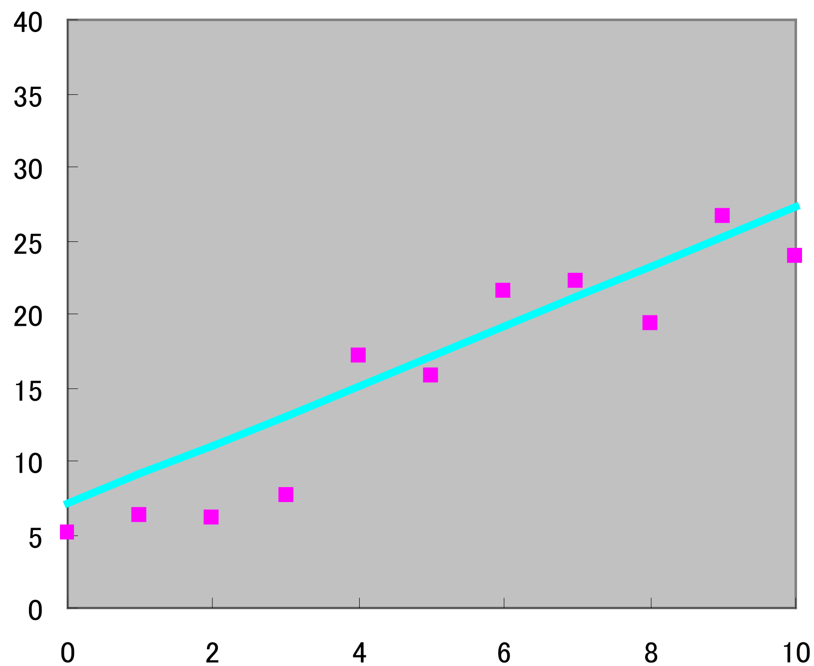
Does the estimated models predict the new data?

$$\hat{y} = c_0$$

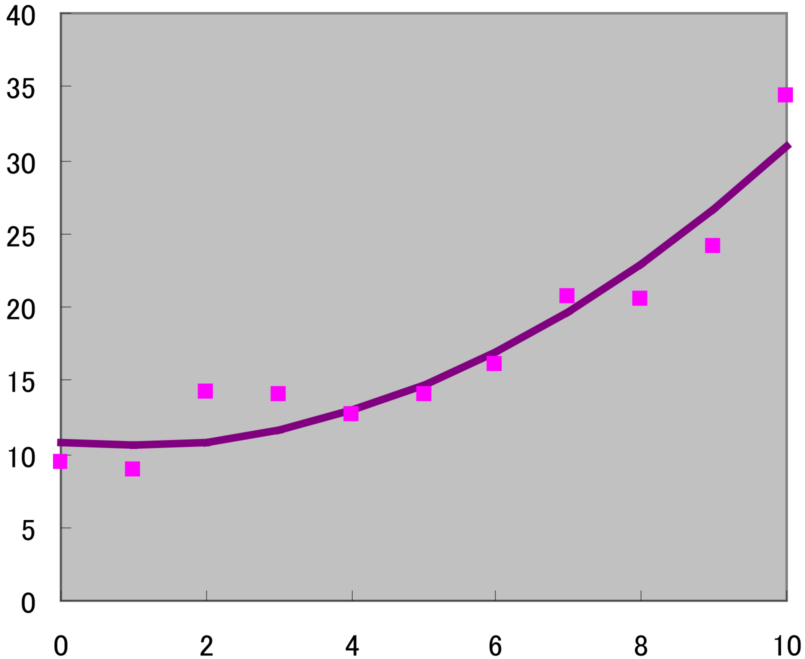


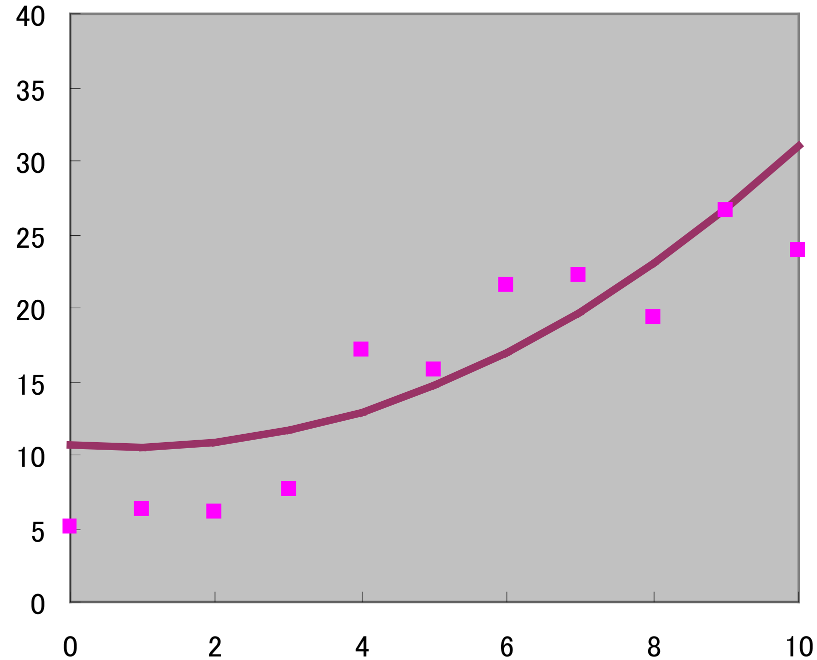
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x$$



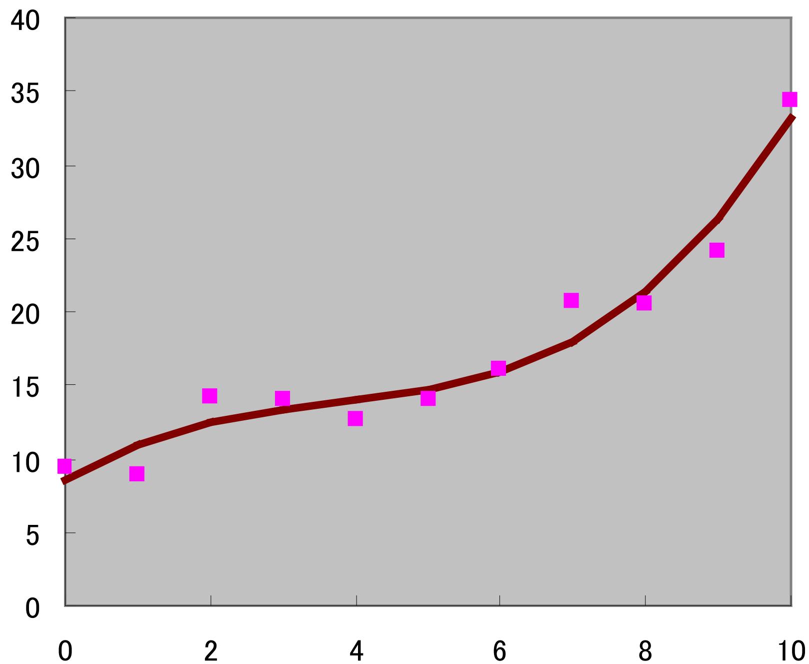


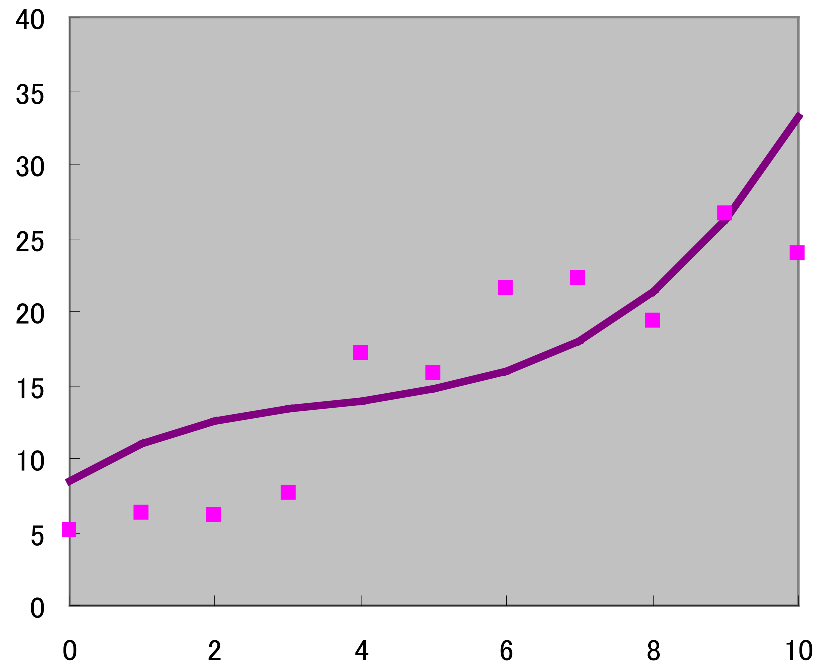
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$



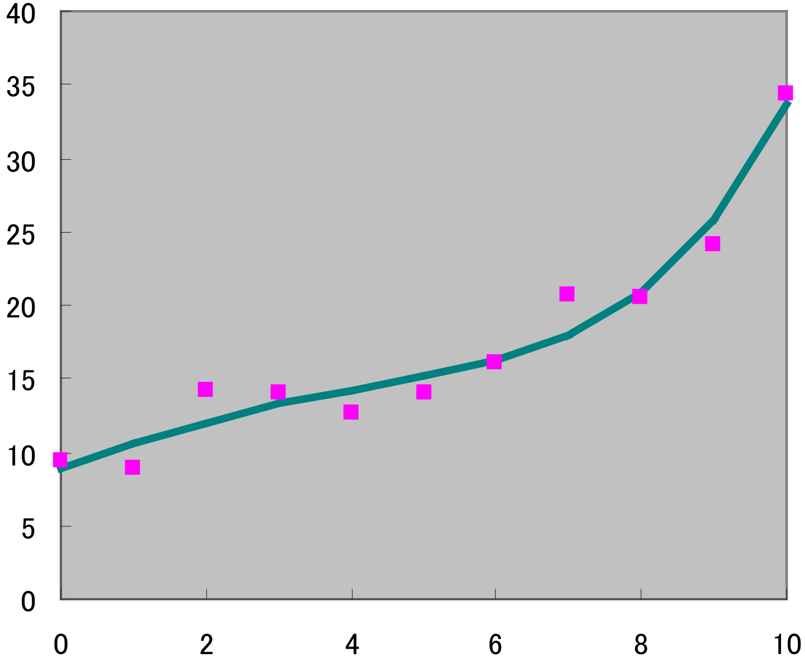


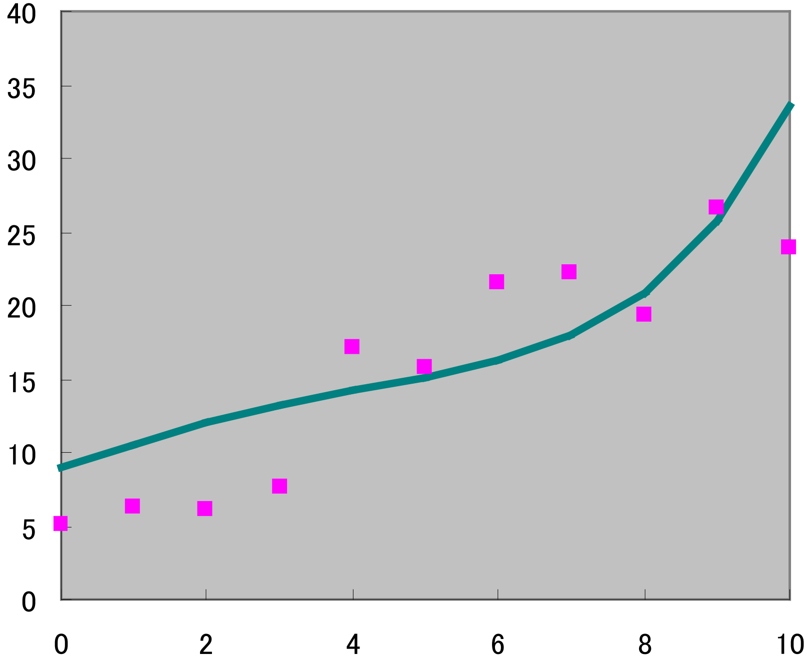
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$$



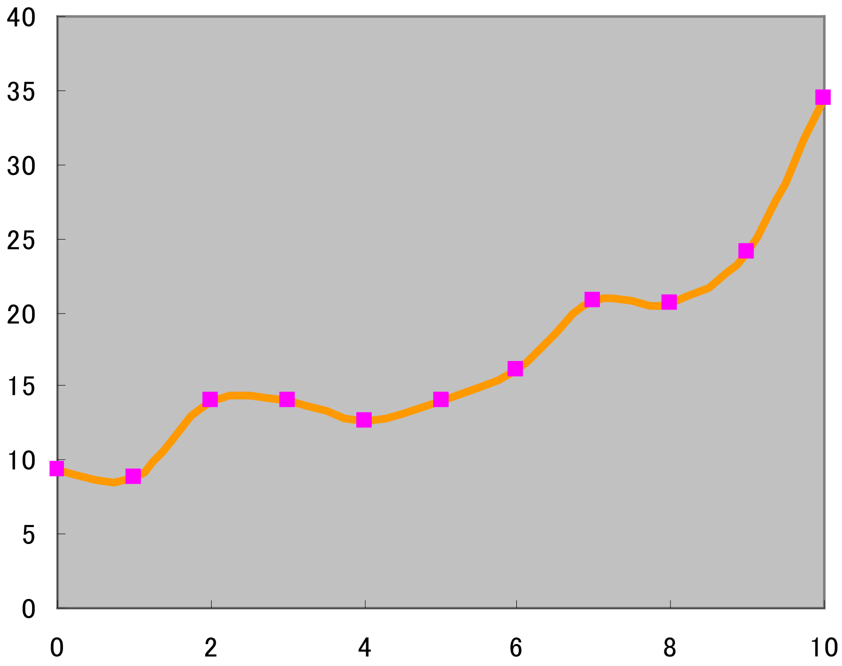


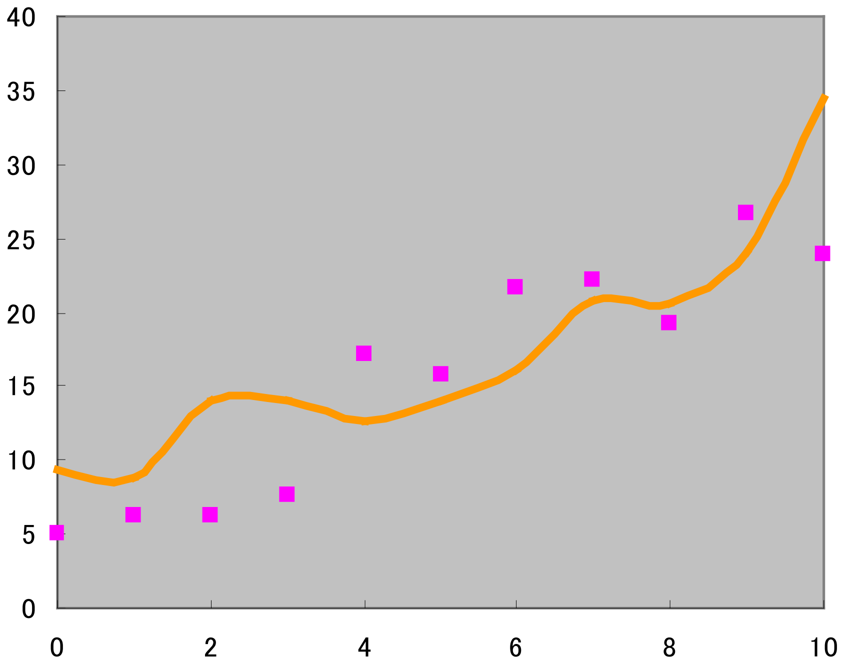
$$\hat{y} = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4$$



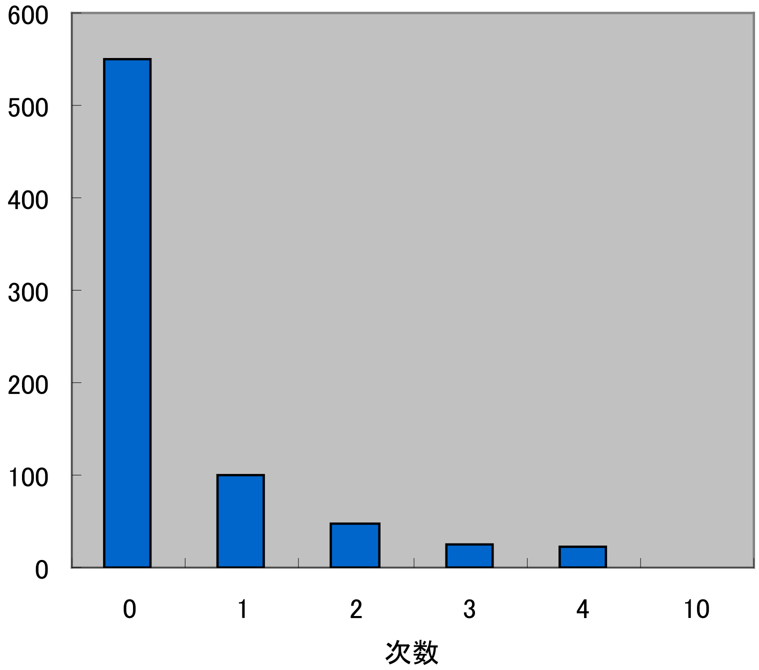


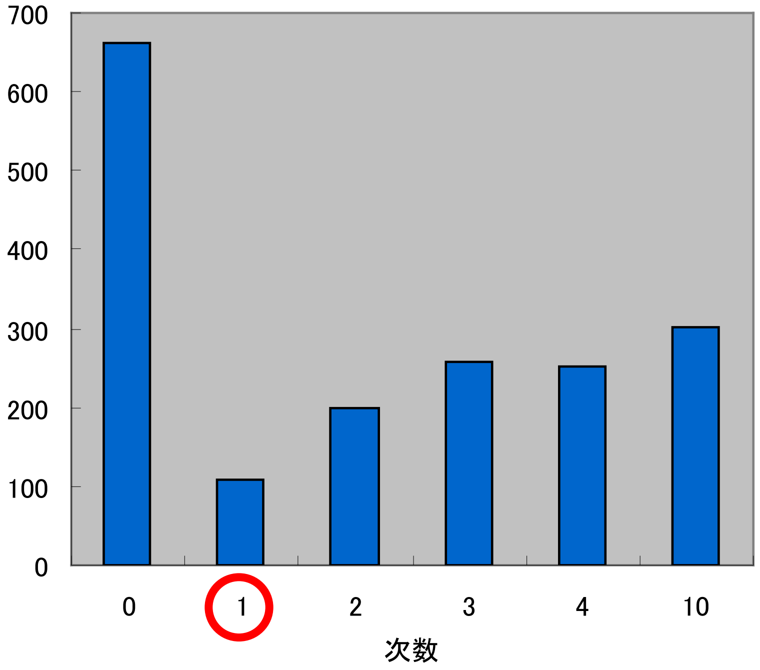
$$\hat{y} = \sum_{i=0}^{10} c_i x^i$$





残差平方和　SS


600
500
400
300
200
100
0
0
1
2
3
4
10
次数


700
600
500
400
300
200
100
0
0
1
2
3
4
10
次数

正しい次数のモデルは
未知のデータにも当てはまりが良い

The model with true degree
fit to unknown data.

手持ちのデータから正しいモデルを選択する方法

How to select the best model only from the observed data

モデル選択の指標
Criterion for model selection

- 次数が高すぎるモデル high degree
  →当てはまりが良くなる good fit
  →未知のデータに当てはまらない bad forecast
- 次数が低すぎるモデル low degree
  →当てはまりが悪くなる bad fit
  →未知のデータに当てはまる good forecast
- 当てはまりの指標とモデルの単純さの指標の組み合わせ
  Combination of fitting and model simplicity index

AIC 赤池情報量規準
Akaike's Information Criterion

$$AIC(M) = -2 \times MLL(M) + 2 \times k$$

M: モデル model

MLL: 最大対数尤度 maximum log likelihood

k: パラメータ数 number of parameters

正規分布の場合
Example of Normal Distribution

$$AIC(M) = -2 \times MLL(M) + 2 \times k$$

$$MLL = -\frac{n}{2}\ln\left(2\pi\sigma^{2*}\right) - \frac{1}{2\sigma^{2*}}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \mu^*\right)^2$$

$$AIC = n\ln(2\pi) + n\ln\frac{SS}{n} + n + 2(m+2)$$

利用例

アワビの成長曲線について

Growth Curve of Abalone

松石　隆・斉藤和敬・菅野泰次

北大水産彙報 46: 53-62, 1995

アワビの年齢成長データを成長曲線に当てはめた

1. von Bertalanffy の成長曲線

$$l_{i,t} = L_\infty(1 - e^{-K(t-c)}) + \varepsilon_{i,t}$$

2. Logistic 成長曲線

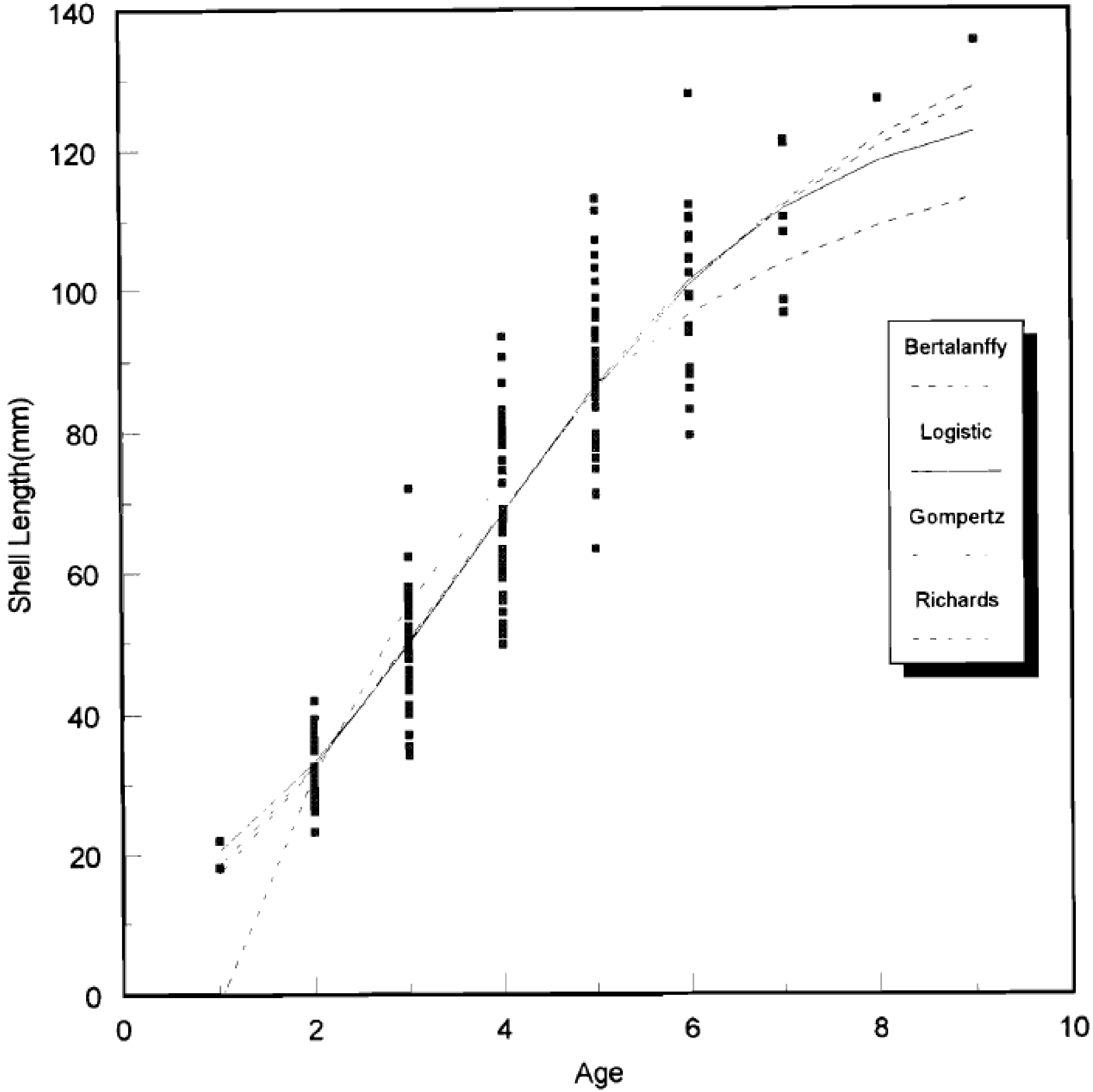
$$l_{i,t} = \frac{L_\infty}{1 + e^{-K(t-c)}} + \varepsilon_{i,t}$$

3. Gompertz の成長曲線

$$l_{i,t} = L_\infty e^{-ce^{-Kt}} + \varepsilon_{i,t}$$

4. Richards (Richards, 1959) の成長曲線

$$l_{i,t} = [L_\infty^{1-m} - (L_\infty^{1-m} - c^{1-m})e^{-K(1-m)t}]^{\frac{1}{1-m}} + \varepsilon_{i,t}$$

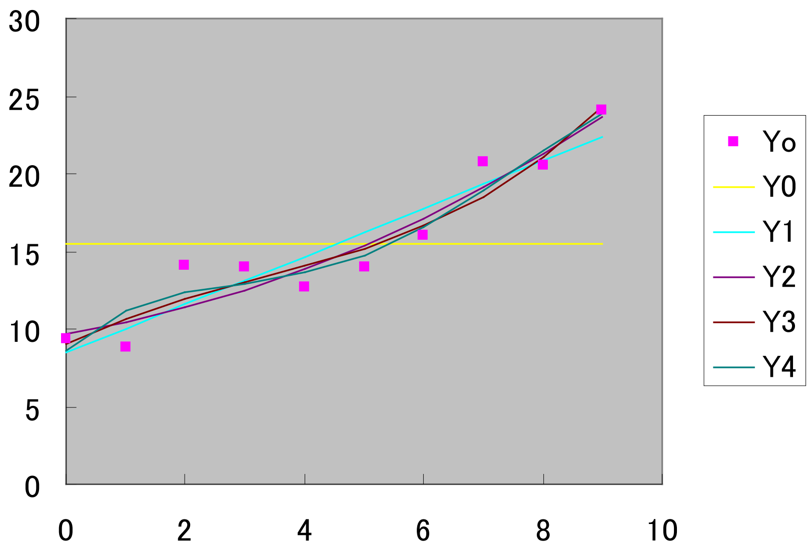

140
120
100
80
60
40
20
0
Shell Length(mm)
0
2
4
6
8
10
Age
Bertalanffy
Logistic
Gompertz
Richards

結果

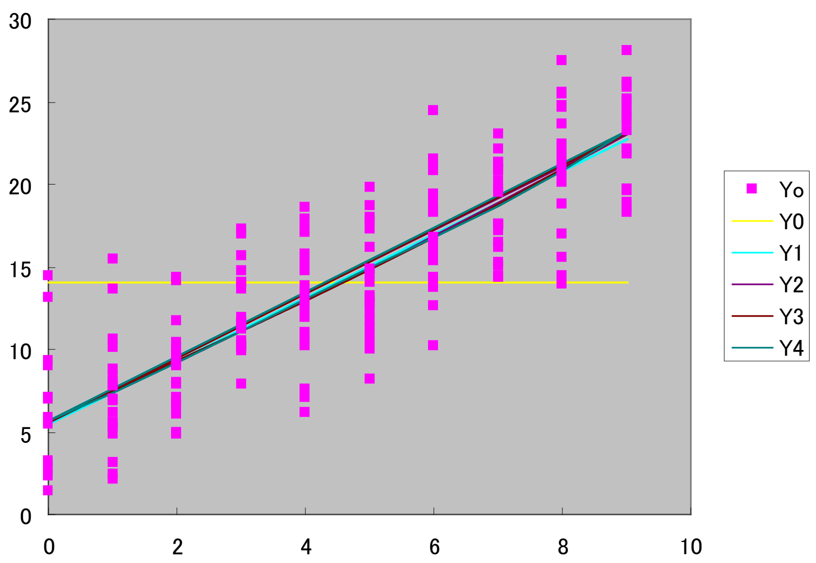
Growth function	L_∞	K	c	m	σ_ε^2	LL	n	AIC
von Bertalanffy	125.0	0.2976	1.031		79.27	724.68	4	1457.36
(s.e.)	(4.52)	(0.0221)	(0.770)		(7.81)			
Logistic	127.8	0.5982	3.760		99.48	609.90	4	1227.80
(s.e.)	(6.96)	(0.0534)	(0.213)		(10.98)			
Gompertz	147.6	0.3444	3.022		99.21	609.68	4	1227.36*
(s.e.)	(12.08)	(0.0428)	(0.205)		(10.95)			
Richards	139.0	− 1.351	9.165	1.313	99.10	609.59	5	1229.18
(s.e.)	(22.8)	(3.232)	(5.462)	(0.702)	(0.11)			

数値例

n=10,200



30
25
20
15
10
5
0
0
2
4
6
8
10
Yo
Y0
Y1
Y2
Y3
Y4



30
25
20
15
10
5
0
0
2
4
6
8
10
Yo
Y0
Y1
Y2
Y3
Y4

様々なデータ数におけるAIC

Degree	0	1	2	3	4
n=10	63.5	43.9	43.5	44.3	45.4
20	131.9	106.2	100.4	101.0	103.0
50	331.1	264.3	262.7	264.3	266.0
100	661.9	513.6	514.0	515.9	517.7
200	1,314.0	1,040.8	1,042.3	1,044.2	1,046.1

様々な情報量規準

- AIC

$$AIC = -2LL + 2p$$

- c-AIC （有限項補正）

$$c - AIC = -2LL + 3p/2$$

- BIC（ベイズ統計）

$$BIC = -2LL + p\ln(n)$$

選択された次数

	TRUE	AIC	c−AIC	BIC
n=10	1	2	2	2
20	1	2	2	2
50	1	2	2	1
100	1	1	2	1
200	1	1	1	1

まとめ

- パラメータ数の多いモデルほど、当てはまりが良い
- 当てはまりが良いモデルが良い予測をする訳ではない。
- よい予測をするモデルを選択するためにAICが有用
- AICは相対的な大小のみが意味がある
- データ数がある程度大きい必要がある

Conclusion

- Higher degree model fit to data well.
- Good fit model does not always forecast well.
- AIC is a good tool to choose a better forecasting model.
- Only the relative scale of AIC has mean.
- AIC does not work for small sample.

参考図書

- 赤池弘次／室田一雄著『赤池情報量規準AICモデリング･予測･知識発見』 共立出版(2007)[詳細]
- 鈴木義一郎『情報量規準による統計解析入門』講談社(1995)[詳細]
- 坂元慶行ほか『情報量統計学』 共立出版(1983)[詳細]