「生態系機能学総論」の一部:

生態学の統計モデリング (2011 年 4–5 月) 投影資料

全部で 7 回講義の 4 回目

階層ベイズモデルの基礎 (1)

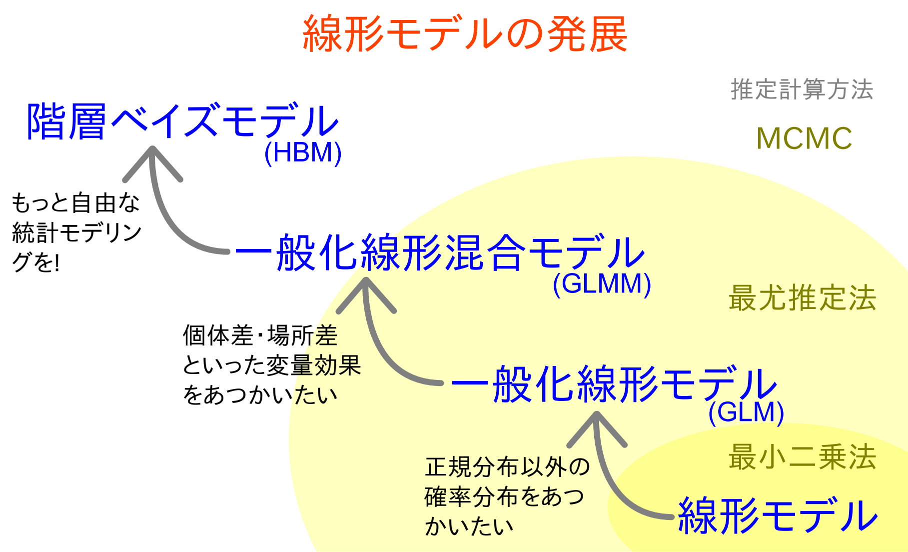
個体差のモデリング

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

http://goo.gl/Brd9g

今回と次回で説明しようとすること

- パラメーターをどうやって推定するか?
  - 最尤推定 → Markov chain Monte Carlo (MCMC)
- 一般化線形モデル → 階層ベイズモデル
  - より現実的・実戦的なデータ解析のために



階層ベイズモデル・MCMC の基礎

今回:

- 最尤推定って何?
- MCMC によるパラメーター推定?
- 階層ベイズモデルとは何か?

次回:

- 階層ベイズモデルを推定するソフトウェアは?
- R とどうやって連動させるか?

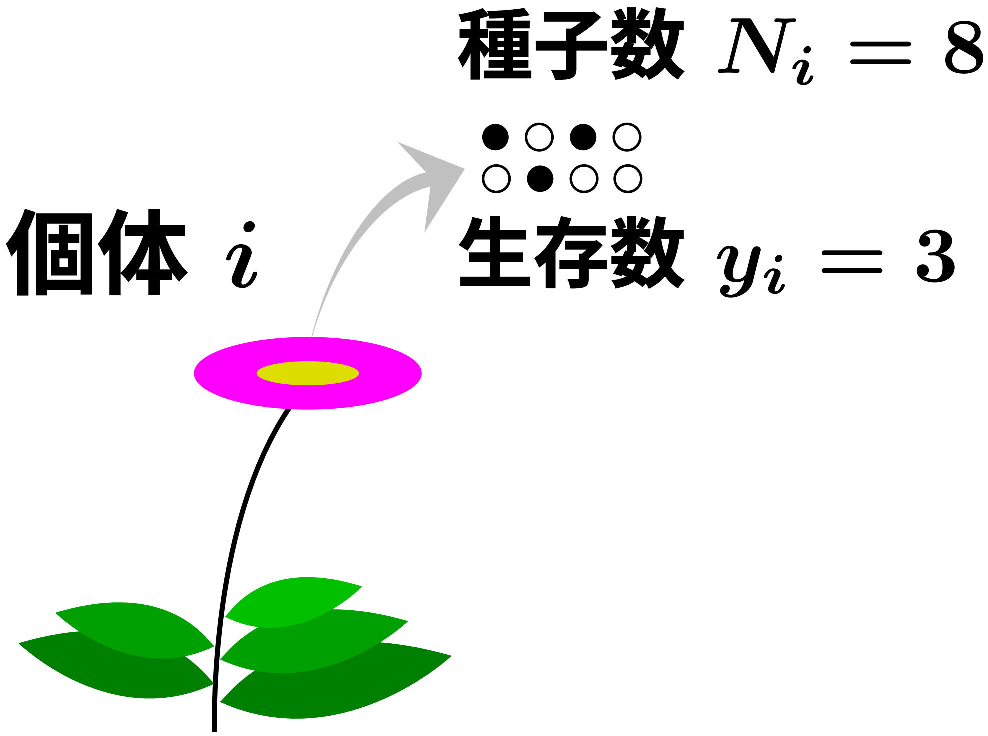
このあとの統計モデル化の説明の手順

1. 簡単な例題: GLM でうまくいく場合
   - 統計モデルの部品: 二項分布モデル (GLM)
   - 統計モデルの推定方法: 最尤推定法
2. MCMC とベイズモデリング
   - 最尤推定を MCMC におきかえてみる
   - MCMC で得られた結果をベイズ的に解釈
3. ちょっと難しい例題: GLM でうまくいかない場合
   - 「個体全体の平均」と「個体差」をどうあつかう?
   - 階層ベイズモデル!

本日の例題: 植物の種子と二項分布パラメーターの最尤推定とは何か?

繁殖生態学の例題: 架空植物の生存確率

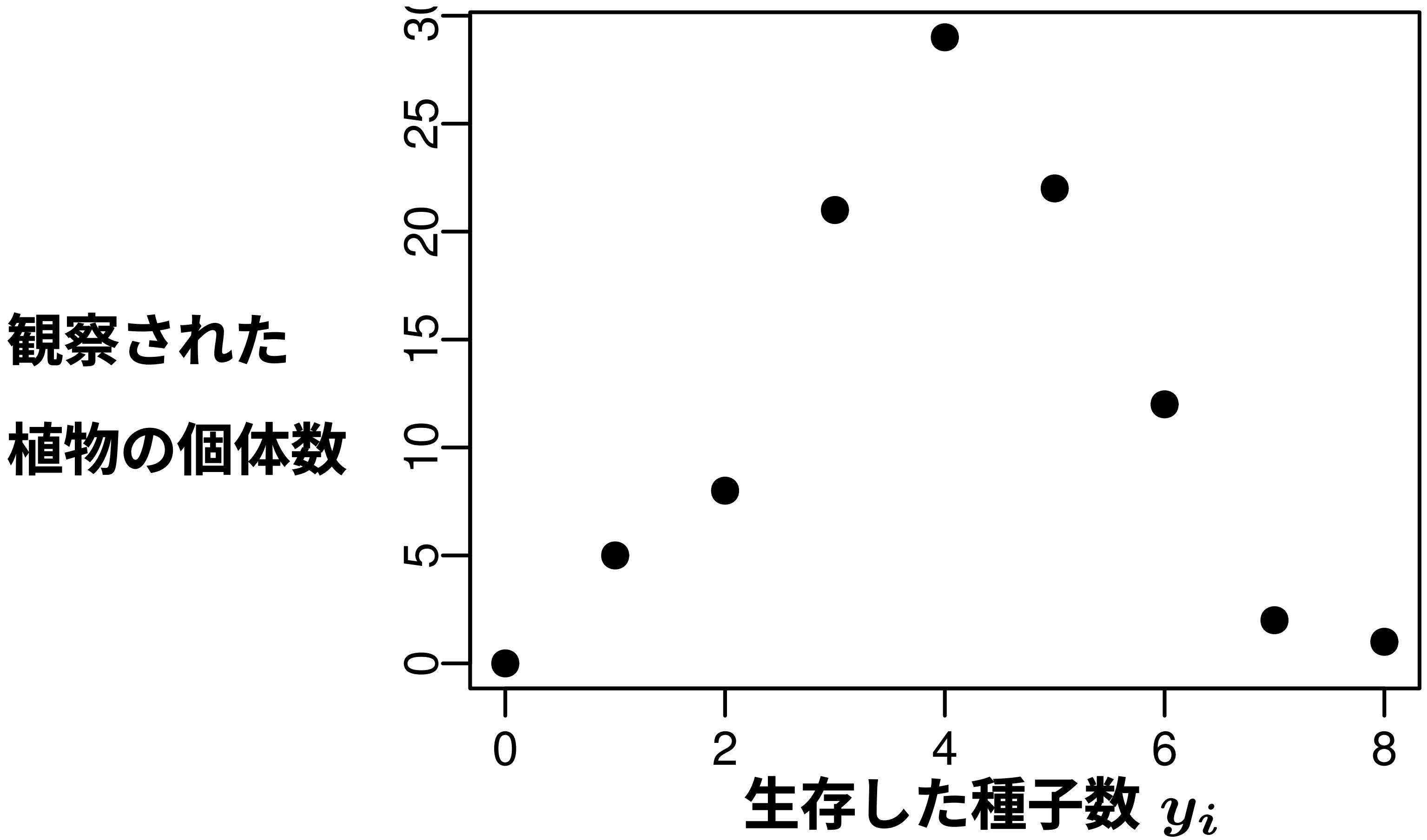
- 架空植物の種子の生存を調べた
- **種子**: 生きていれば発芽する
  - どの個体でも **8 個** の種子を調べた
- **生存確率**: ある種子が生きている確率



- データ: 植物 100 個体，合計 800 種子の生存の有無を調べた
- 問: この植物の生存確率はどのように統計モデル化できるか?

簡単な例題: 生存確率は全個体で同じ (「個体差」なし)

個体ごとの生存数	0	1	2	3	4	5	6	7	8
観察された個体数	0	5	8	21	29	22	12	2	1



生存確率 q と二項分布の関係

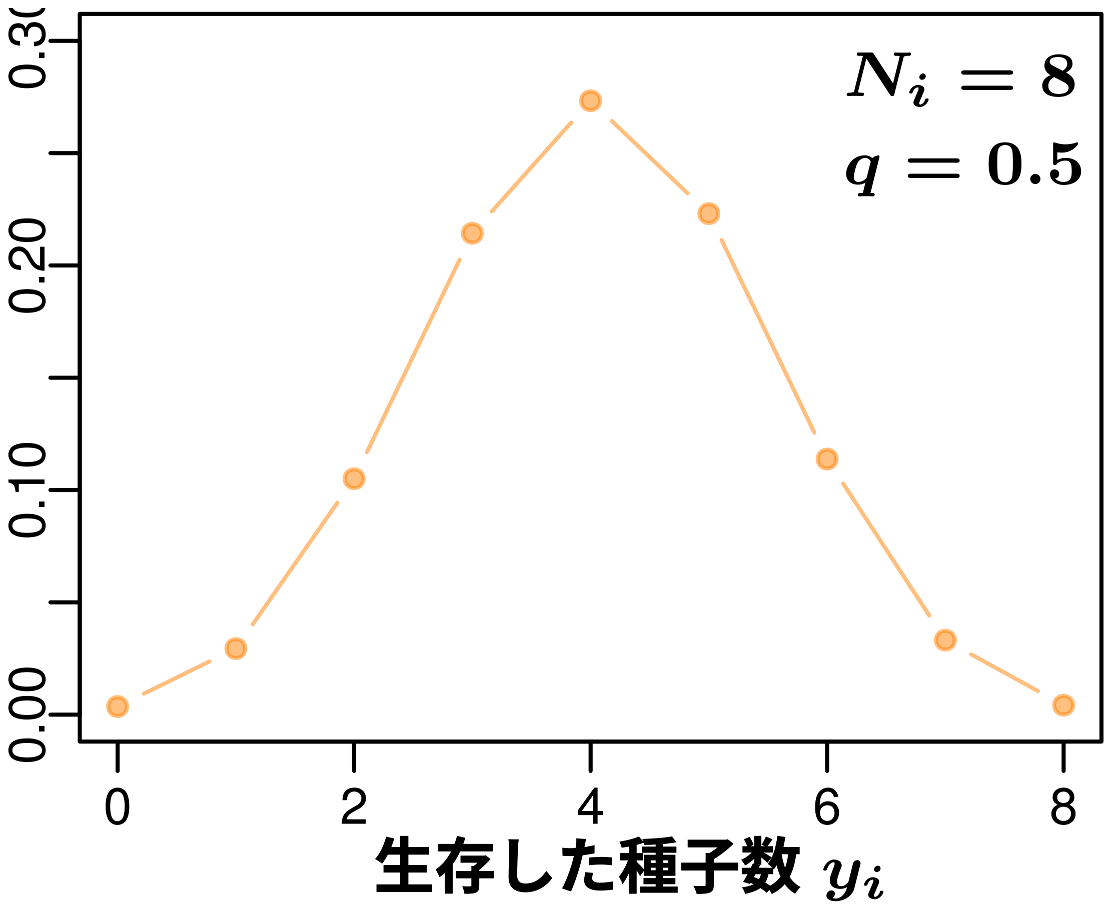
- 生存確率を推定するために二項分布という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率は二項分布

$$f(y_i \mid q) = \binom{N_i}{y_i} q^{y_i} (1-q)^{N_i - y_i},$$

- ここで仮定していること
  - 個体差はない
  - つまり すべての個体で同じ生存確率 q

二項分布で「N_i 個中の y_i 個」型データをあつかう

$$f(y_i \mid q) = \binom{N_i}{y_i} q^{y_i} (1-q)^{N_i - y_i},$$



尤度(ゆうど): 100 個体ぶんのデータが観察される確率

- 観察データ $\{y_i\}$ が与えられたもので，パラメータ q は値が自由にとりうると考える
- この 100 個体ぶんの確率はパラメータ q の関数として定義される

$$L(q|\text{全}\,y_i) = \prod_{i=1}^{100} f(y_i \mid q)$$

個体ごとの生存数	0	1	2	3	4	5	6	7	8
観察された個体数	0	5	8	21	29	22	12	2	1

対数尤度方程式と最尤推定

- この尤度 $L(q \mid \text{データ})$ を最大化するパラメータの推定量 $\hat{q}$ を計算したい
- 尤度を対数尤度になおすと

$$\log L(q \mid \text{データ}) = \sum_{i=1}^{100} \log \binom{N_i}{y_i}$$

$$+ \sum_{i=1}^{100} \{y_i \log(q) + (N_i - y_i) \log(1 - q)\}$$

- この対数尤度を最大化するように未知パラメーター q の値を決めてやるのが**最尤推定**

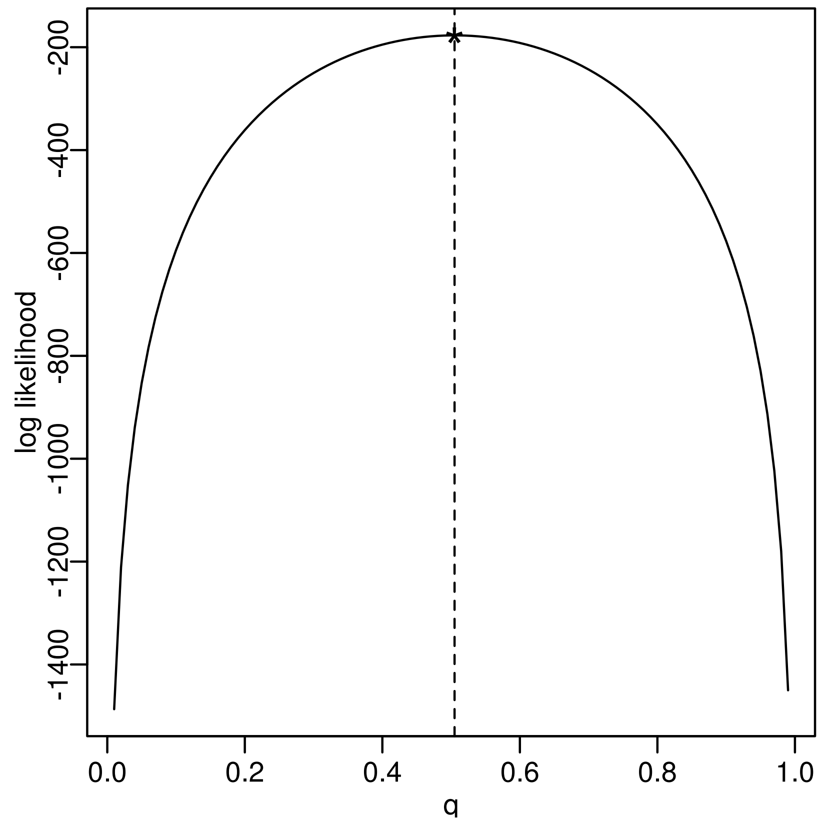
最尤推定とは何か

- 対数尤度 $L(q \mid \text{データ})$ が最大になるパラメーター q の値をさがしだすこと
- 対数尤度 $\log L(q \mid \text{データ})$ を q で偏微分して 0 となる $\hat{q}$ が対数尤度最大

$$\partial \log L(q \mid \text{データ})/\partial q = 0$$

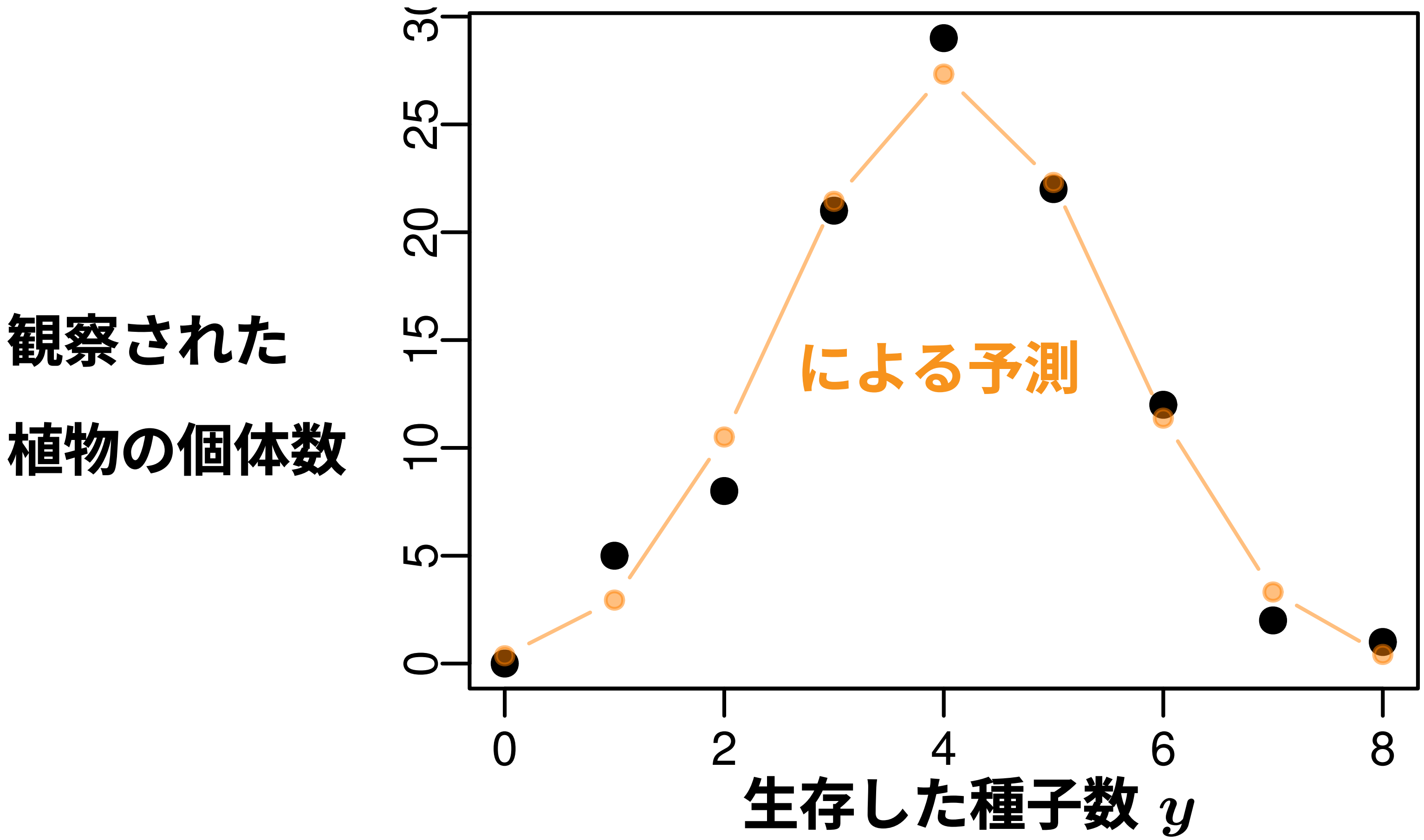
- 生存確率 q が全個体共通の場合の最尤推定量・最尤推定値は

$$\hat{q} = \frac{\text{生存種子数}}{\text{調査種子数}} = \frac{404}{800} = 0.505$$

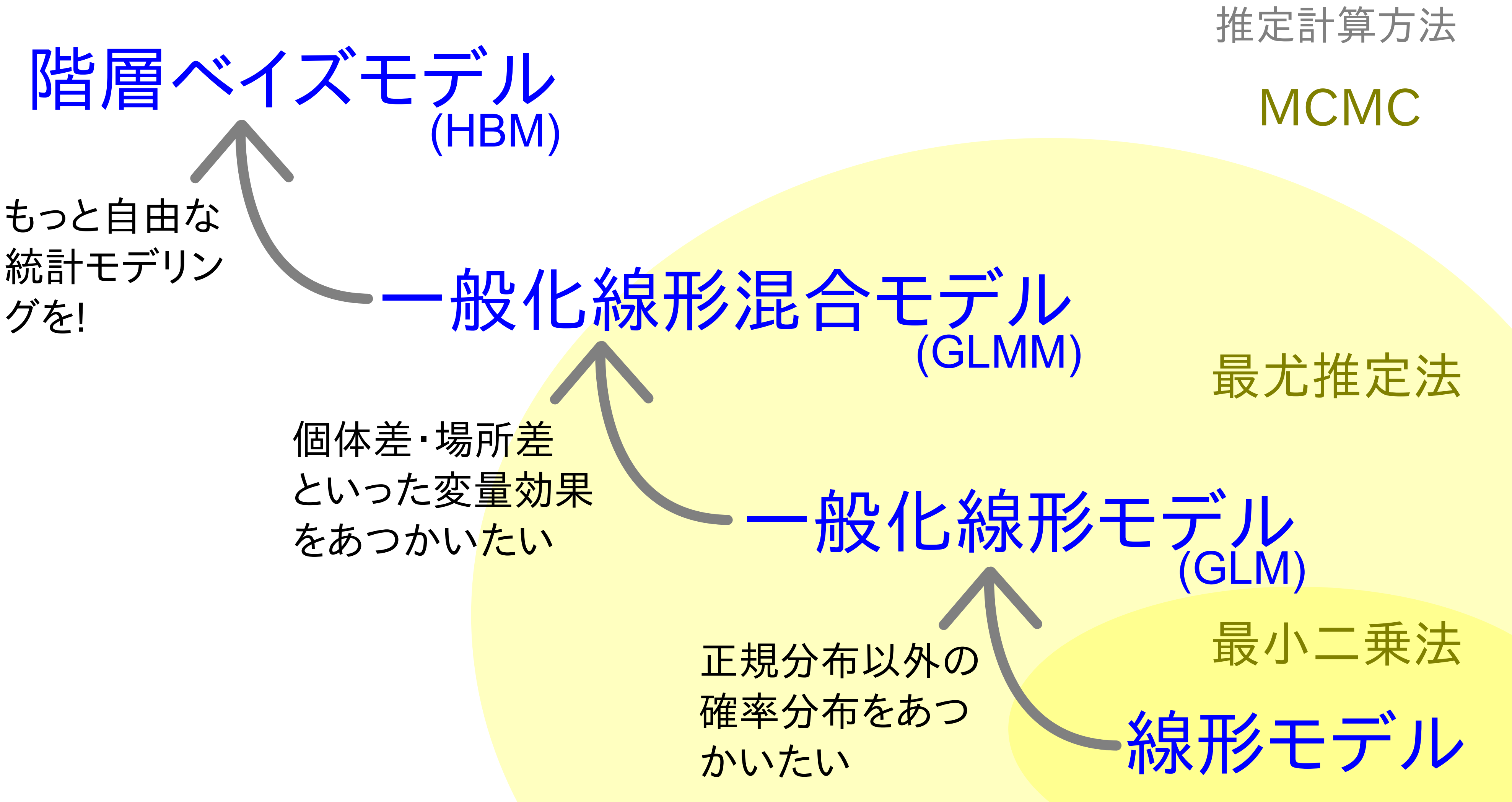


二項分布で説明された 8 種子中 y_i 個の生存

$$\hat{q} = 0.505 \text{ なので } \binom{8}{y} 0.505^{y} 0.495^{8-y}$$

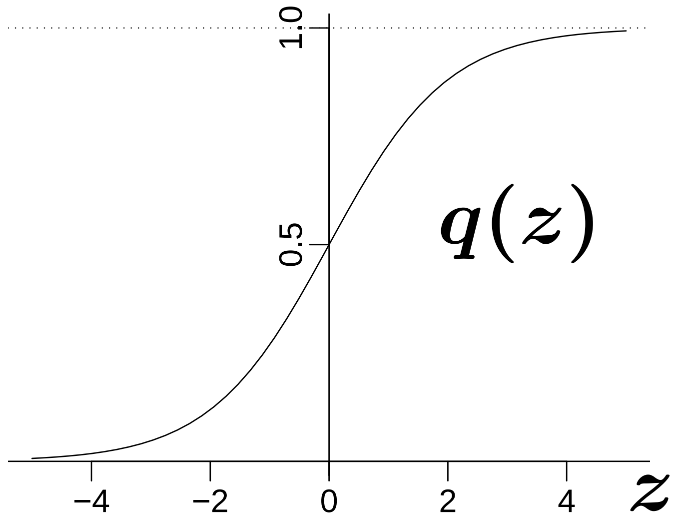


線形モデルの発展


推定計算方法
階層ベイズモデル
(HBM)
MCMC
もっと自由な
統計モデリン
グを!
一般化線形混合モデル
(GLMM)
最尤推定法
個体差・場所差
といった変量効果
をあつかいたい
一般化線形モデル
(GLM)
最小二乗法
正規分布以外の
確率分布をあつ
かいたい
線形モデル

ロジスティック関数で表現する生存確率

- そこで生存する確率 $q_i = q(z_i)$ をロジスティック (logistic) 関数 $q(z) = 1/\{1 + \exp(-z)\}$ で表現



- 線形予測子 $z_i = a$ (切片だけ) とする

ちょっと整理: logistic と logit

- logistic 関数

$$q = \frac{1}{1 + \exp(-(a + bx))} = \text{logistic}(a + bx)$$

- logit 変換

$$\text{logit}(q) = \log \frac{q}{1 - q} = a + bx$$

logit は logistic の逆関数, logistic は logit の逆関数

R の glm() によるロジスティック回帰

```
> glm(cbind(y, 8 - y) ~ 1, family = binomial, data = d1)
...(一部略)...
Coefficients:
(Intercept)
       0.02

Degrees of Freedom: 99 Total (i.e. Null);  99 Residual
Null Deviance:      110
Residual Deviance: 110  AIC: 356

> 1 / (1 + exp(-0.02))
[1] 0.505
```

ロジスティック回帰の `glm()` 指定

- `family`: `binomial`, 二項分布
- `link` 関数: `"logit"`
- **モデル式** (線形予測子 z): たとえば `y ~ x` と指定
  - **線形予測子** $z = a + bx$

    a, b は推定すべきパラメーター
  - **事象の生起確率** を q とすると $\mathrm{logit}(q) = z$

    つまり $q = \dfrac{1}{\exp(-z)} = \dfrac{1}{1 + \exp(-(a + bx))}$
  - **応答変数** は確率 q でサイズ N の二項分布に従う:

    $y \sim \mathrm{Binom}(q, N)$

より現実的で複雑な統計モデルの

パラメーター推定のため

最尤推定ではなく MCMC で生存確率 q を推定する — パラメーター q の確率分布?

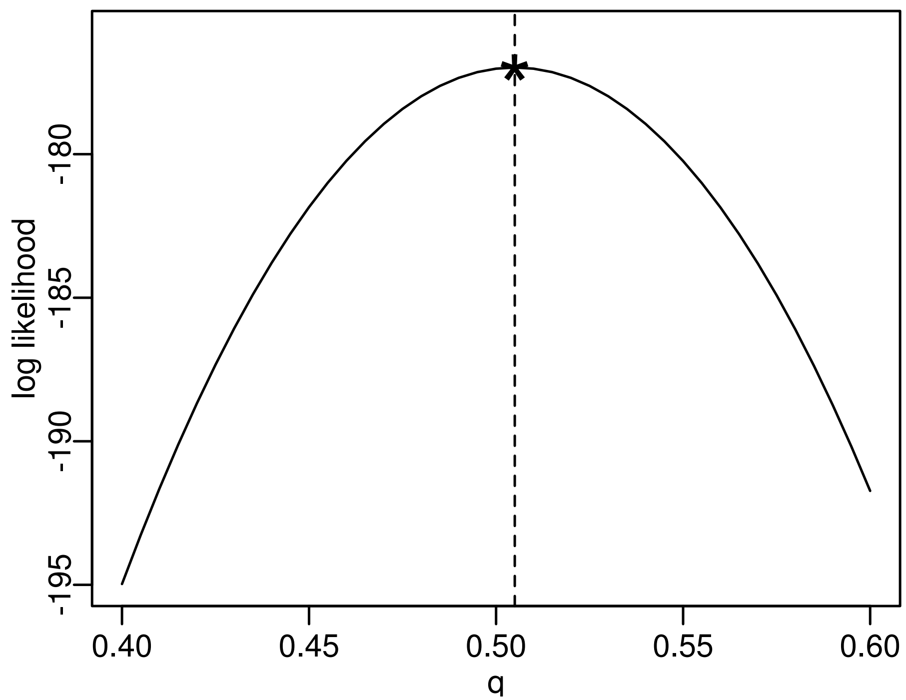
ここでやること: 尤度と MCMC の関係を考える

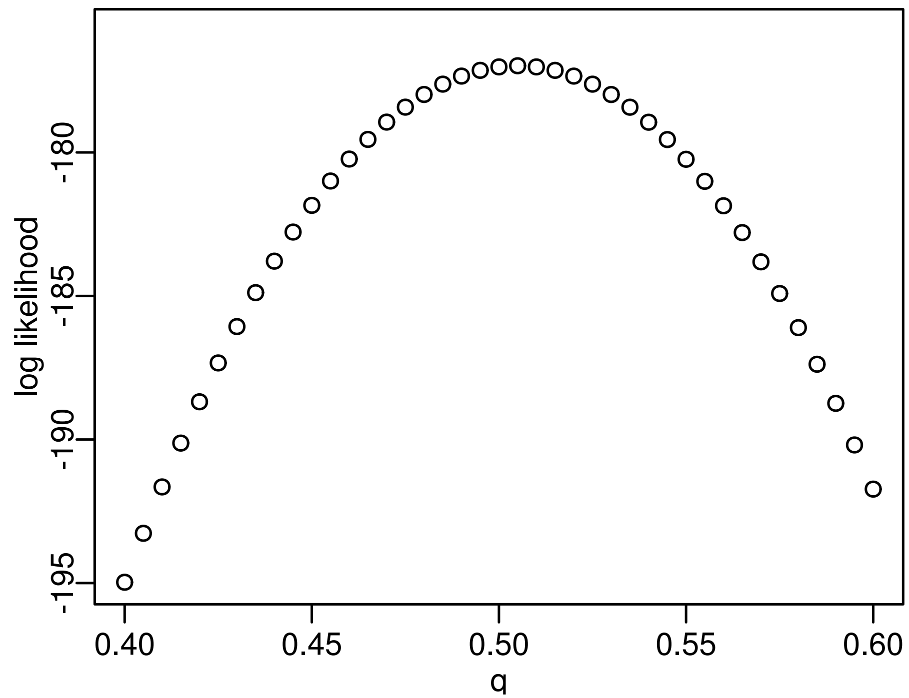
- さきほどの簡単な例題 (生存確率) のデータ解析を
- 最尤推定ではなく
- 試行錯誤な MCMC 法である**メトロポリス** 法であつかう
- 得られる結果: パラメーターの分布?

あえて MCMC をもちださなくてもいい問題に関して
メトロポリス法を適用してみて，
その挙動だの得られる結果だのをながめてみる

数値的に試行錯誤するパラメーター推定

連続的な対数尤度関数 $\log L(q)$ → **離散化: q がとびとびの値をとる**

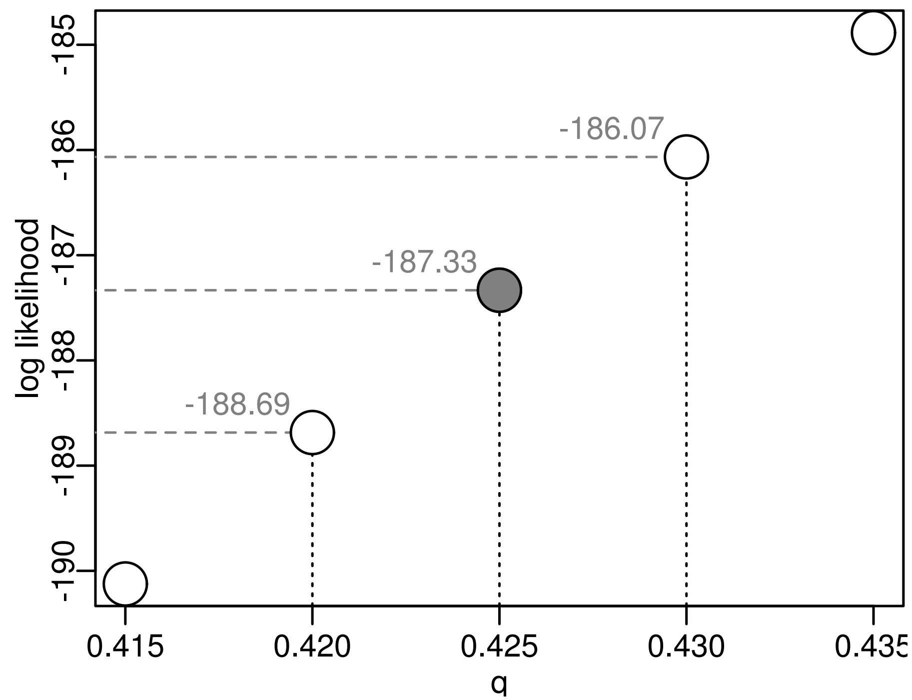


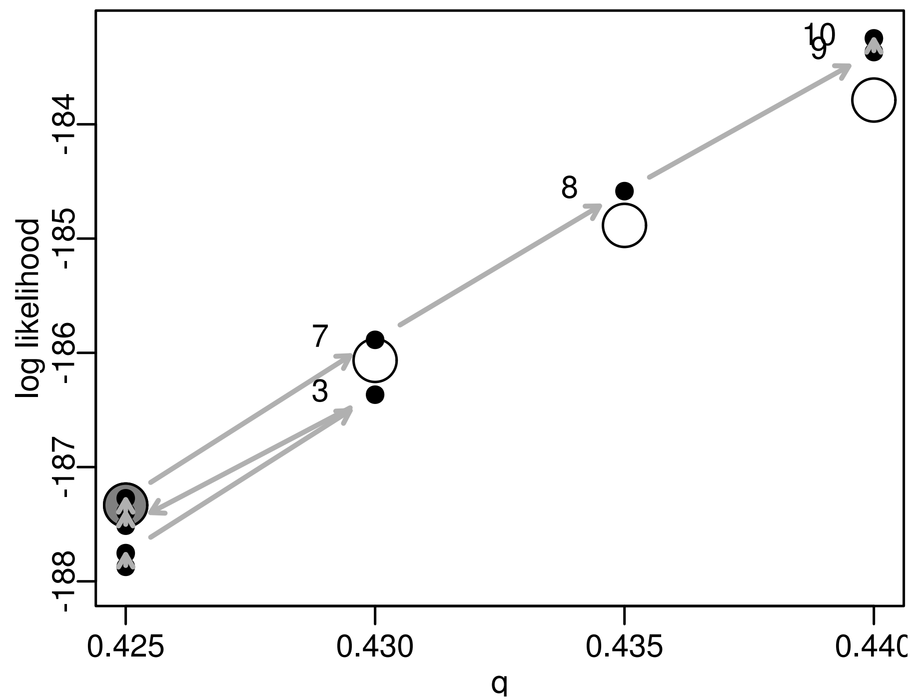


(簡単のため，生存確率 q の軸を離散化する)

メトロポリス法で q を変化させていく

メトロポリス法は MCMC アルゴリズムのひとつ (cf. **伊庭さんの解説**)





(q の初期値を 0.425，ランダムウォークで移動先を選ぶ)

(補足) この例題のメトロポリス法

1. パラメーター q の初期値を選ぶ

   (ここでは q の初期値が 0.425)

2. q を増やすか減らすかをランダムに決める

   (新しく選んだ q の値を $q_{新}$ としましょう)

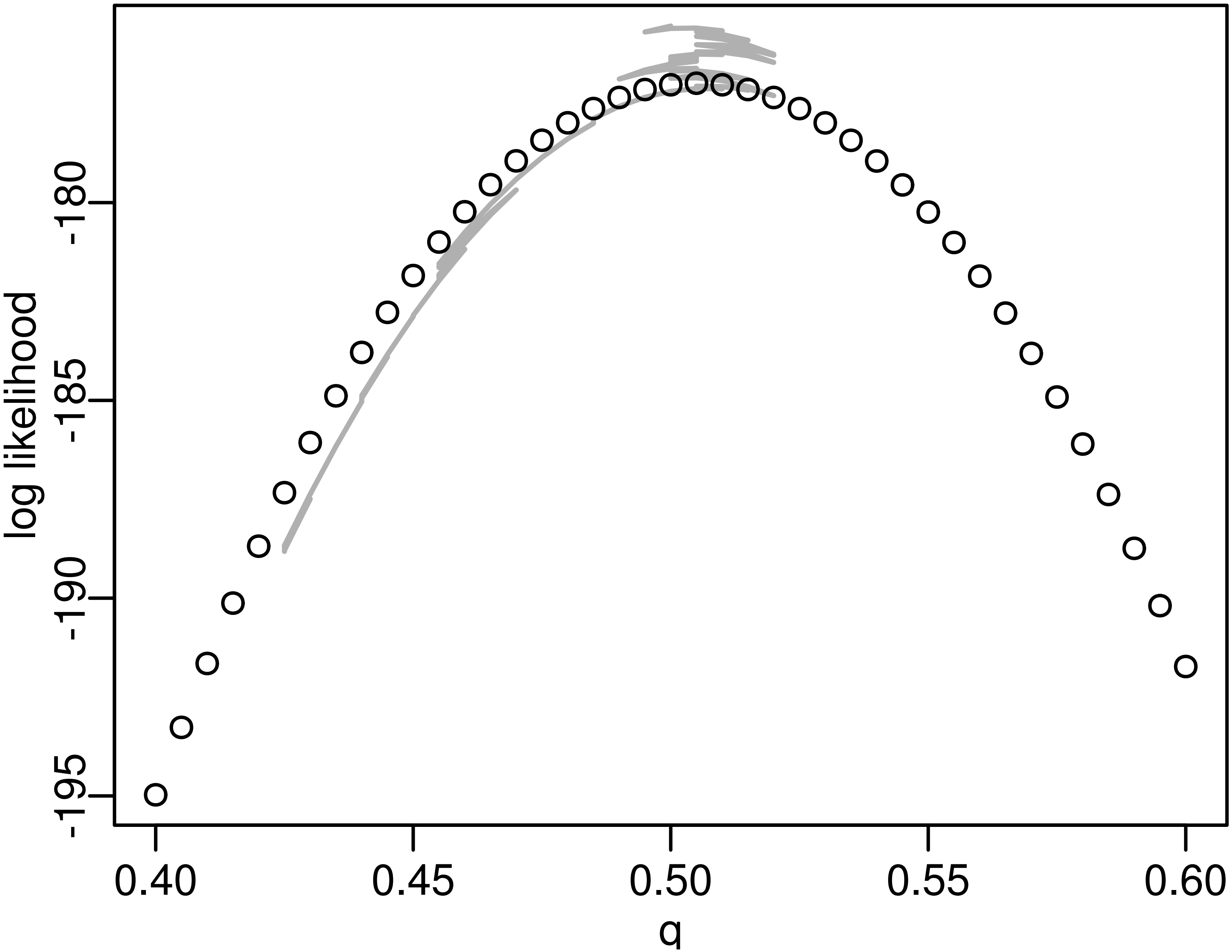
3. $q_{新}$ における尤度 $L(q_{新})$ ともとの尤度 $L(q)$ を比較

   - $L(q_{新}) \geq L(q)$ (あてはまり改善): $q \leftarrow q_{新}$
   - $L(q_{新}) < L(q)$ (あてはまり改悪):
     - 確率 $r = L(q_{新})/L(q)$ で $q \leftarrow q_{新}$
     - 確率 $1 - r$ で q を変更しない

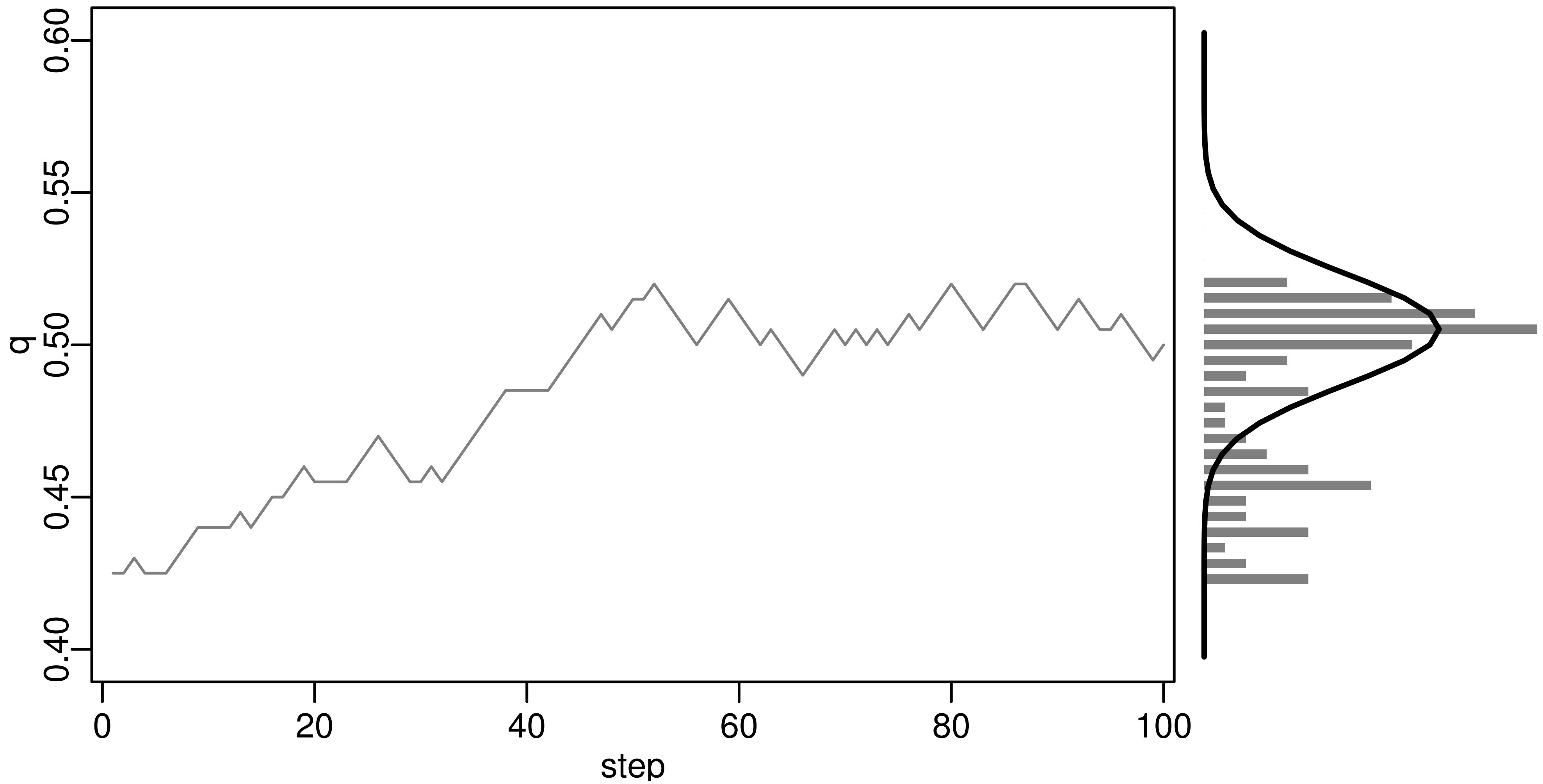
4. 手順 2. にもどる

   ($q = 0.01$ や $q = 0.99$ でどうなるんだ，といった問題は省略)

対数尤度関数上での生存確率 q の変化

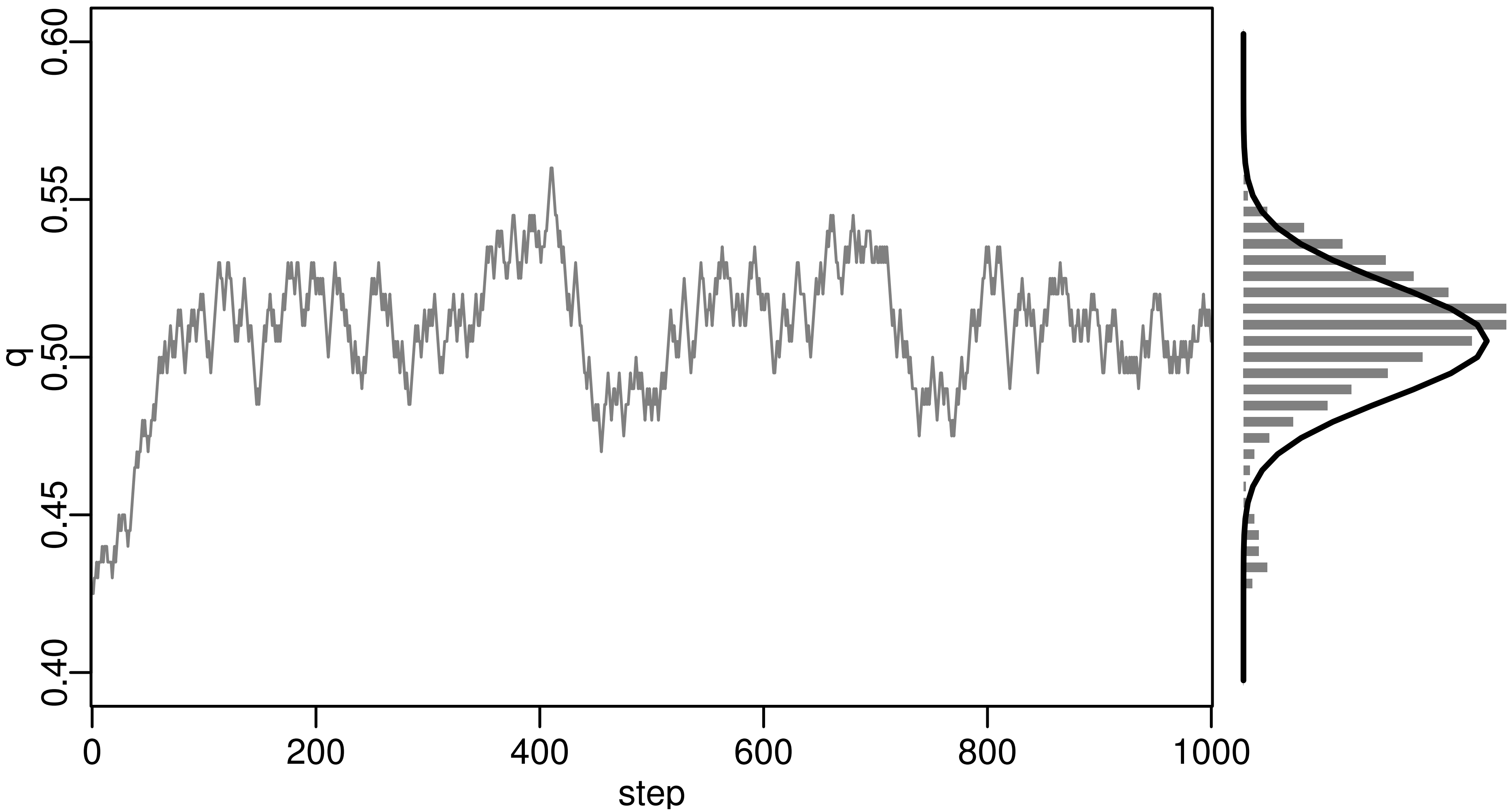


MCMC ステップにそった q の変化



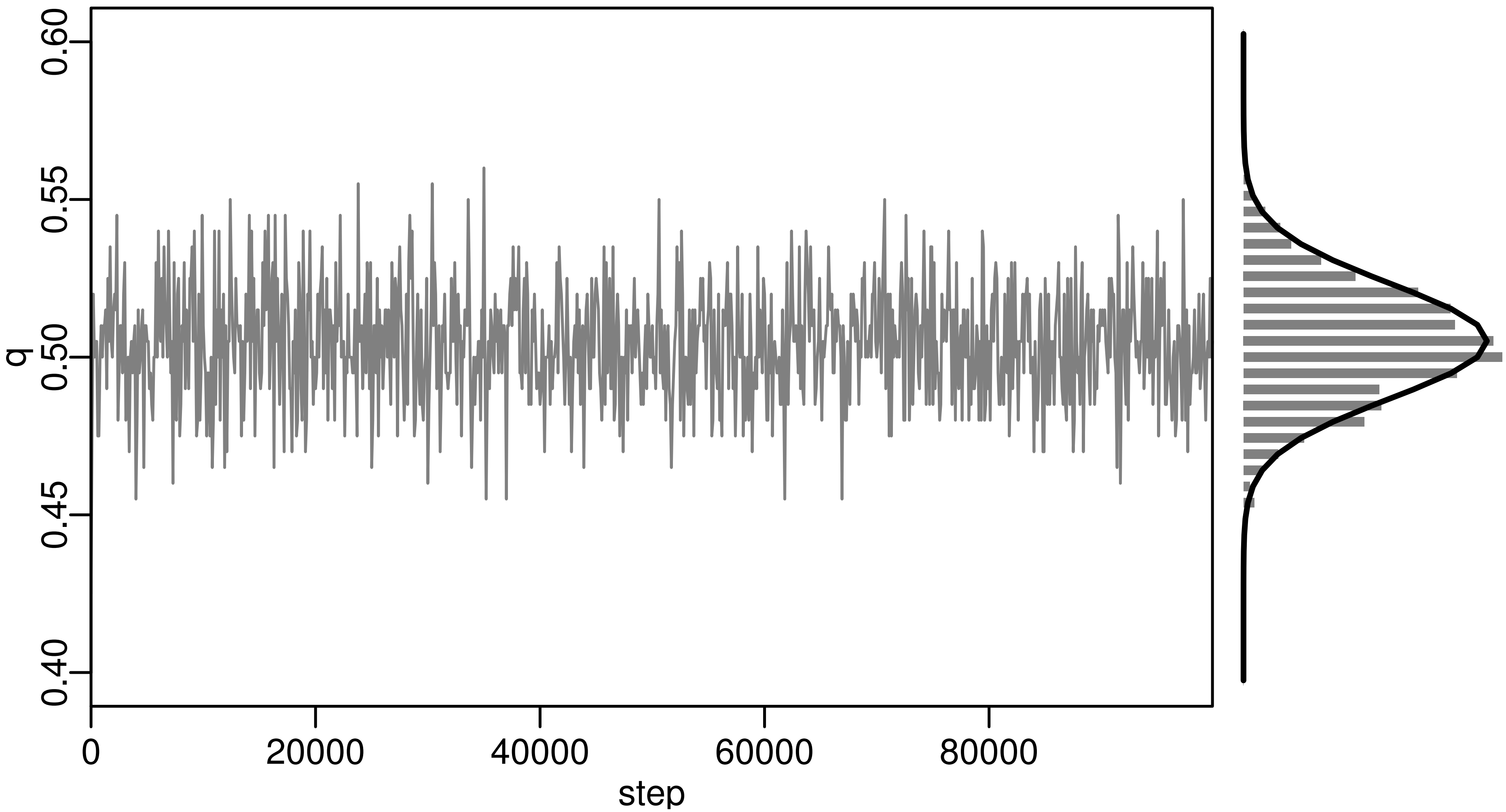
右側は q のヒストグラム

もっと長くサンプリングしてみる



まだまだ……?

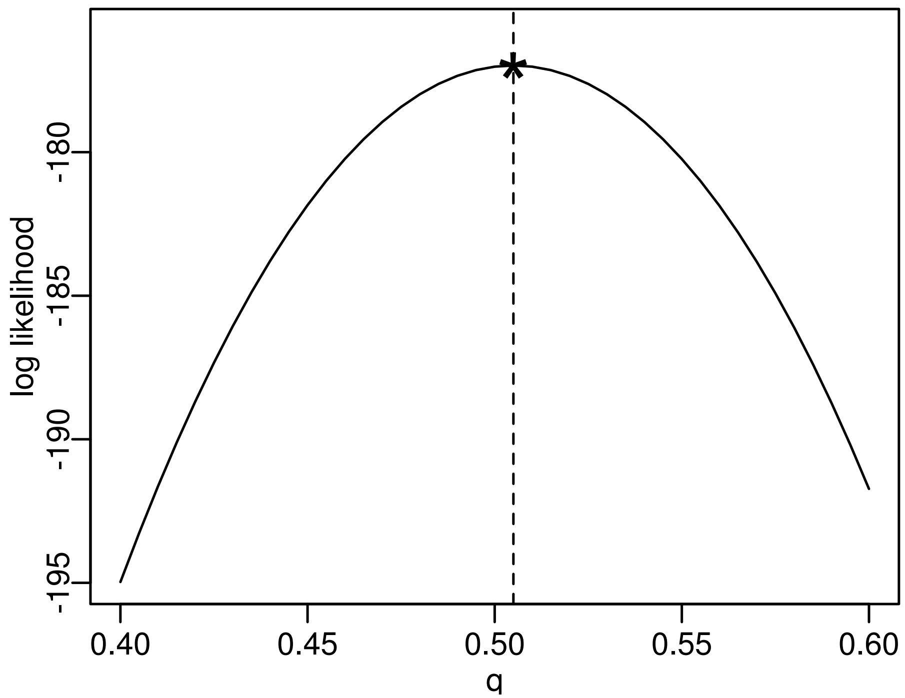
もっともっと長くサンプリングしてみる



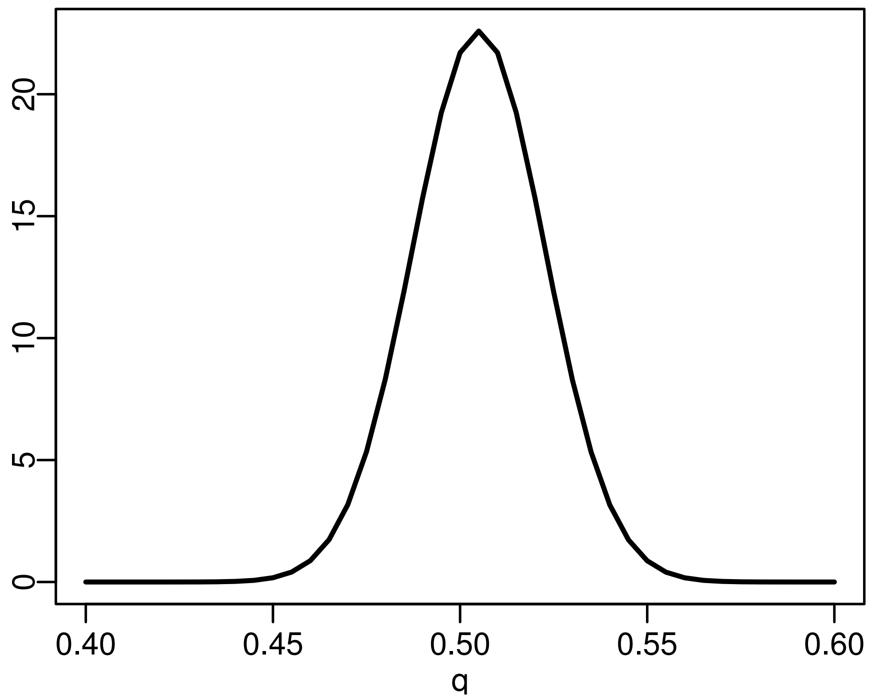
ターゲットとなる「パラメーターの分布」に近づいてきた

MCMC は何を**サンプリング**している?

既出の対数尤度 $\log L(q)$



尤度 $L(q)$ に比例する確率分布

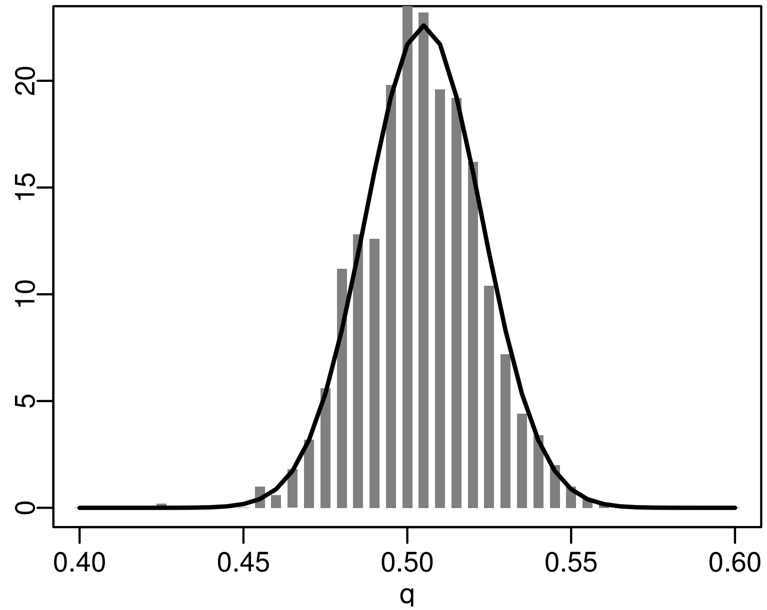


尤度に比例する確率分布からのランダムサンプル

(「パラメーターの分布」と仮称)

「マルコフ連鎖の収束定理」のおかげ (cf. 伊庭さんの説明)

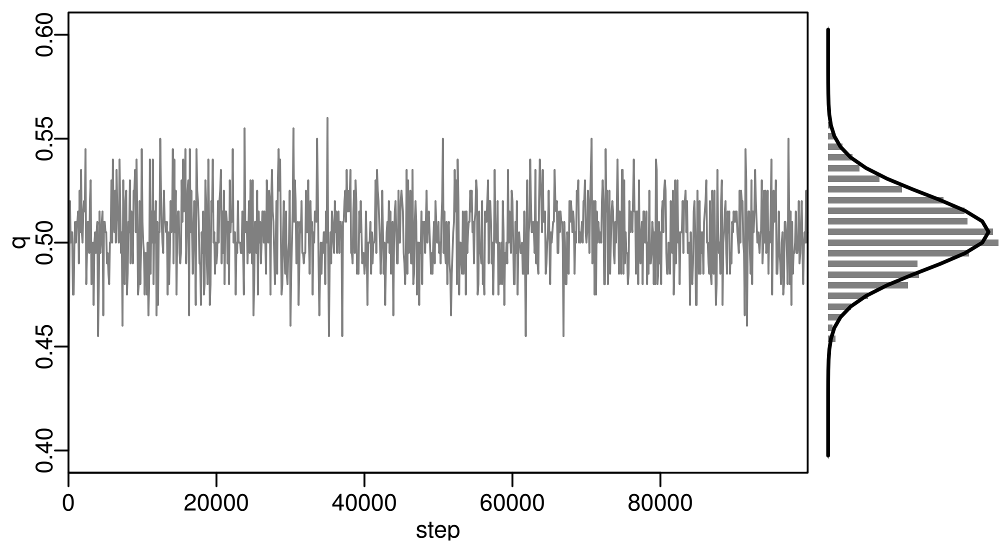
MCMC の結果として得られた「q の分布」



- データからえられる推定結果としては有用: 分布の平均や区間推定など
- 「パラメーターの分布」 …… ベイズ統計でいうところの事後分布

いったん整理: 尤度と MCMC の関係

- 統計モデルを作ると，あるデータのもとでの**尤度**が定義される
- この尤度に対して MCMC すると「尤度に比例する**パラメーターの分布**」からのランダムサンプルがえられる
- ベイズとの関連: これは**事後分布**からのサンプリングである



いったん整理: いろいろな MCMC の方法

- メトロポリス法: 試行錯誤で値を変化させていく MCMC
  - メトロポリス・ヘイスティングス法: その改良版
- ギブス・サンプラー: 条件つき確率分布を使った MCMC
  - 普通は複数の変数 (パラメーター・状態) のサンプリングのためにもちいる (あとでこの例題にそった簡単な説明)

- メトロポリス法で説明したけれどギブス・サンプラーでも同じことが言える
- ここからあとで登場する MCMC はギブス・サンプラーと考えてください

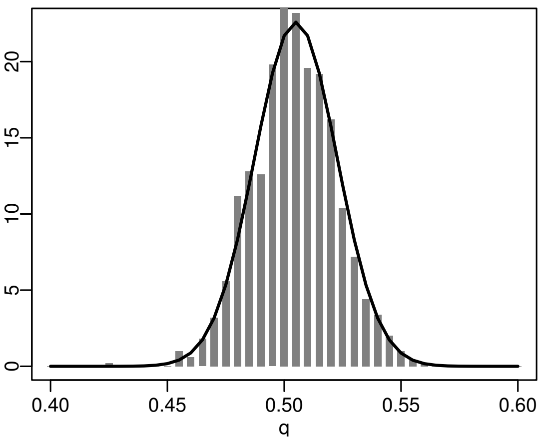
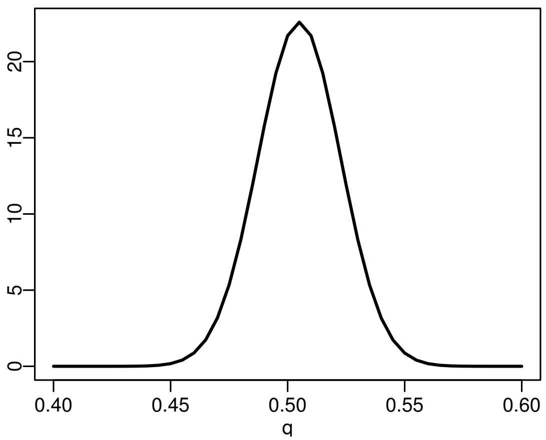
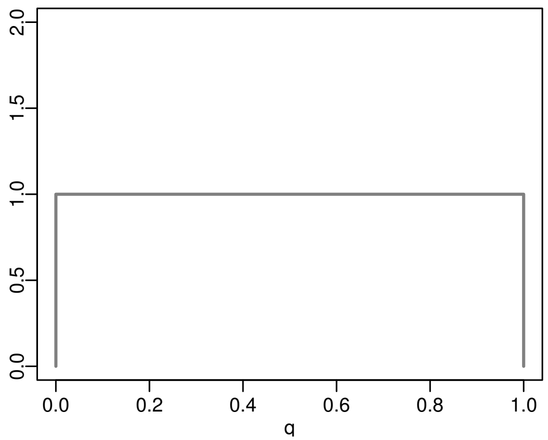
ベイズモデル: 尤度・事後分布・事前分布……

- ベイズの公式 $$p(q \mid \mathrm{Y}) = \frac{p(\mathrm{Y} \mid q) \times p(q)}{p(\mathrm{Y})}$$
- $p(q \mid \mathrm{Y})$ は何かデータ (Y) のもとで何かパラメーター (q) が得られる確率 (事後分布)
- $p(q)$ はあるパラメーター q が得られる確率 (事前分布)
- $p(\mathrm{Y} \mid q)$ パラメーターを決めたときにデータが得られる確率 (尤度に比例)
- $p(\mathrm{Y})$ はデータ Y が得られる確率 (単なる規格化定数)

$$\begin{aligned}(\text{事後分布}) &\propto \frac{\text{尤度} \times \text{事前分布}}{(\text{データが得られる確率})} \\ &\propto \text{尤度} \times \text{事前分布}\end{aligned}$$

現在の例題で仮定している事前分布

q の事前分布は一様分布，と考えるとつじつまがあう?

q の事後分布 (posterior)		q の尤度 (likelihood)		q の事前分布 (prior)
	$\propto$		$\times$	

このように「q はどんな値でもいいんですよ」という気分を表現するための事前分布が**無情報事前分布** (non-informative prior)

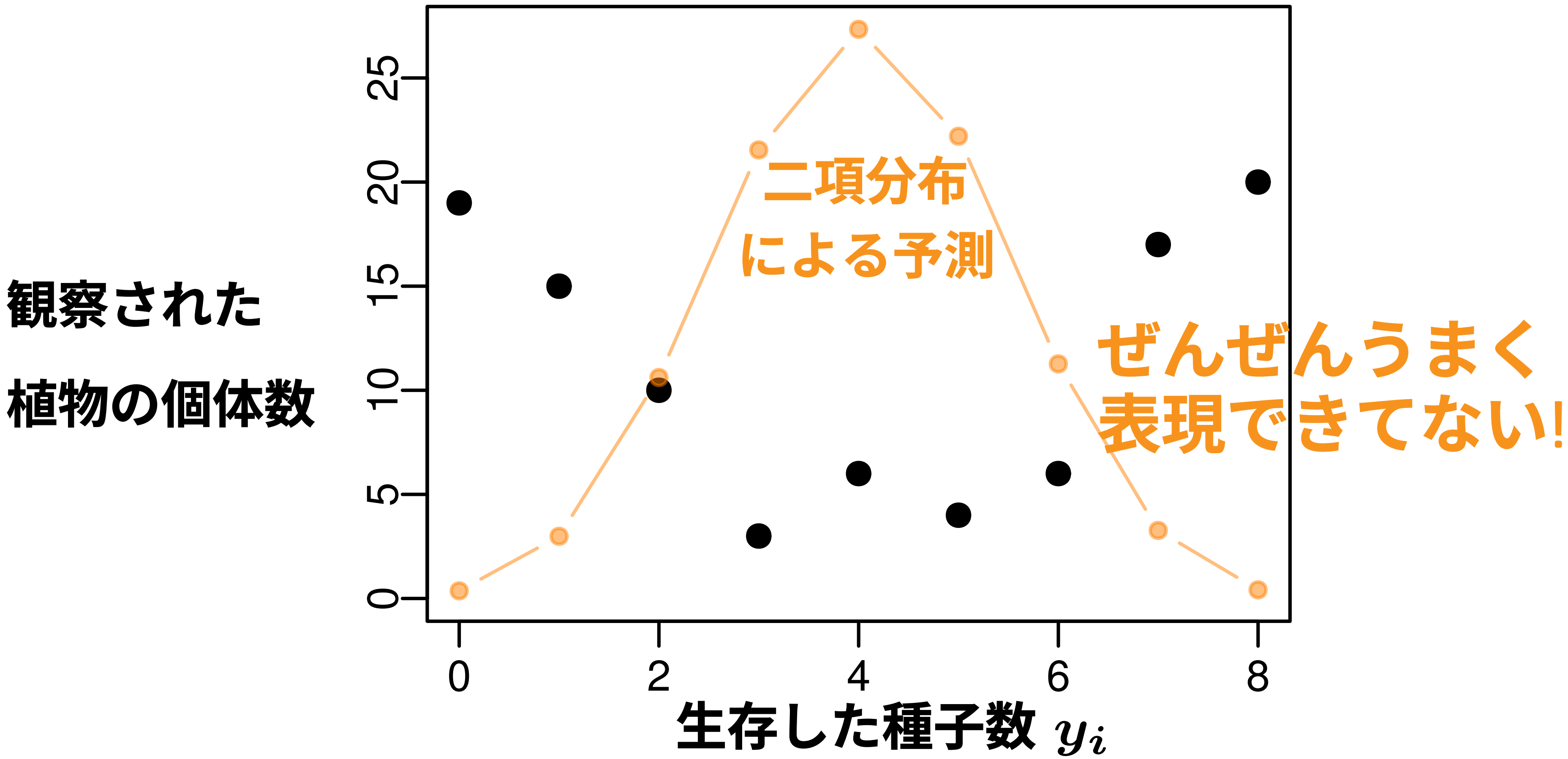
ちょっと難しい例題:

個体差が大きくて GLM がうまくいかない

階層ベイズモデルが必要になる状況

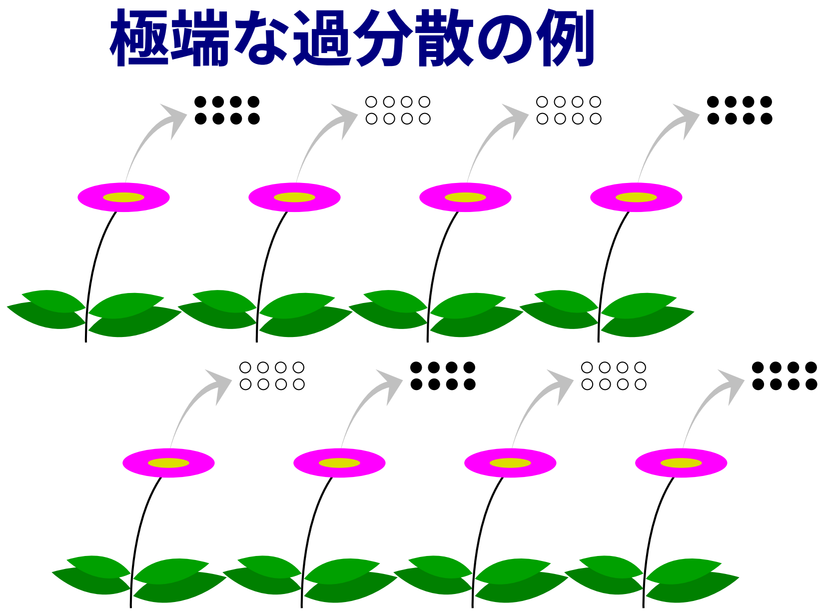
また別の観測データ: 二項分布だめだめ?!

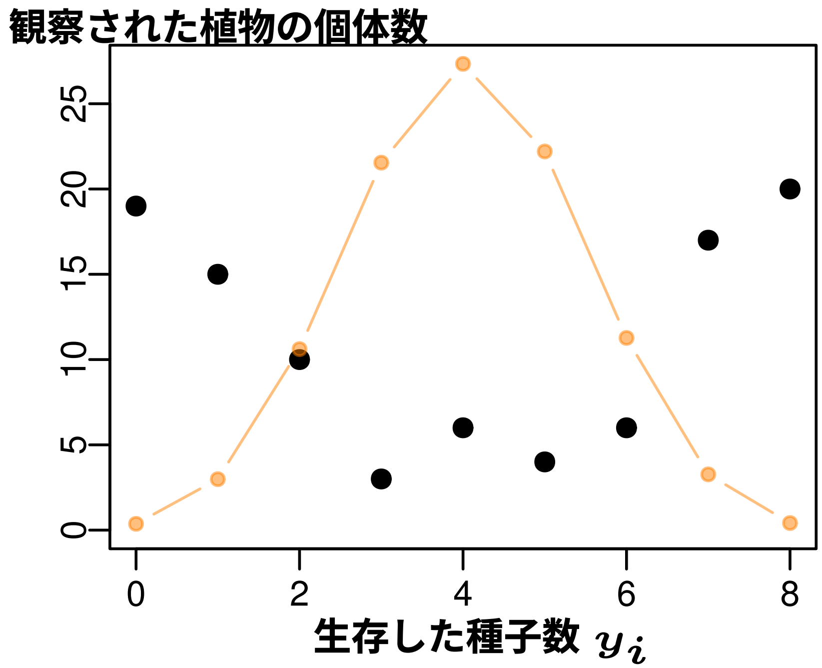
100 個体の植物の合計 800 種子中 **403 個**の生存が見られたので，平均生存確率は 0.50 と推定されたが……



さっきの例題と同じようなデータなのに?

「個体差」 → 過分散 (overdispersion)





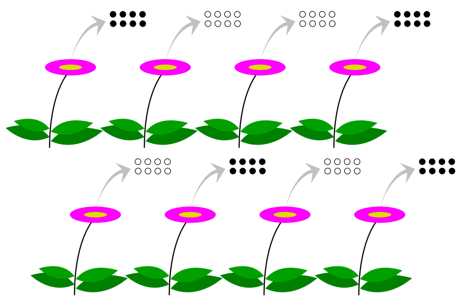
- 種子全体の平均生存確率は 0.5 ぐらいかもしれないが……
- 植物個体ごとに種子の生存確率が異なる: **「個体差」**
- 「個体差」があると overdispersion が生じる
- 「個体差」の原因: ?

あのー ……「個体差」とは?

- 生物学的には明確な定義はない
- しかしデータ解析においては人間が主観的に「これは個体差由来の効果であり，観察されたパターンに影響している」と定義，そして以下の二種類を区別する:
  1. fixed effects 的な効果
  2. random effects 的な効果
     - これって何なの?

「個体差」の fixed だの random だの …… って何?

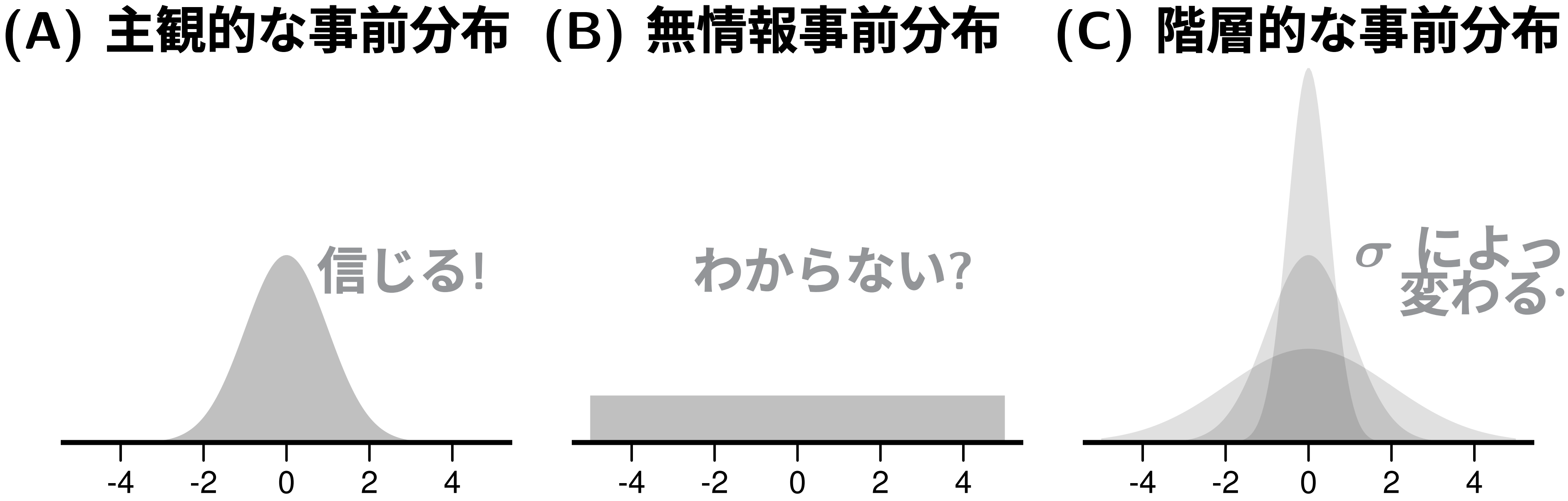
- 「個体ごとに異なる何かに由来する効果」を fixed/random effects にわけて統計モデリングする:
  1. fixed effects 的な効果: 観測者がわざわざ設定・測定した要因 (実験処理，植物のサイズなど)，logit 変換された世界において生存確率の「効果の大きさ」を変える
     - この例題では fixed effects 的な要因なし
  2. random effects 的な効果: fixed effects 的ではない要因 (観測対象個体に関連する，人間が設定・測定していないすべて)
     - logit 変換された世界において生存確率の「効果の大きさ」を変えずにばらつきだけを変えると考える



今回の例題では random effects な「個体差」だけをあつかう (説明変数なし)

やっぱりよくわからない?

パラメーターごとに設定してやる**事前分布の種類**(あとで説明するベイズ統計モデリング) にもとづいて考えたほうが，わかりやすいかも?



このパラメーターの事前分布は

どう設定するのが妥当だろうか，と検討する

ちょっとまた線形モデルのたぐいについて整理してみましょう……

線形モデルの発展

推定計算方法

階層ベイズモデル (HBM)

MCMC

もっと自由な統計モデリングを!

一般化線形混合モデル (GLMM)

最尤推定法

個体差・場所差といった変量効果をあつかいたい

一般化線形モデル (GLM)

最小二乗法

正規分布以外の確率分布をあつかいたい

線形モデル

モデリングやりなおし: まず二項分布の再検討

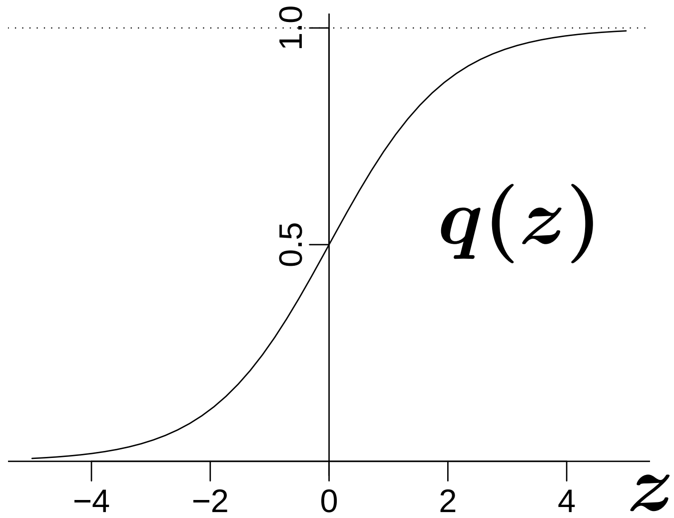
- 生存確率を推定するために **二項分布** という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率は二項分布

$$p(y_i \mid q_i) = \binom{N_i}{y_i} q_i^{y_i} (1 - q_i)^{N_i - y_i},$$

- ここで仮定していること
  - **個体差がある**
  - **個体ごとに異なる生存確率 q_i**

ロジスティック関数で表現する生存確率

- そこで生存する確率 $q_i = q(z_i)$ をロジスティック (logistic) 関数 $q(z) = 1/\{1 + \exp(-z)\}$ で表現



- 線形予測子 $z_i = a + r_i$ とする
  - パラメーター a: 全体の平均
  - パラメーター r_i: 個体 i の個体差 (ずれ)

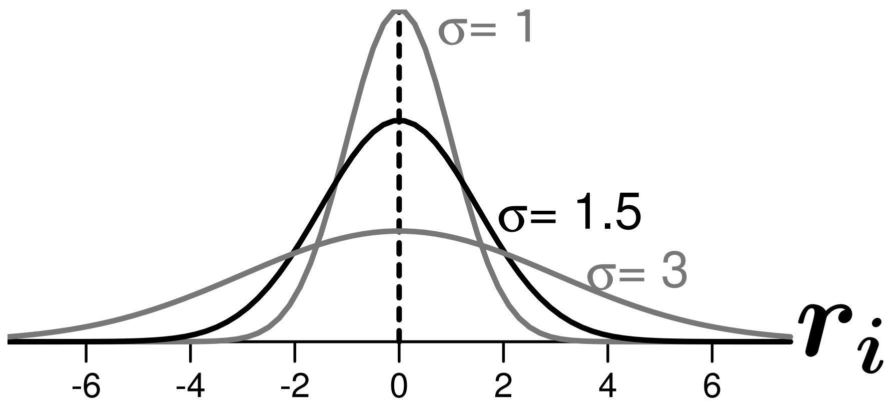
個々の個体差 r_i を最尤推定するのはまずい

- 100 個体の生存確率を推定するために**パラメーター 101 個**(a と $\{r_1, r_2, \cdots, r_{100}\}$) を推定すると……
- 個体ごとに生存数 / 種子数を計算していることと同じ! (「データのよみあげ」と同じ)
- こう仮定すると問題がうまくあつかえないだろうか?
  - 個体間の生存確率はばらつくけど，そんなにすごく異ならない?
  - 観測データを使って,「個体差」にみられるパターンを抽出したい (統計モデル化)

階層ベイズモデル化: r_i の事前分布の設計

平均ゼロで標準偏差 σ の正規分布

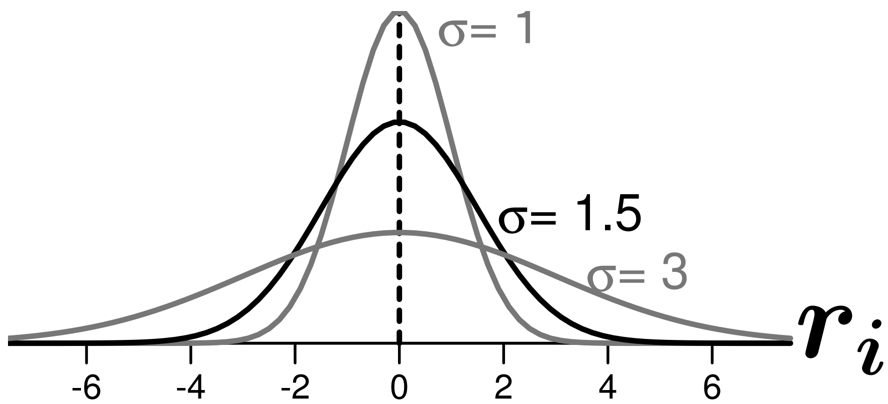
$$p_b(r_i \mid \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{-r_i^2}{2\sigma^2}\right)$$



個体差 $\{r_1, r_2, \cdots, r_{100}\}$ がこの確率分布に従うとする

r_i の事前分布は無情報事前分布ではない

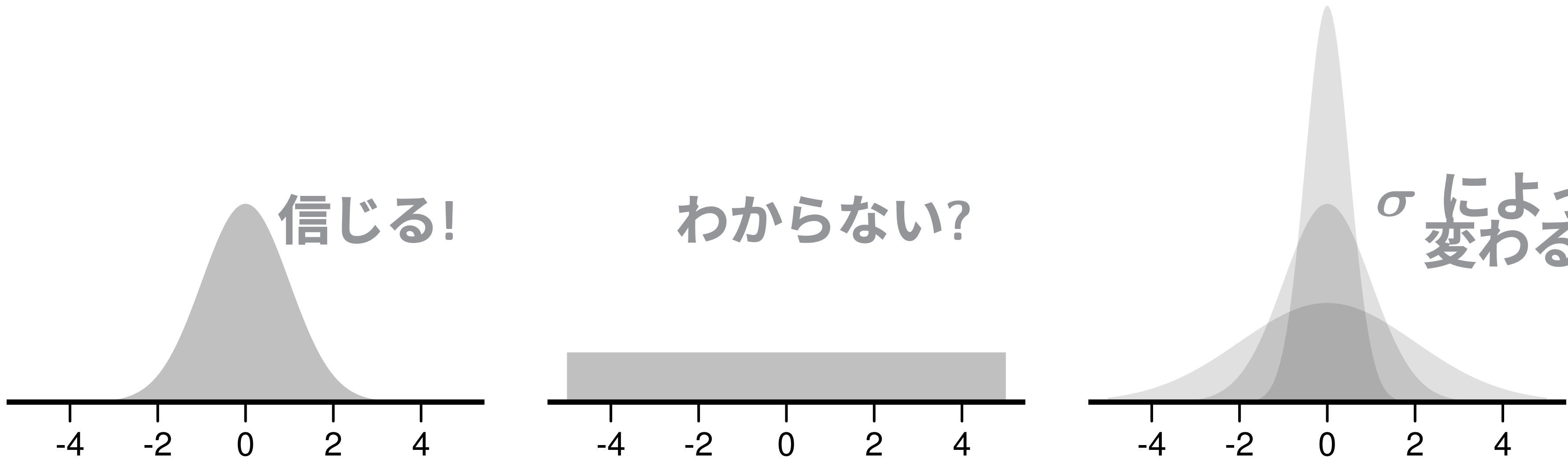
データにあわせて σ が変化する階層的な事前分布



- σ がとても小さければ個体差 r_i はどれもゼロちかくになる $\rightarrow$ 「どの個体もおたがい似ている」
- σ がとても大きければ，r_i は各個体の生存数 y_i にあわせるような値をとる

個体差 r_i の事前分布は階層的な事前分布

(A) 主観的な事前分布　(B) 無情報事前分布　(C) 階層的な事前分布

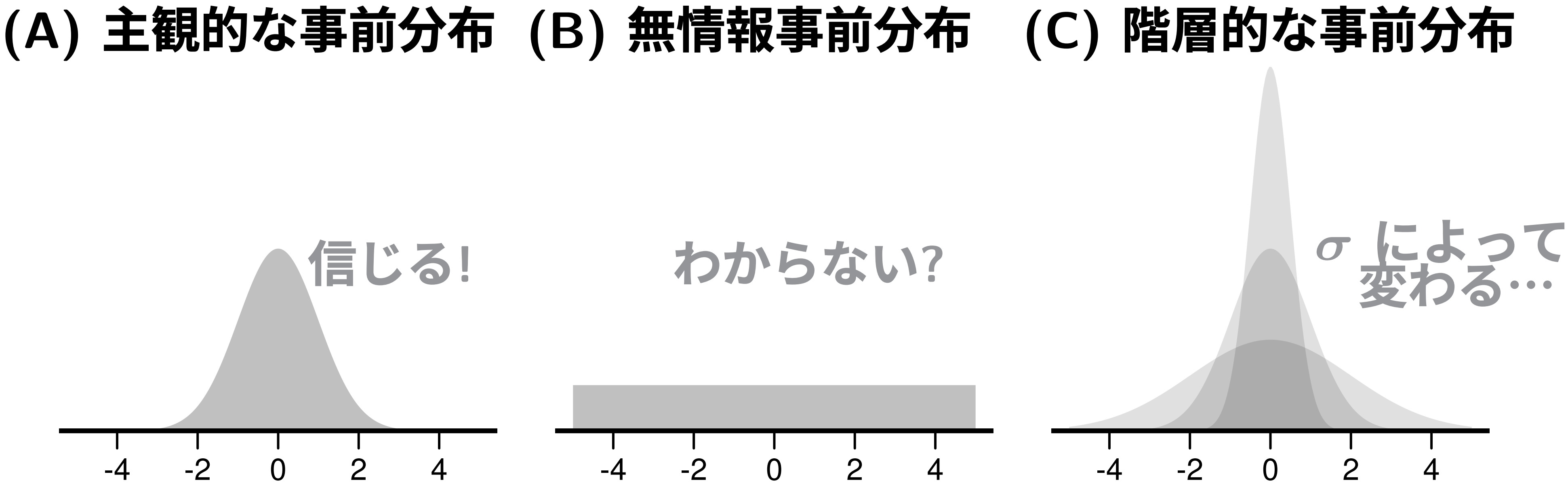


(A) 主観的な事前分布: 「自分の信じるところによれば，r_i たちはこんな分布になる」を表現している．

(B) 無情報事前分布: 「r_i たちがどんな値になるのかまったくわかりません」を表現しようとしている (しかし -5 から 5 ぐらい，という主観も表現している)．

(C) 階層的な事前分布: r_i の事前分布のパラメーター σ がいろいろな値をとる，そして σ についての超事前分布を設定する．

パラメーターごとに事前分布を選ぶ (1)

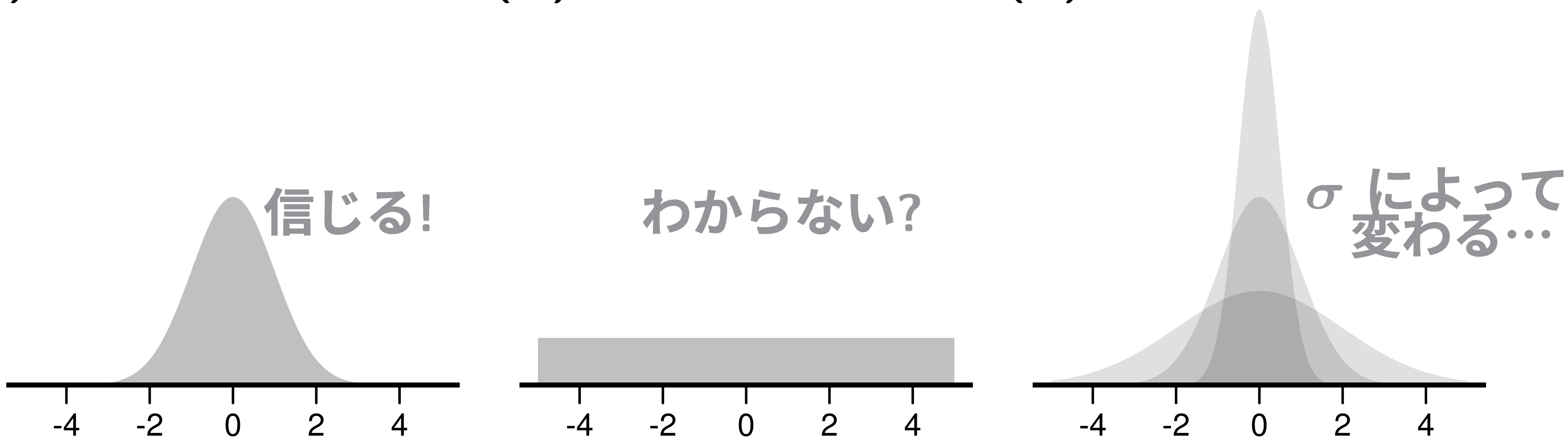


(何か植物たちの統計モデリングをやっているとすると)

- fixed effects 的な効果:
  - 無情報事前分布を設定する
  - (実験処理の効果，植物個体の大きさなど属性の効果などを) 全個体に共通する効果をひとつのパラメーターで表現しているから

パラメーターごとに事前分布を選ぶ (2)

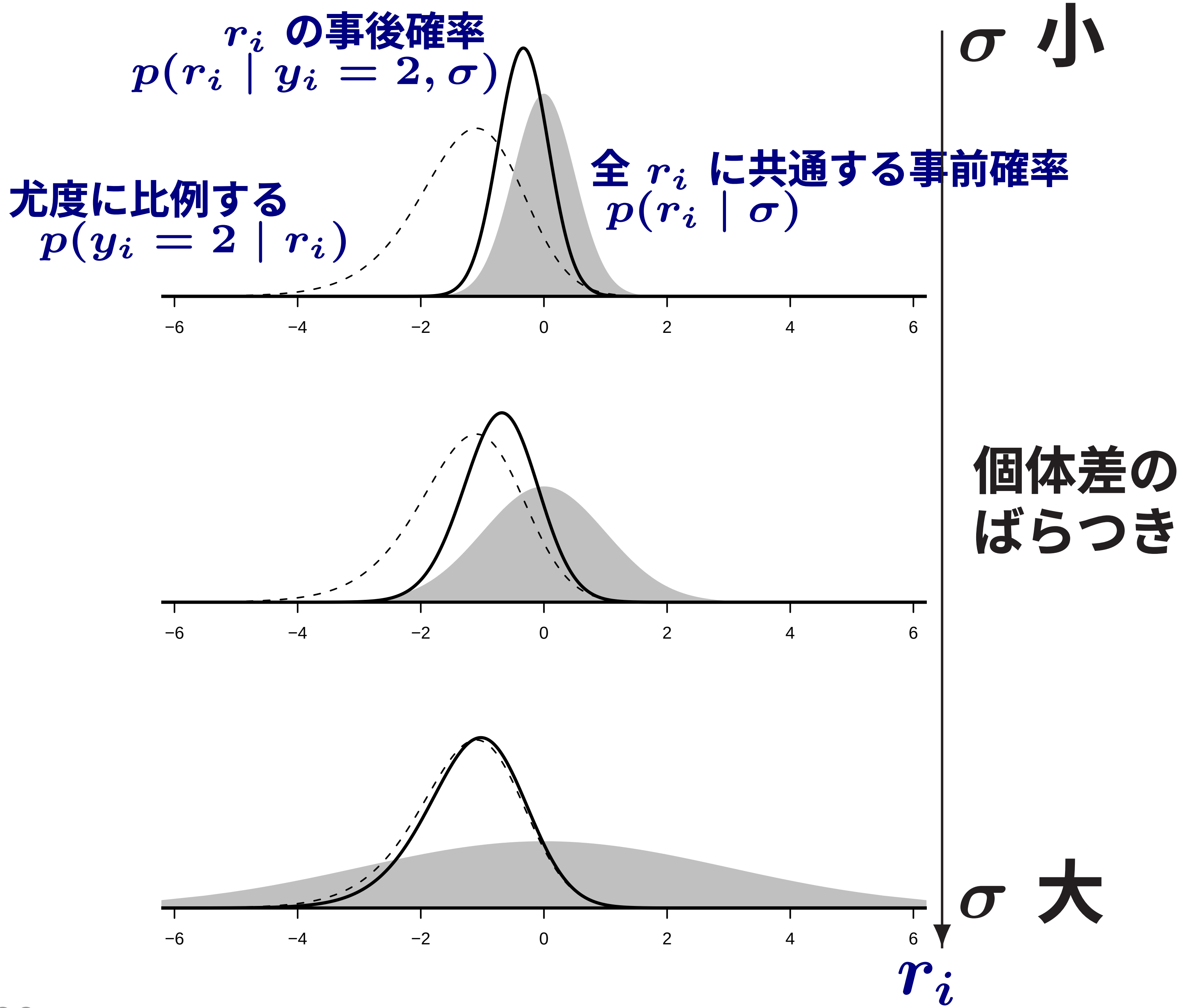
(A) 主観的な事前分布 (B) 無情報事前分布 (C) 階層的な事前分布



(何か植物たちの統計モデリングをやっているとすると)

- random effects 的な効果:
  - 階層的な事前分布を設定する
  - 個体ごとに異なるばらつき r_i が何かあって，しかし集団全体で $\{r_i\}$ が何かの (意味ありげな) 確率分布にしたがっていると考えるのが妥当そうだから

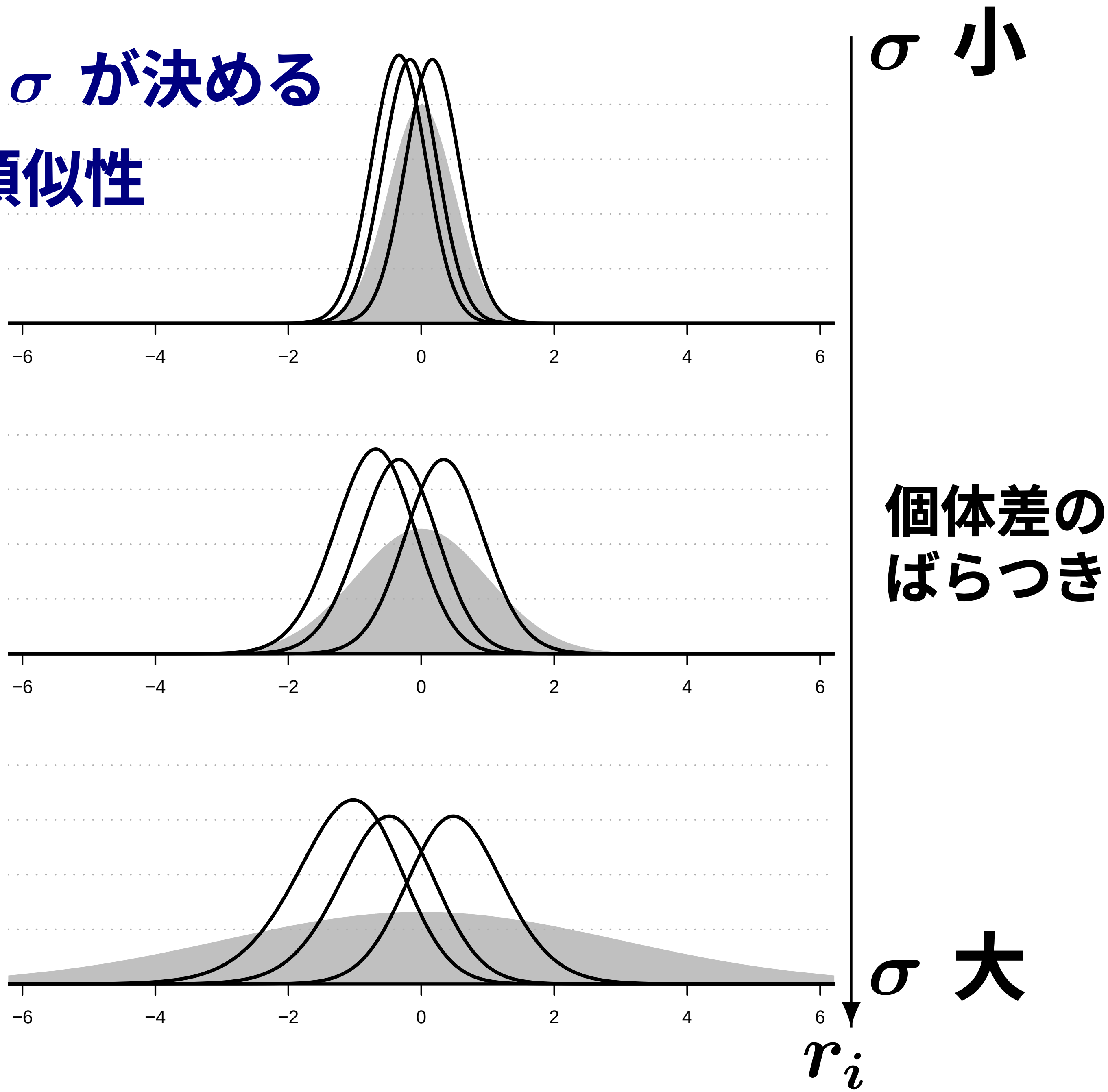
階層的な事前分布と $y_i = 2$ の個体の r_i



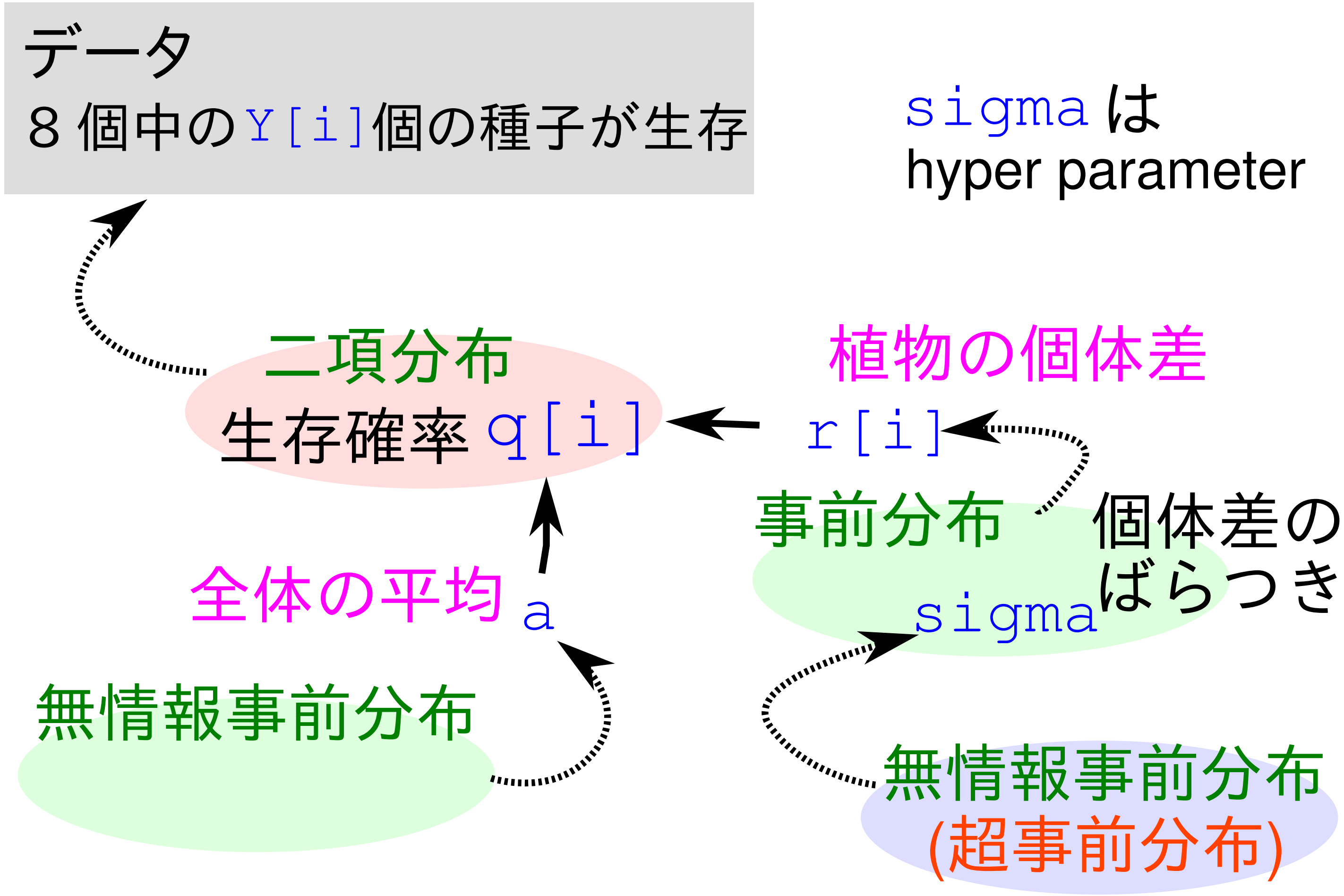
階層的な事前分布と $y_i \in \{2, 3, 5\}$ の個体の r_i

パラメーター σ が決める

個体間の類似性



なぜ「階層」ベイズモデルと呼ばれるのか?

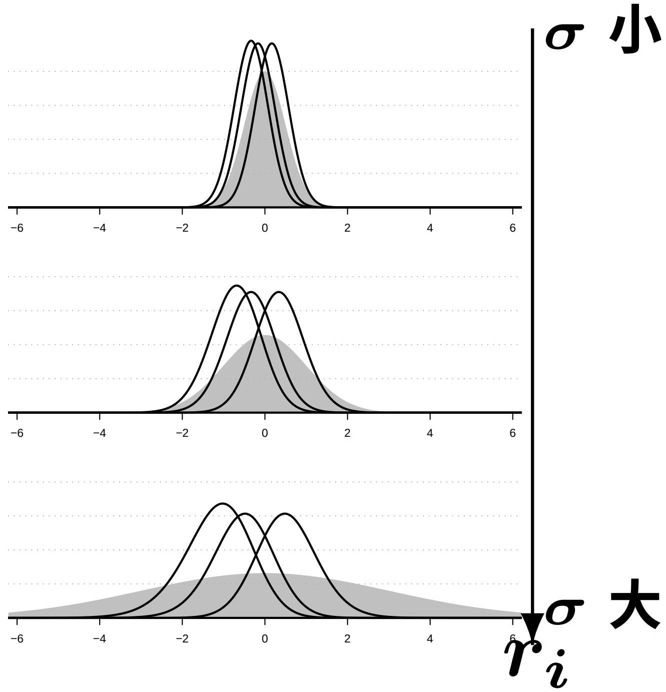


超事前分布 → 事前分布という階層があるから

階層ベイズモデルではないベイズモデルって何でしょう?

個体差 r_i の事前分布の設定を例に検討してみる

- 事前分布を主観的に決める
  「自分は $\sigma = 0.1$ と信じるので，それを使う」
- 以前のデータを使う?
  「これまでの経験から $\sigma = 0.1$」
- 無情報事前分布ばかりにする
  「よくわからないので σ をすごく大きくする」



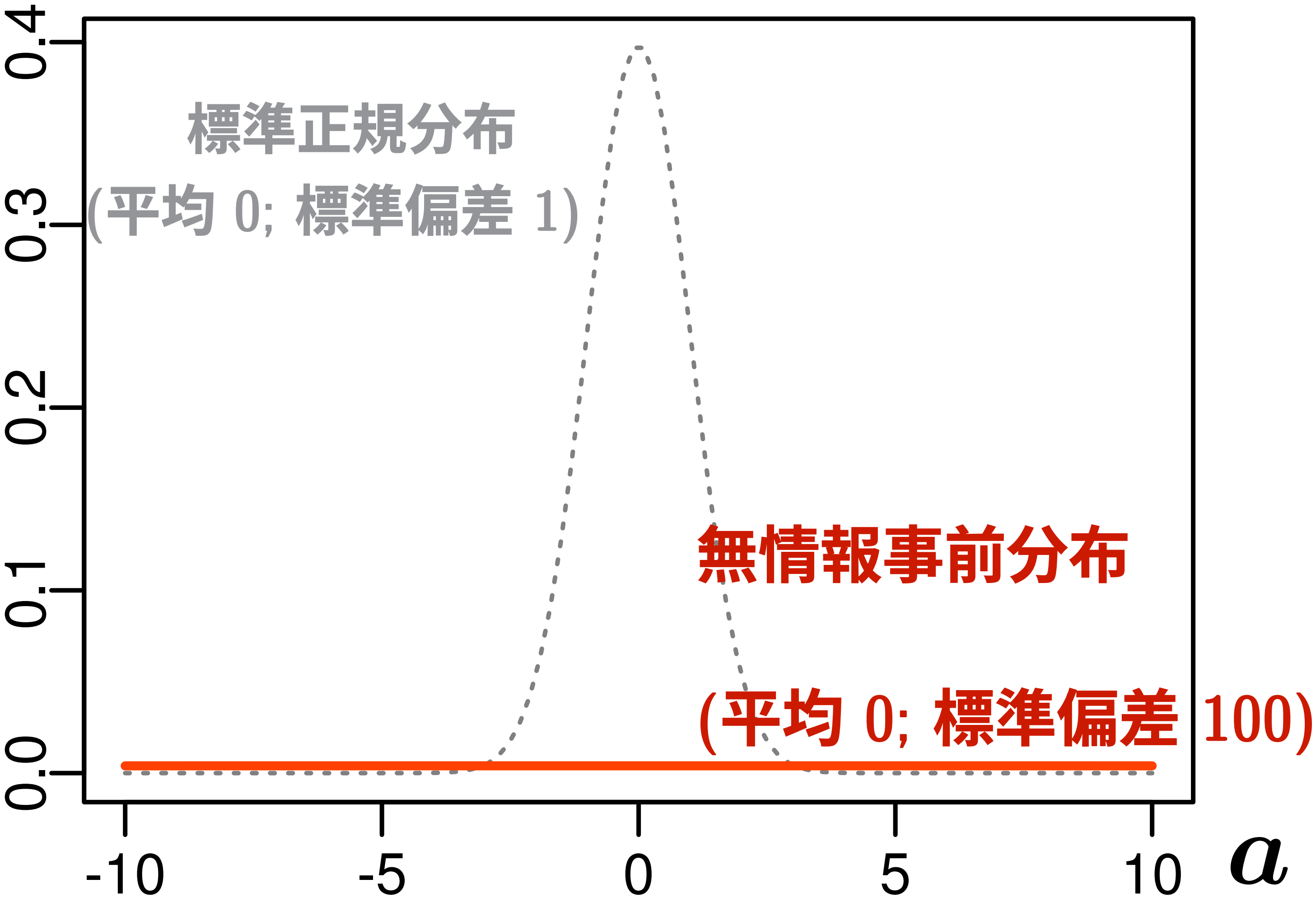
(これらに対して)

観測データにもとづいて σ を決めようとするのが階層ベイズモデル

個体差 $\{r_i\}$ のばらつき σ の無情報事前分布

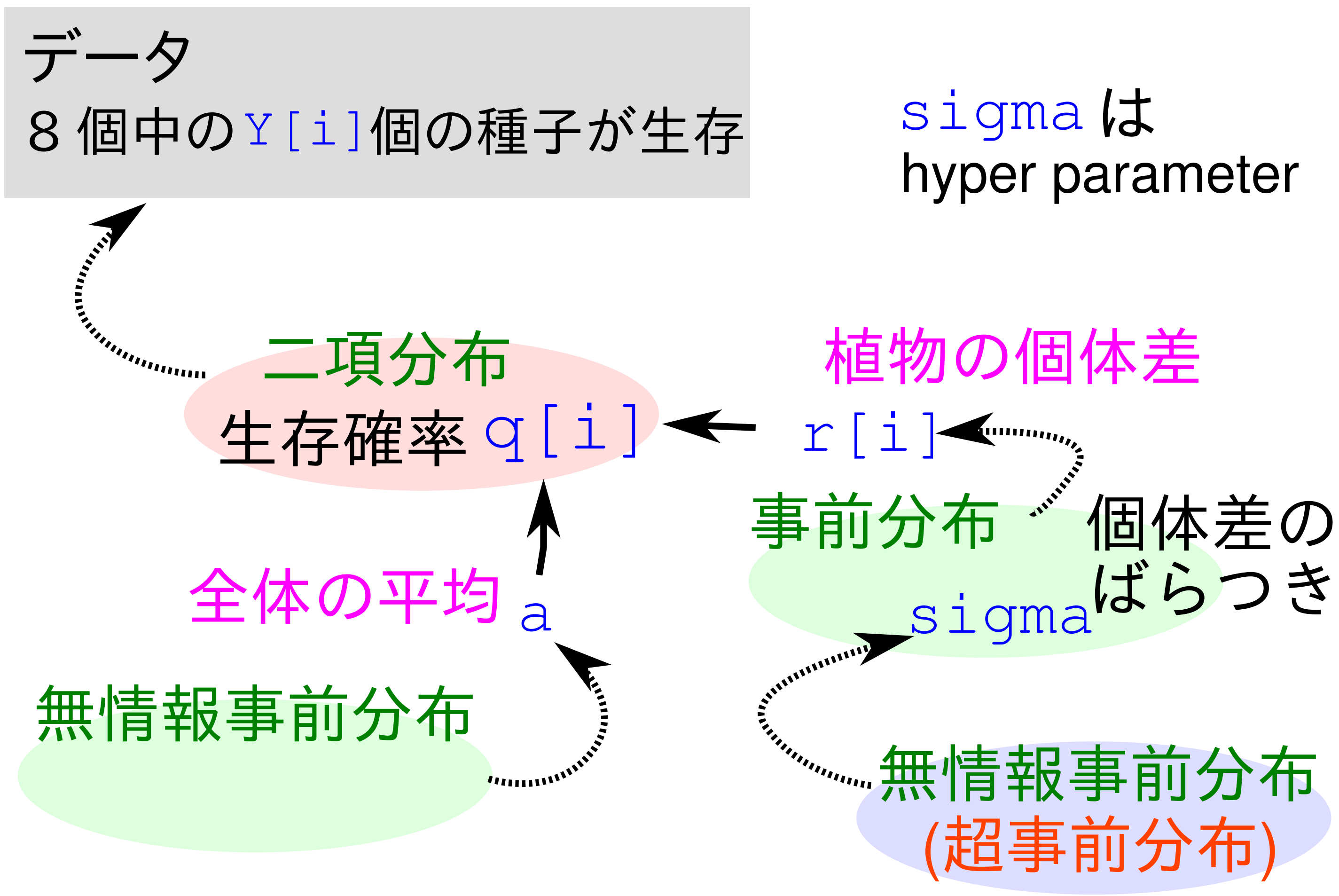
- σ はどのような値をとってもかまわない
- そこで σ の事前分布は **無情報事前分布**(non-informative prior) とする
- たとえば一様分布
  - とりあえず，ここでは $0 < \sigma < 10^4$ の一様分布としてみる

全個体の「切片」 a の無情報事前分布



「生存確率の (logit) 平均 a は何でもよい」と表現している

全パラメーターを一斉に推定する



矢印は手順ではなく，依存関係をあらわしている

どうやってパラメーター推定をするのか?

今回は省略 (次回に説明します)

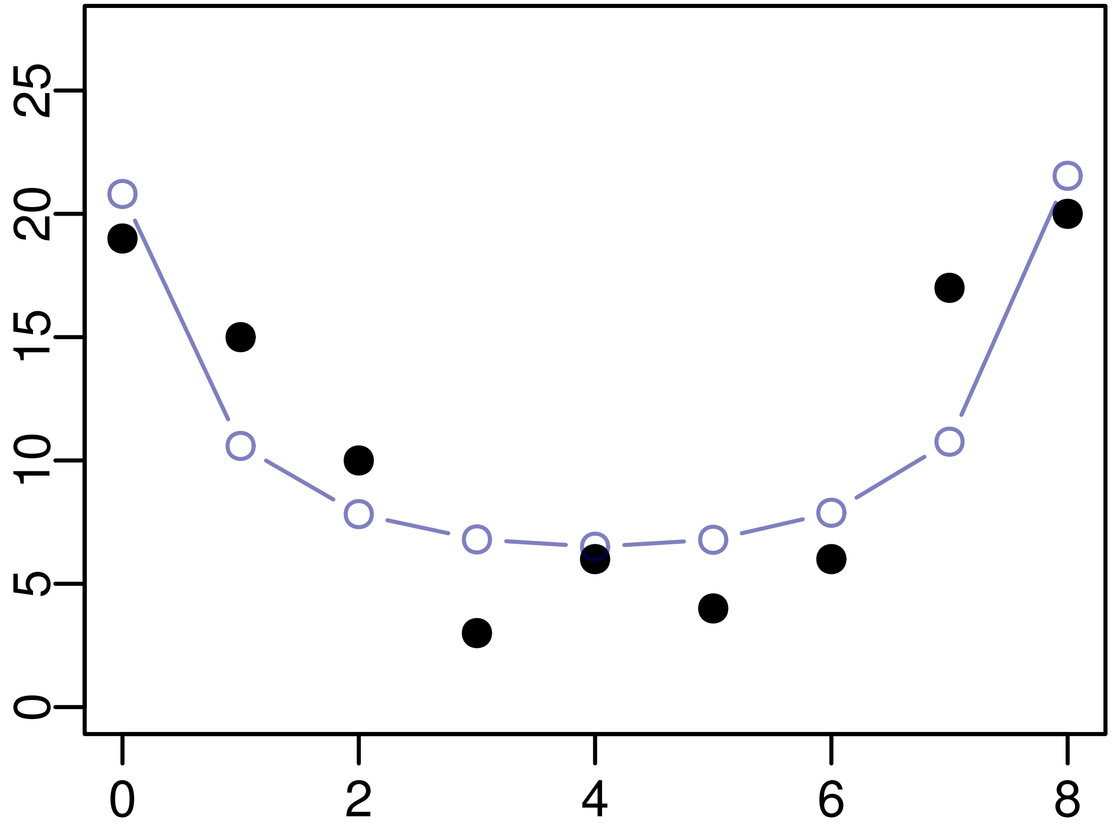
WinBUGS + R でパラメーターの

事後分布が推定された，としましょう

推定された事後分布に基づく予測

観察された

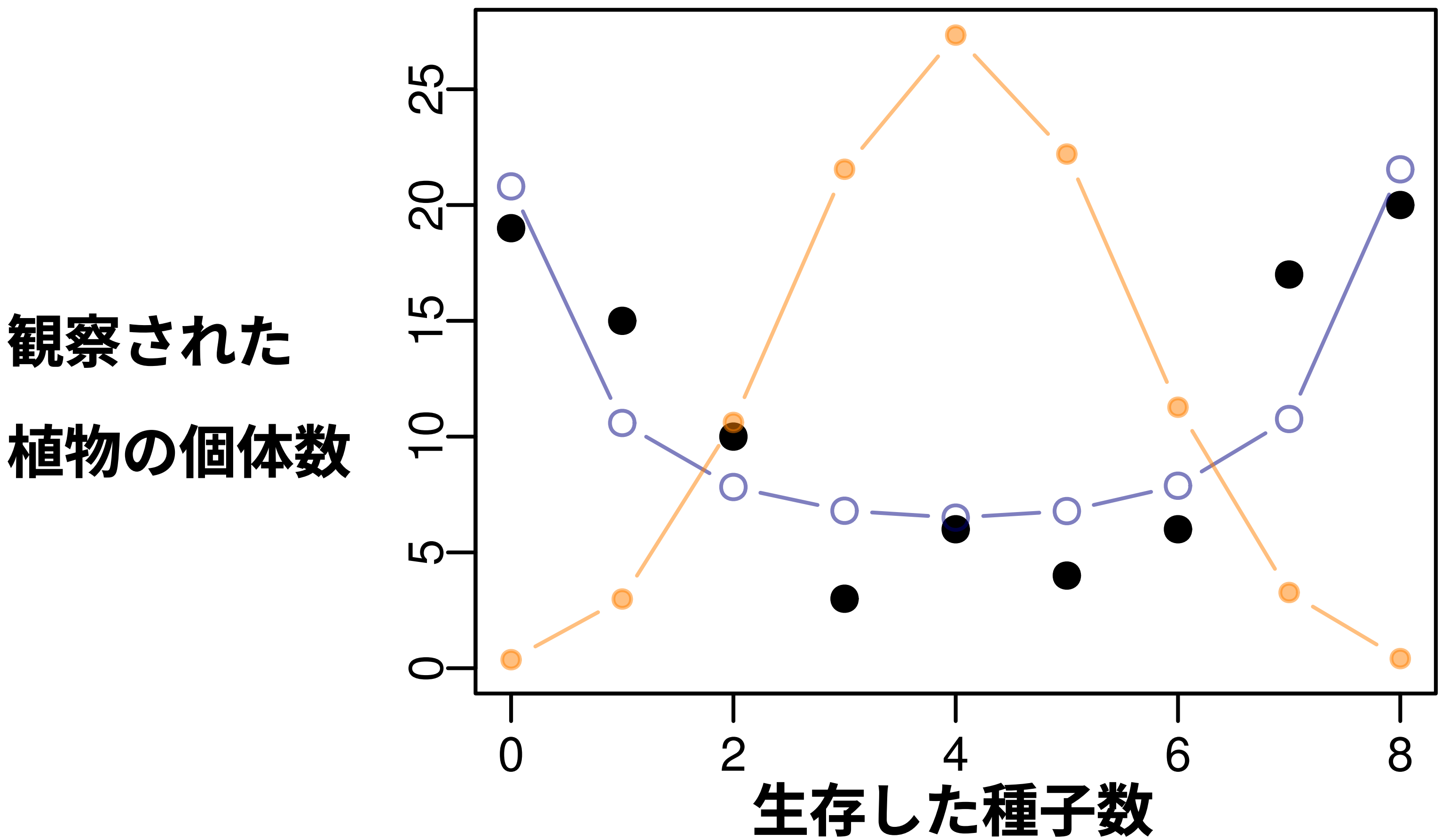
植物の個体数



生存した種子数

「個体差」を考慮することで，
少しはマシな統計モデルが作れた

ここで使った解決策: さまざまな二項分布をまぜる

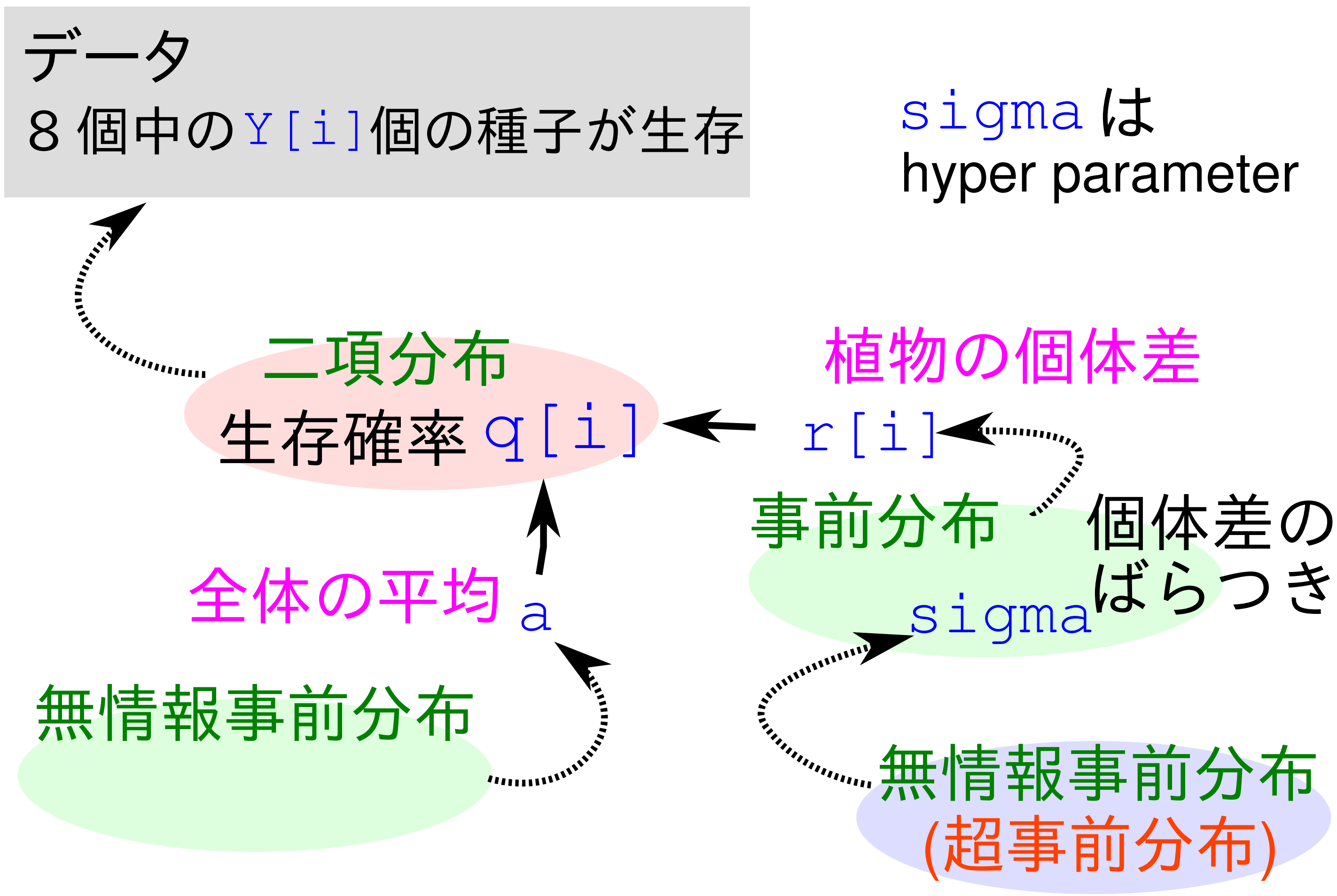


複雑な確率分布を新しく導入するのではなく
二項分布と正規分布をまぜることで現象を表現した

ここまでの用語の整理

- **階層ベイズモデル**

  (事後分布) ∝ (尤度) × (事前分布) × (超事前分布)



- **事後分布の推定計算方法: Markov Chain Monte Carlo (MCMC) 法**

今日のハナシ

階層ベイズモデルでないとうまく表現できない現象がある

- 統計モデルは尤度であてはまりの良さを調べられる
  - 一番あてはまりが良いところをさがすのが最尤推定法
  - 尤度に比例するパラメーターの確率分布を推定するのが MCMC
- 現実的なデータ解析では個体差など random effects を考慮する必要あり
  - 単純な GLM ではそういうばらつきを表現できない
  - 階層ベイズモデル!

線形モデルの発展

推定計算方法

MCMC

階層ベイズモデル
(HBM)

もっと自由な
統計モデリン
グを!

一般化線形混合モデル
(GLMM)

最尤推定法

個体差・場所差
といった変量効果
をあつかいたい

一般化線形モデル
(GLM)

最小二乗法

正規分布以外の
確率分布をあつ
かいたい

線形モデル

階層ベイズモデルのご利益とは?

階層ベイズモデルでないとうまく表現できない現象がある

- 複数の random effects (個体差・ブロック差・縦断的データ・……)
- 「隠れた」状態をあつかうモデル
  - 例: 「欠側値を補う」処理
- 空間構造ある問題も MCMC 計算で
  - 例: 「隣は似てるよ」効果 – Gaussian Random Field

第 6 回・第 7 回でそういう例をいつくか紹介します