神戸大学理学部特別講義

「生物統計学」 (2012 年 11 月) 投影資料

全部で 6 回中の 5 回目

階層ベイズモデルの基礎

個体差のモデリング

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

http://goo.gl/wijx2

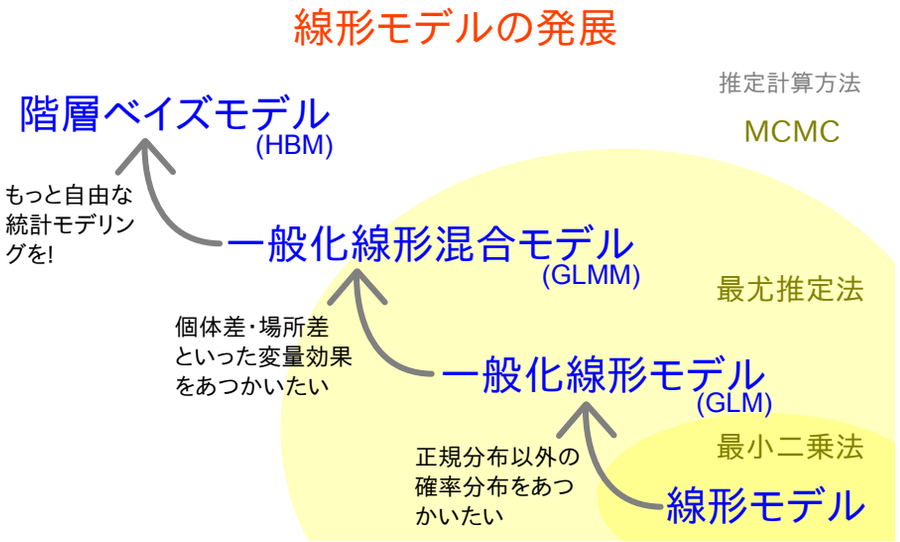
今回のハナシ

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

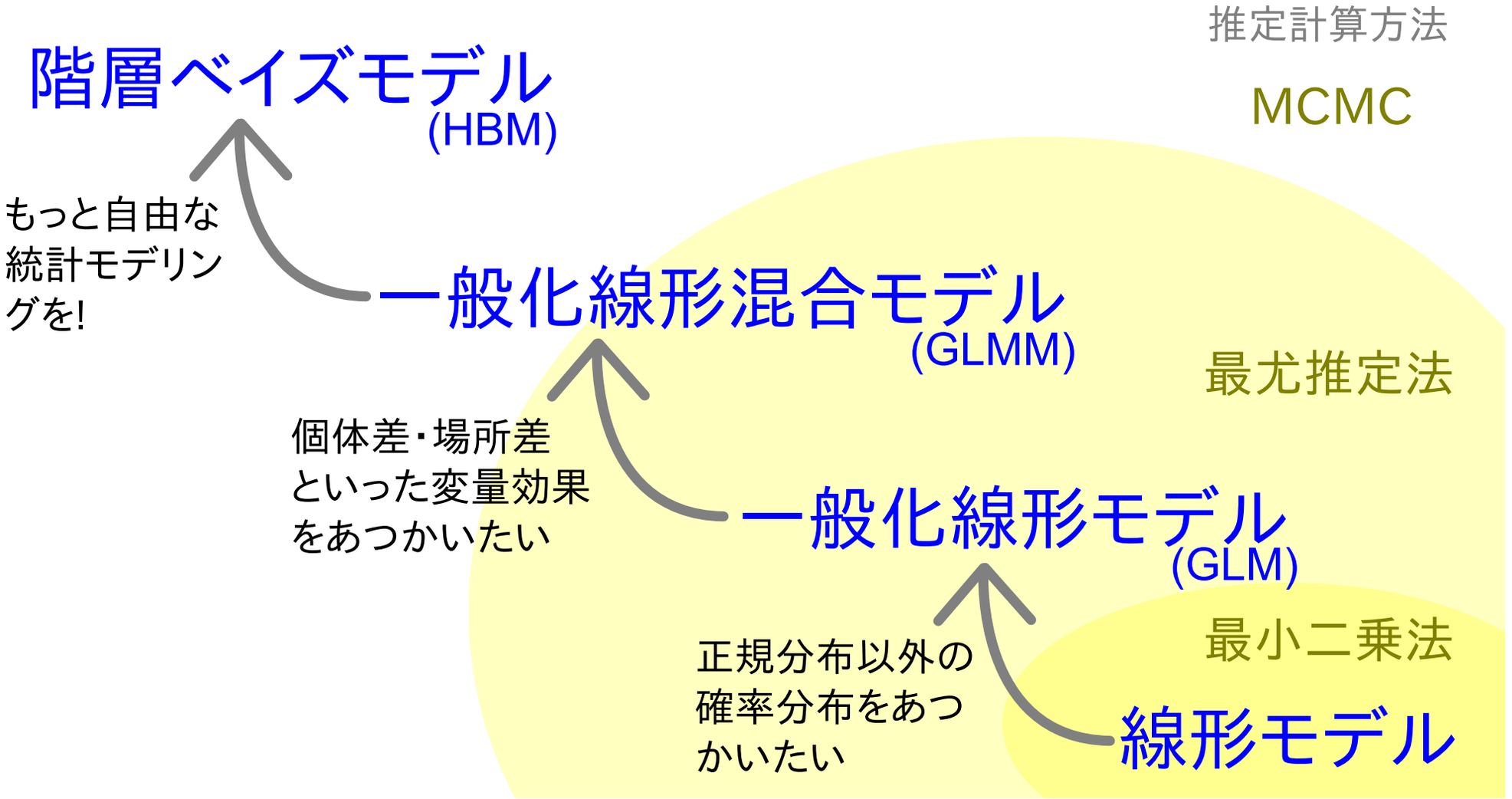
- 統計モデルは尤度であてはまりの良さを調べられる
  - 一番あてはまりが良いところをさがすのが最尤推定法
  - 尤度に比例するパラメーターの確率分布を推定するのが **MCMC**
- 現実的なデータ解析では個体差など **random effects** を考慮する必要あり
  - 単純な GLM ではそういうばらつきを表現できない
  - 階層ベイズモデル!

今回，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 $\longrightarrow$ **Markov chain Monte Carlo (MCMC)**
- 一般化線形モデル $\longrightarrow$ 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



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

このあとの統計モデル化の説明の手順

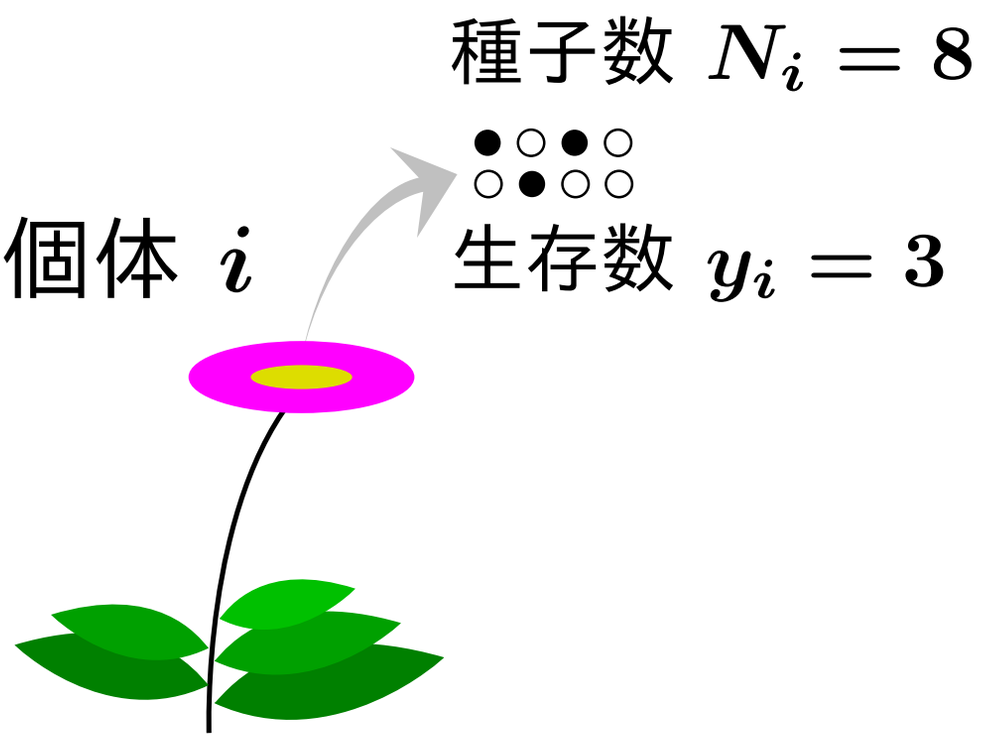
1. 簡単な例題: GLM でうまくいく場合
   - 統計モデルの部品: 二項分布モデル (GLM)
   - 統計モデルの推定方法: 最尤推定法
2. MCMC とベイズモデリング
   - 最尤推定を MCMC におきかえてみる
   - MCMC で得られた結果をベイズ的に解釈
3. ちょっと難しい例題: GLM でうまくいかない場合
   - 「個体全体の平均」と「個体差」をどうあつかう?
   - 階層ベイズモデル!

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

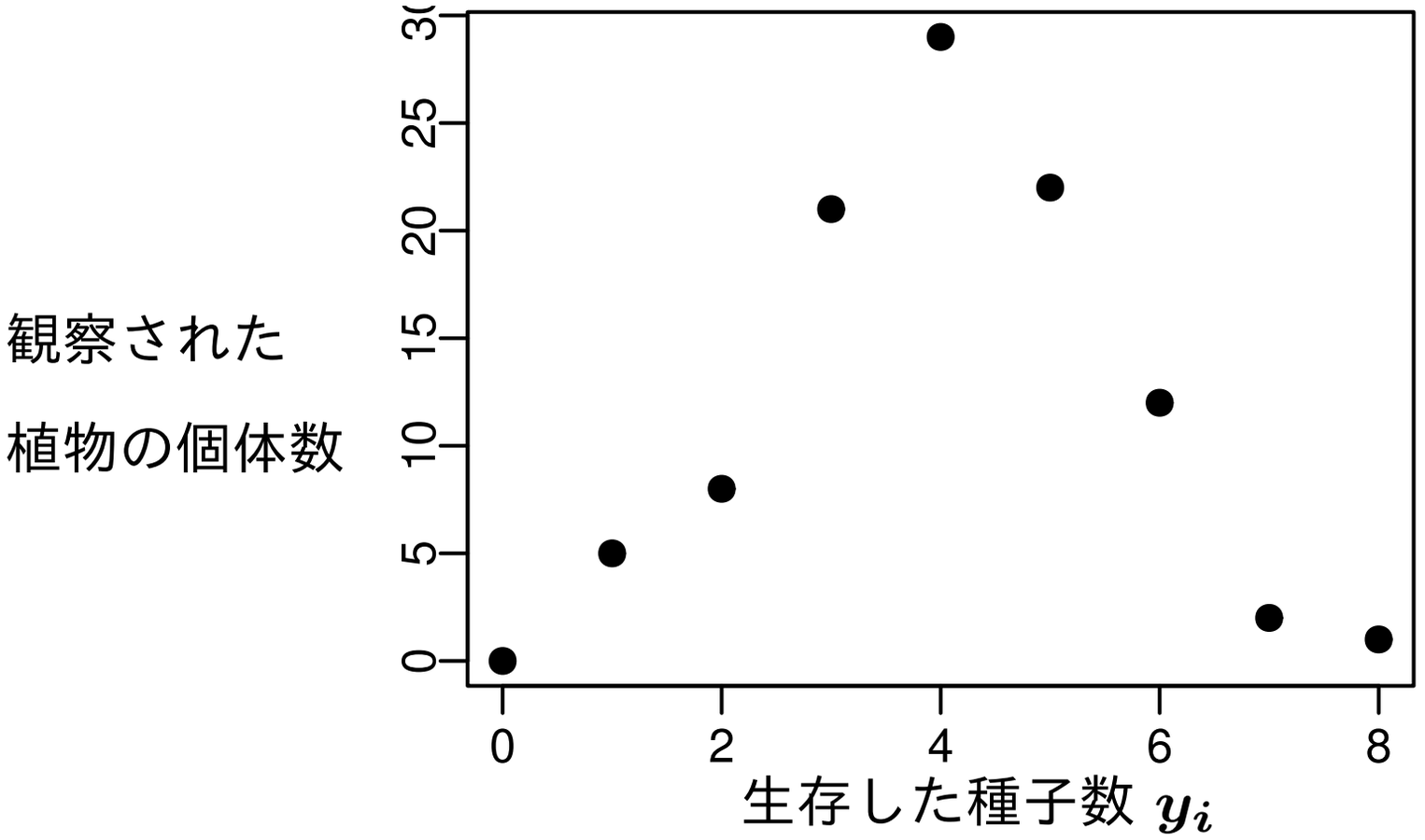
- 架空植物の種子の生存を調べた
- 種子: 生きていれば発芽する
  - どの個体でも **8** 個 の種子を調べた
- 生存確率: ある種子が生きている確率



- 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

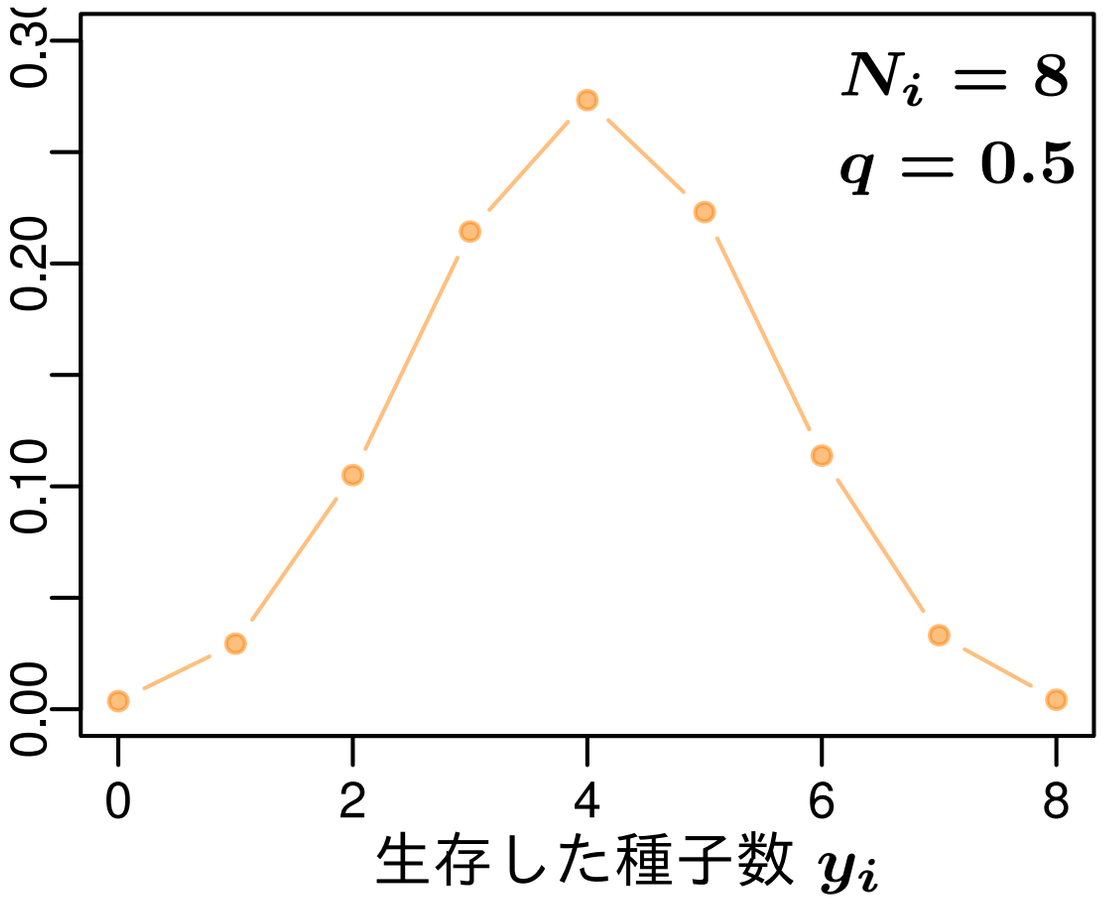
- 生存確率を推定するために 二項分布という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率は二項分布

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

- 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

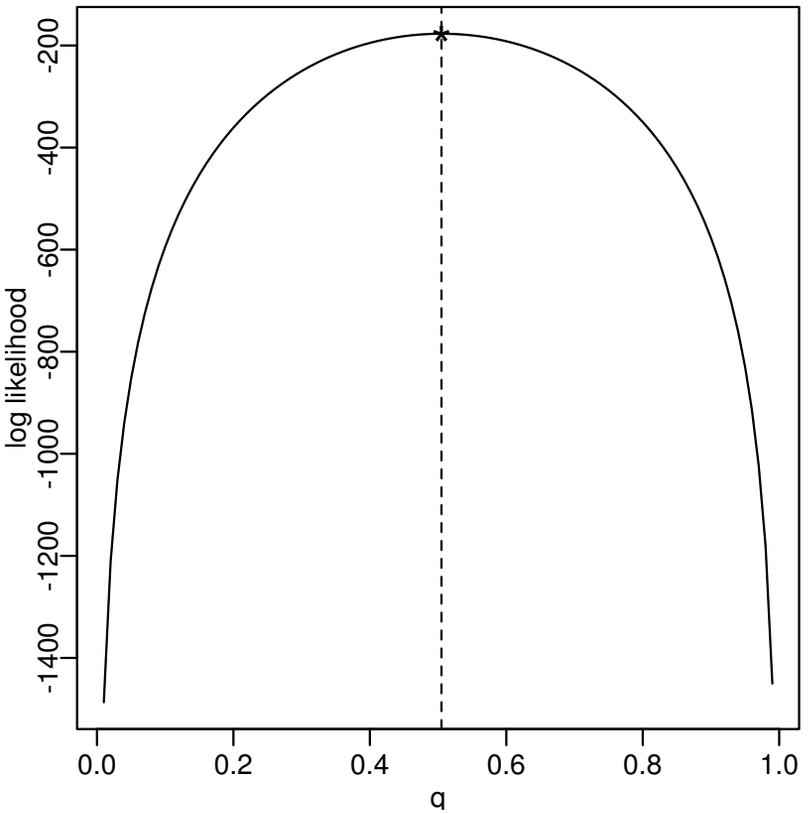
最尤推定とは何か

- 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

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

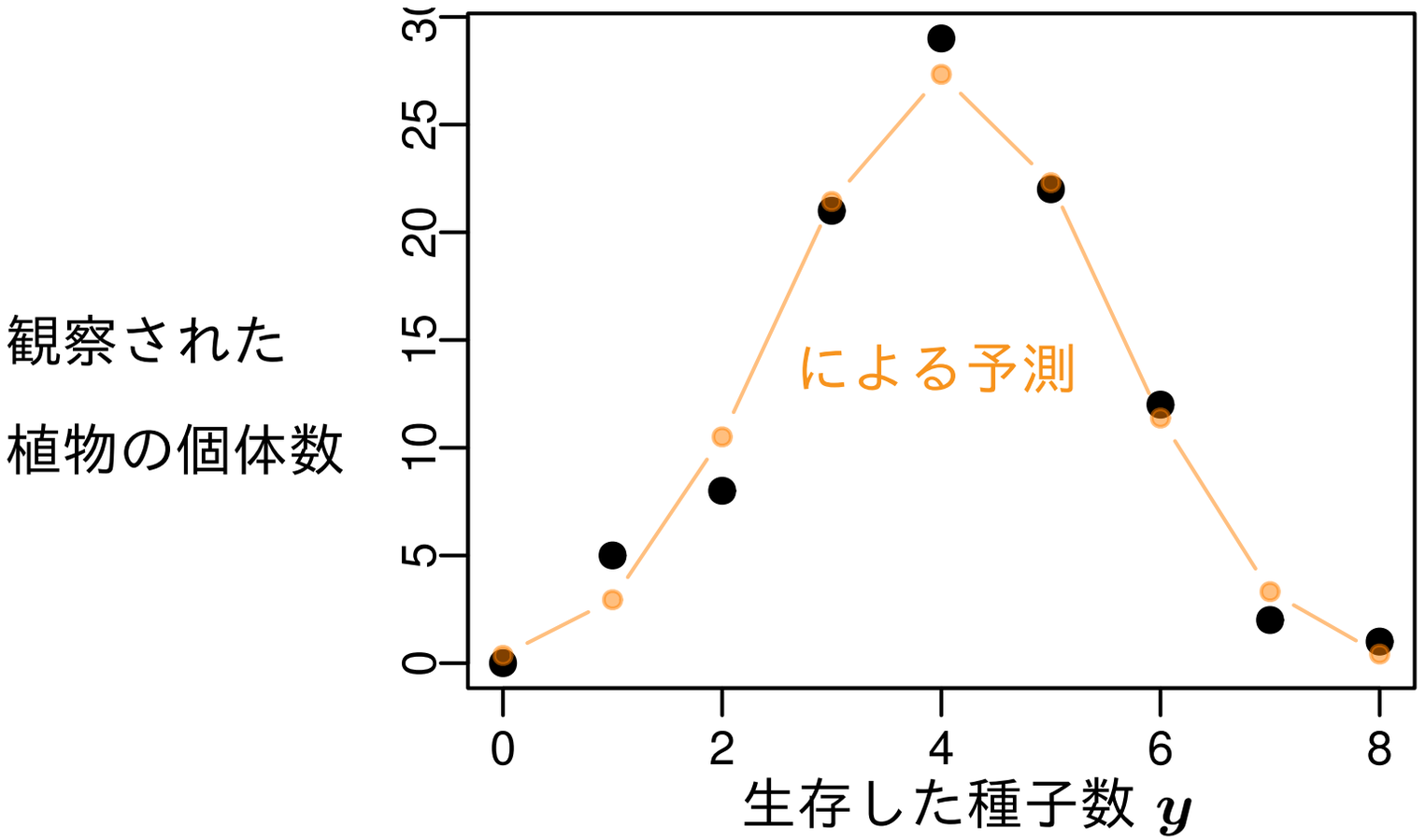
- 生存確率 q が全個体共通の場合の最尤推定量・最尤推定値は

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

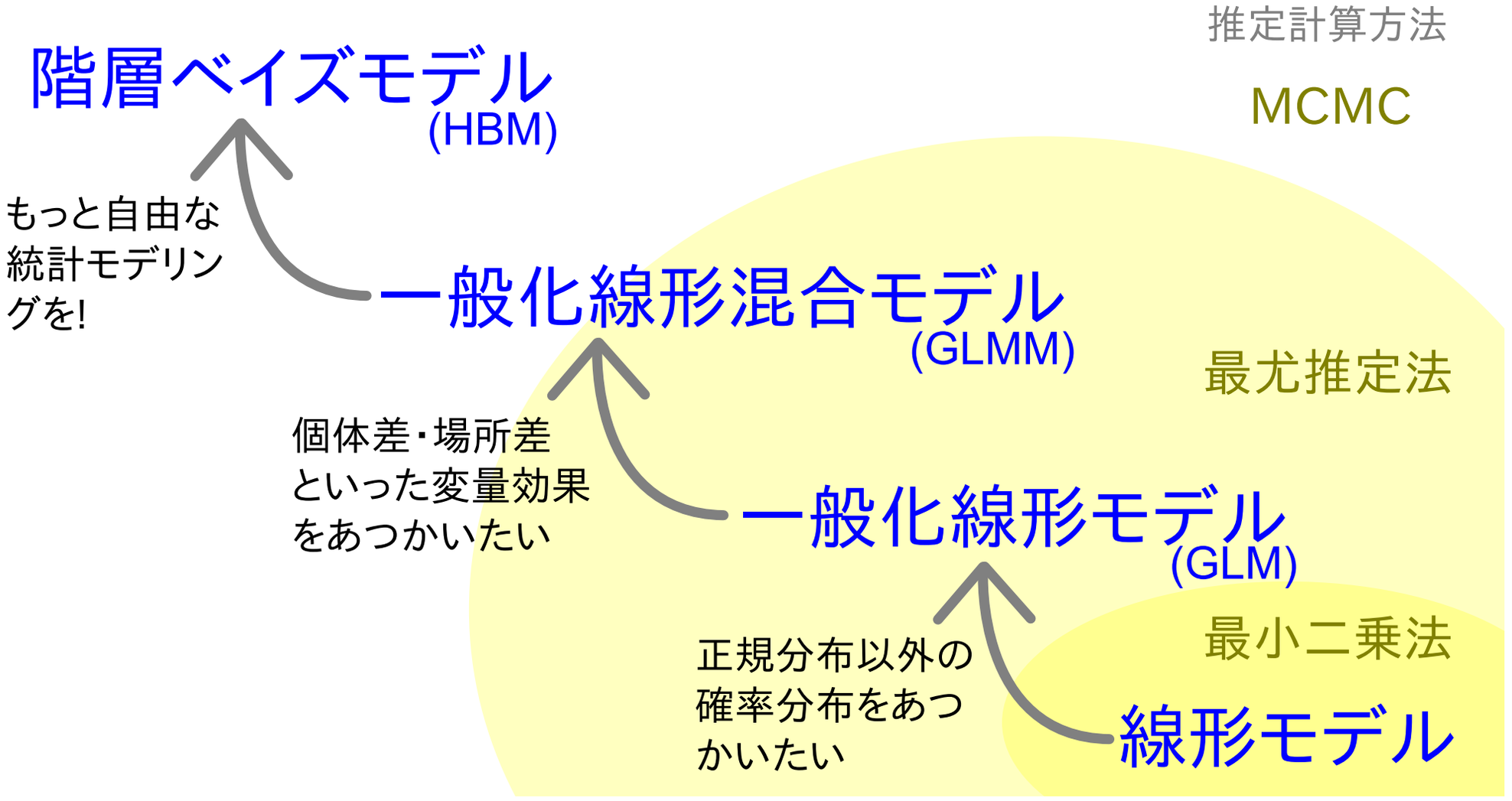


二項分布で説明された 8 種子中 y_i 個の生存

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

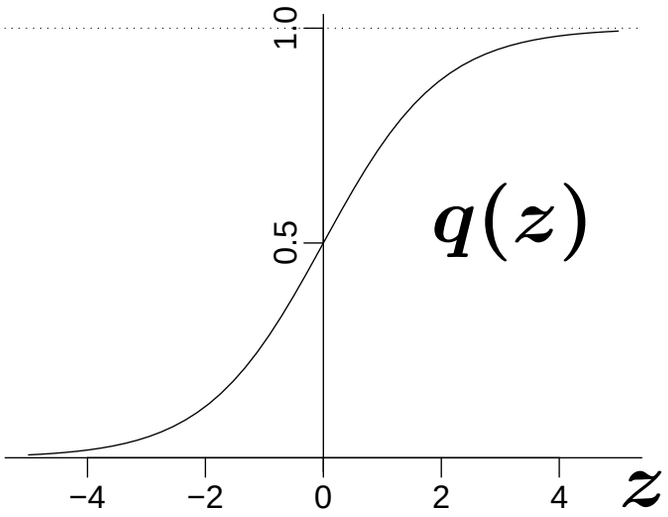


線形モデルの発展


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?

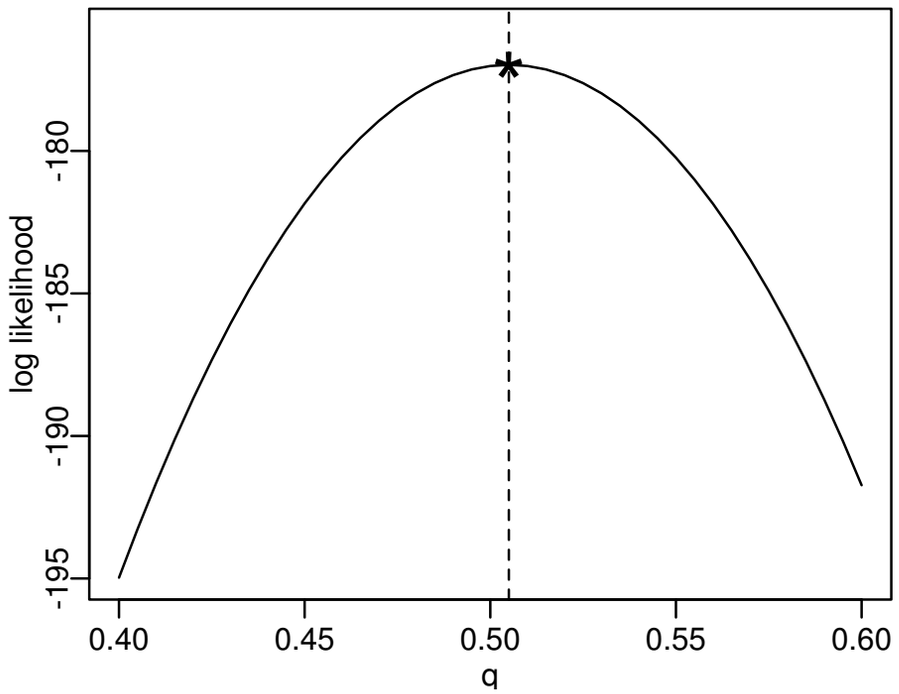
ここでやること: 尤度と MCMC の関係を考える

- 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?

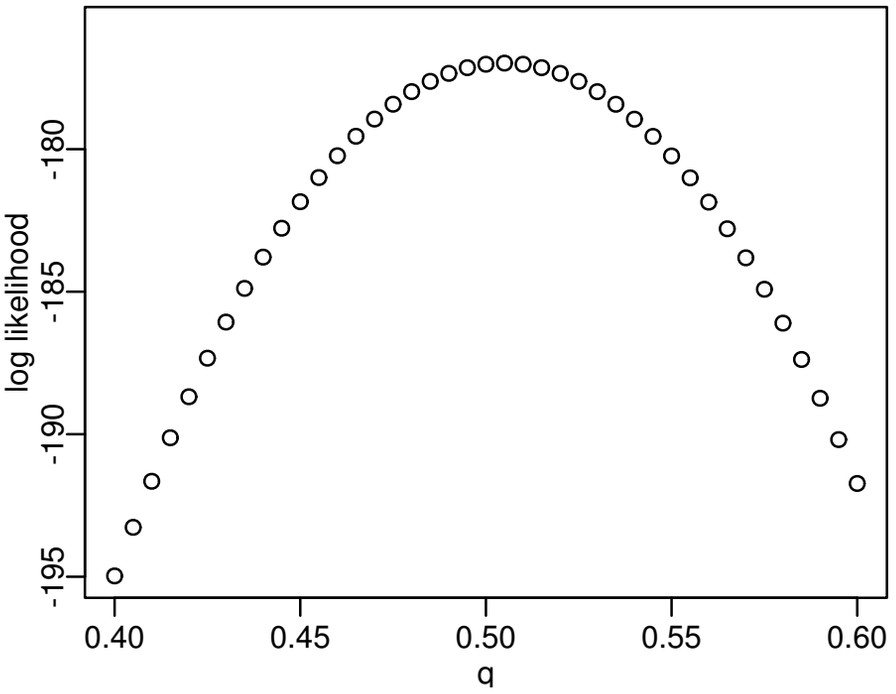
あえて MCMC をもちださなくてもいい問題に関して
メトロポリス法を適用してみて,
その挙動だの得られる結果だのをながめてみる

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 $\log L(q)$



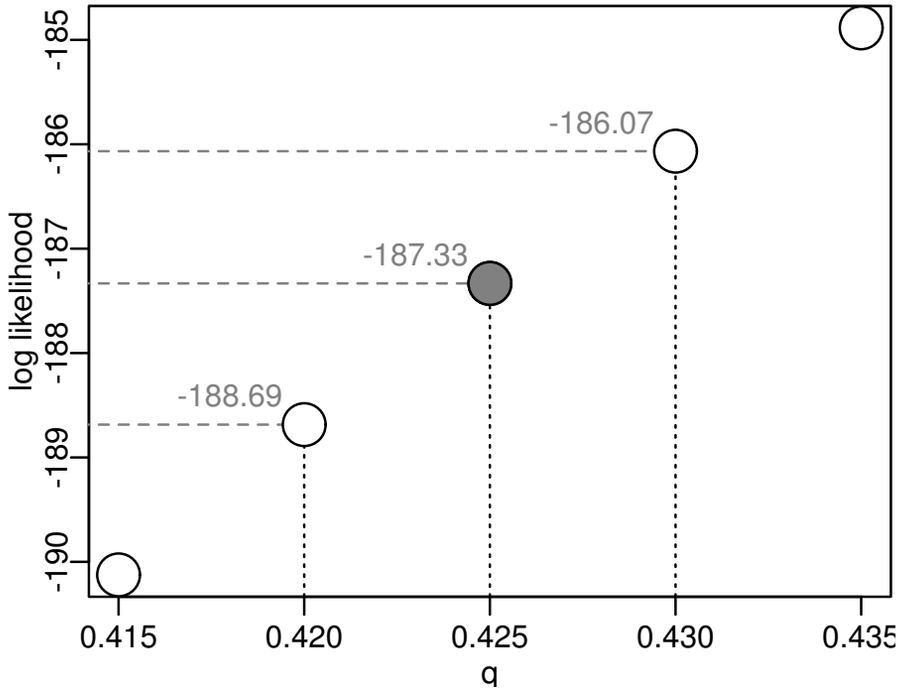
離散化: q がとびとびの値をとる

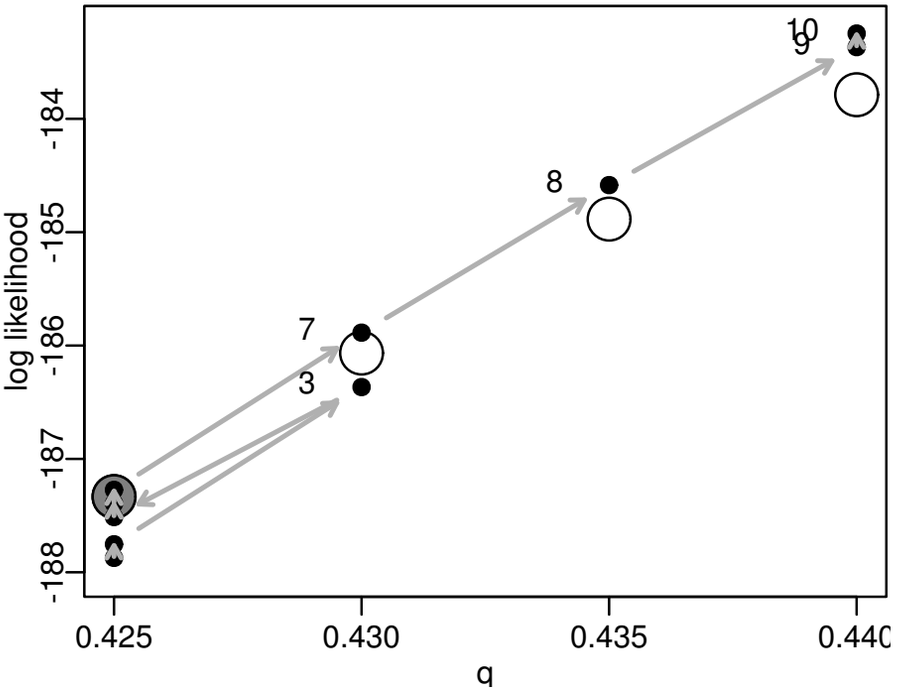


(簡単のため，生存確率 q の軸を離散化する)

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

   (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)

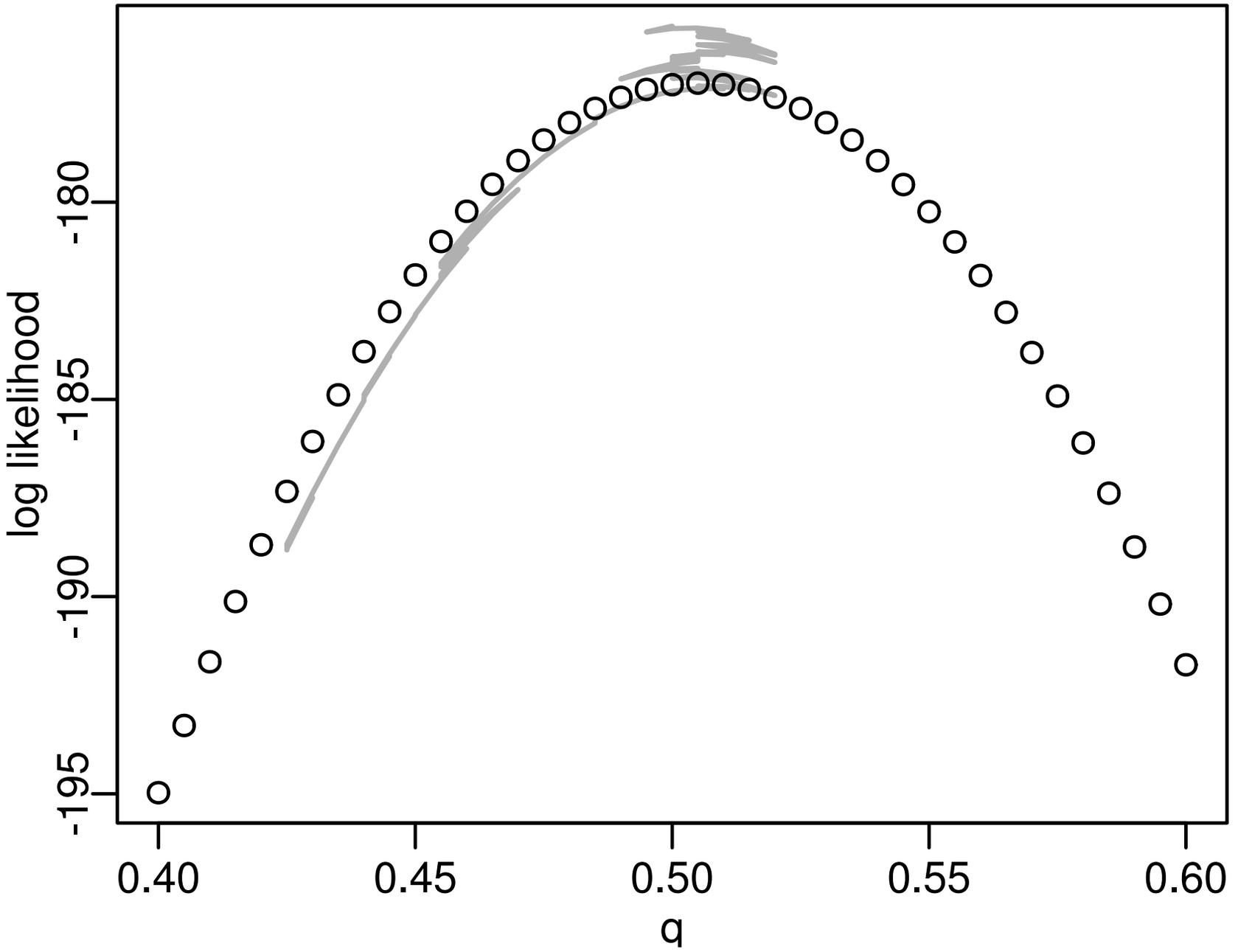
3. $q_{新}$ における尤度 $L(q_{新})$ ともとの尤度 $L(q)$ を比較

   - $L(q_{新}) \geq L(q)$ (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

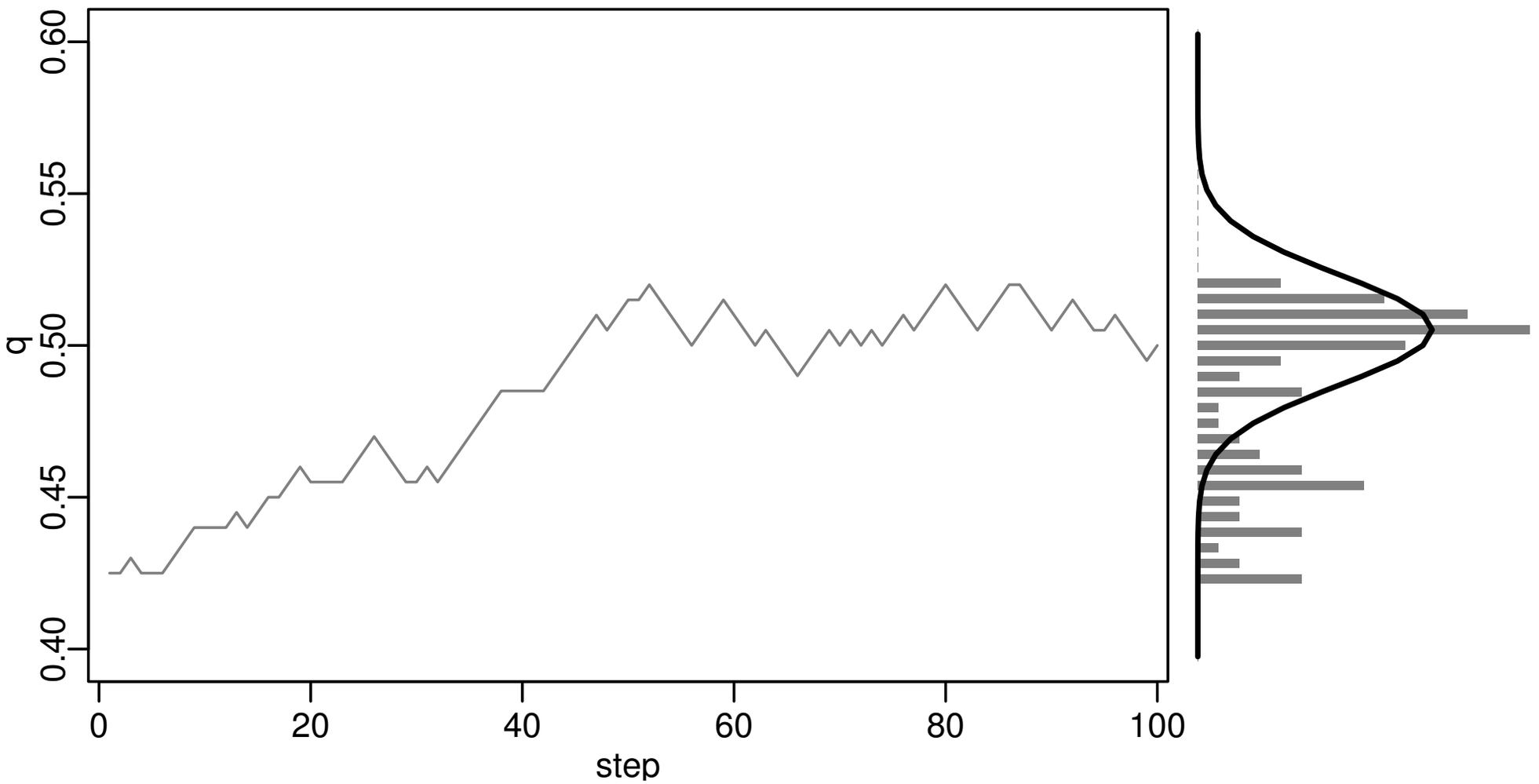
4. 手順 2. にもどる

   ($q = 0.01$ 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

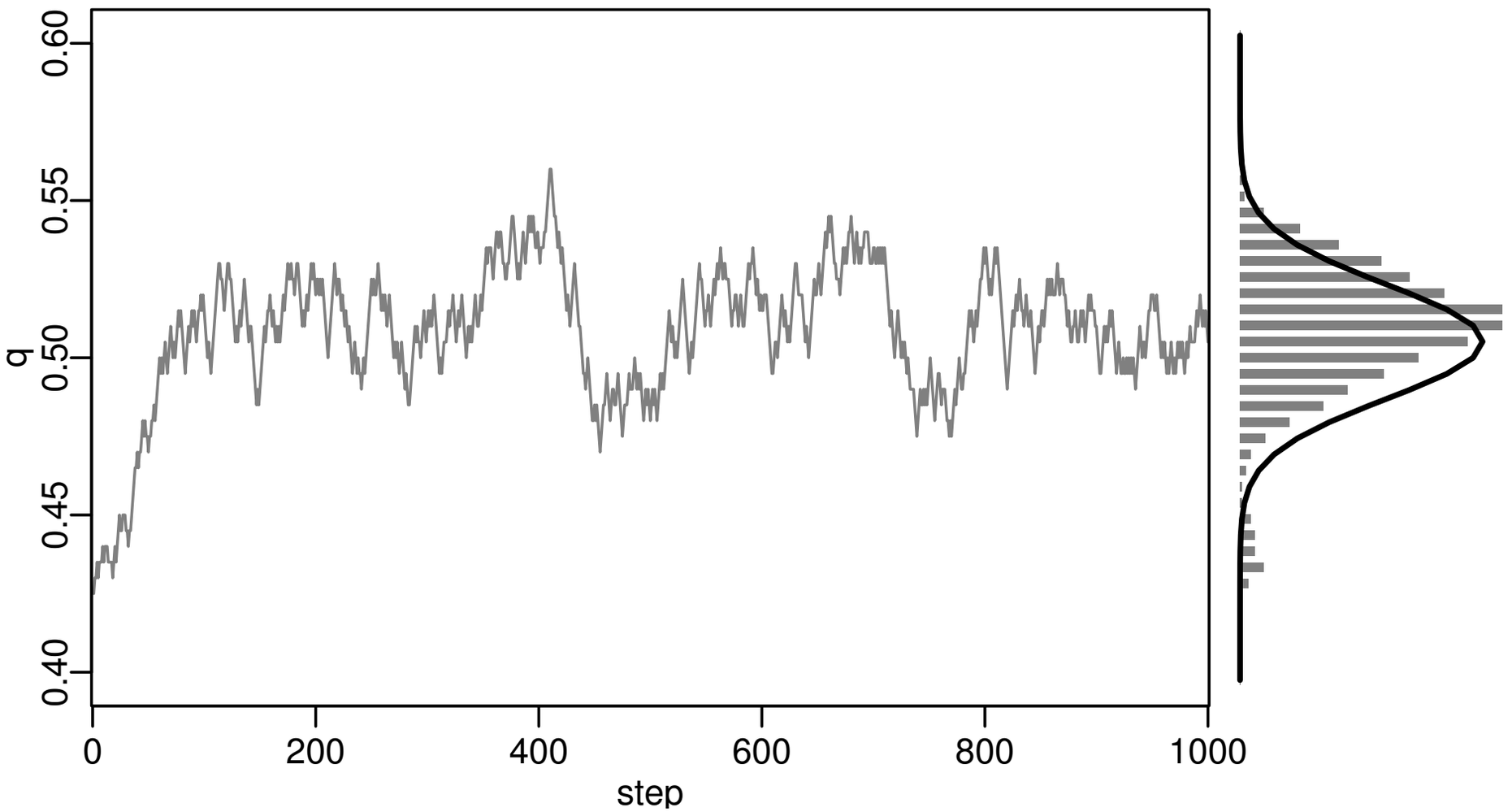


MCMC ステップにそった q の変化



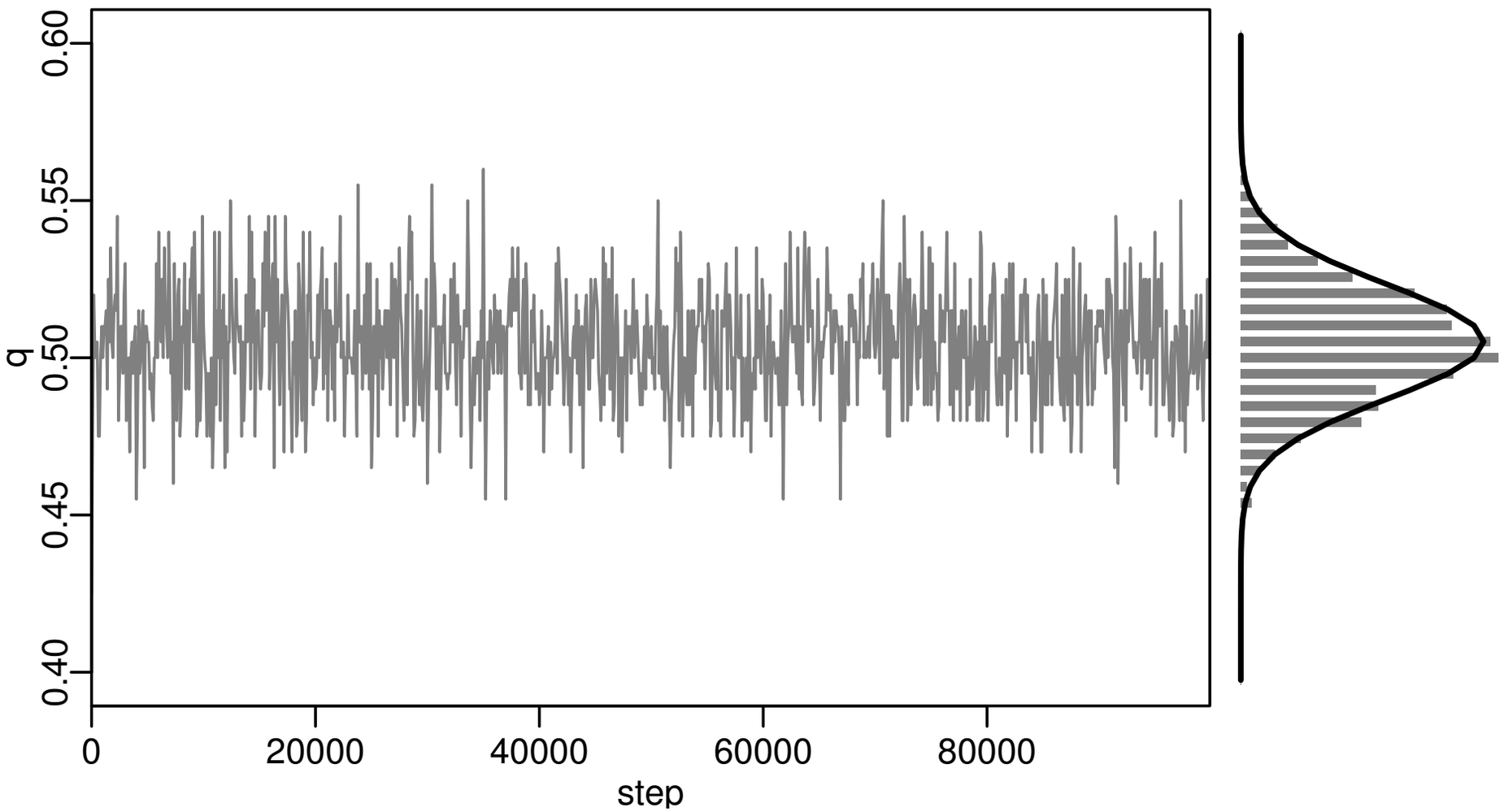
右側は q のヒストグラム

もっと長くサンプリングしてみる



まだまだ……?

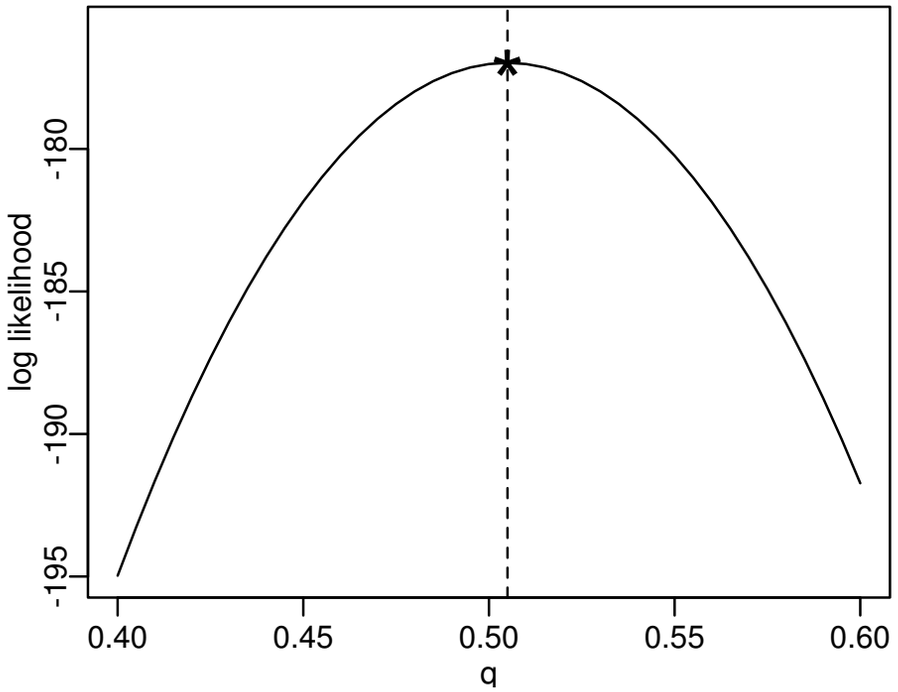
もっともっと長くサンプリングしてみる



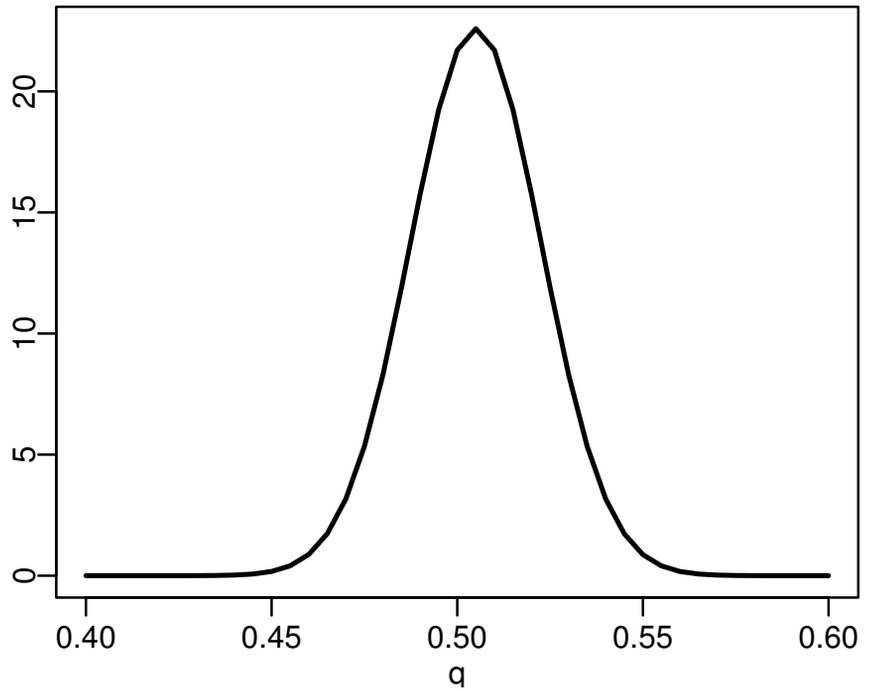
ターゲットとなる「パラメーターの分布」に近づいてきた

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

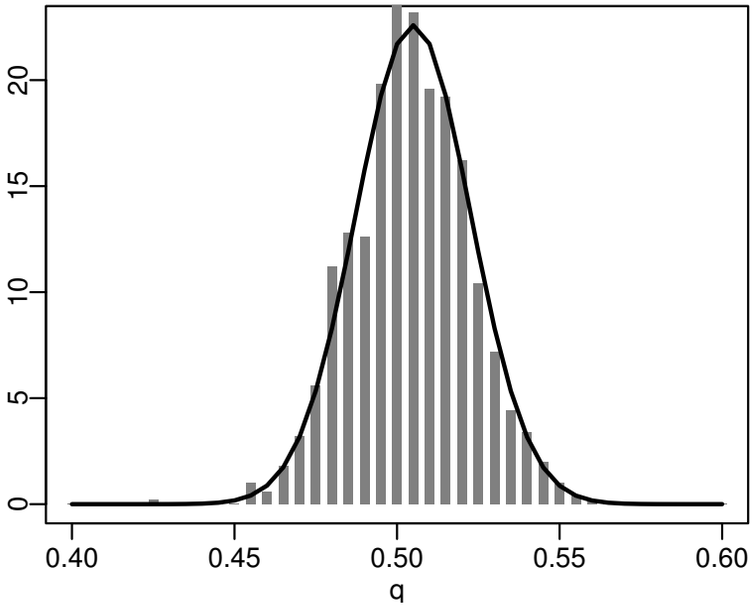


尤度に比例する確率分布からのランダムサンプル

(「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)

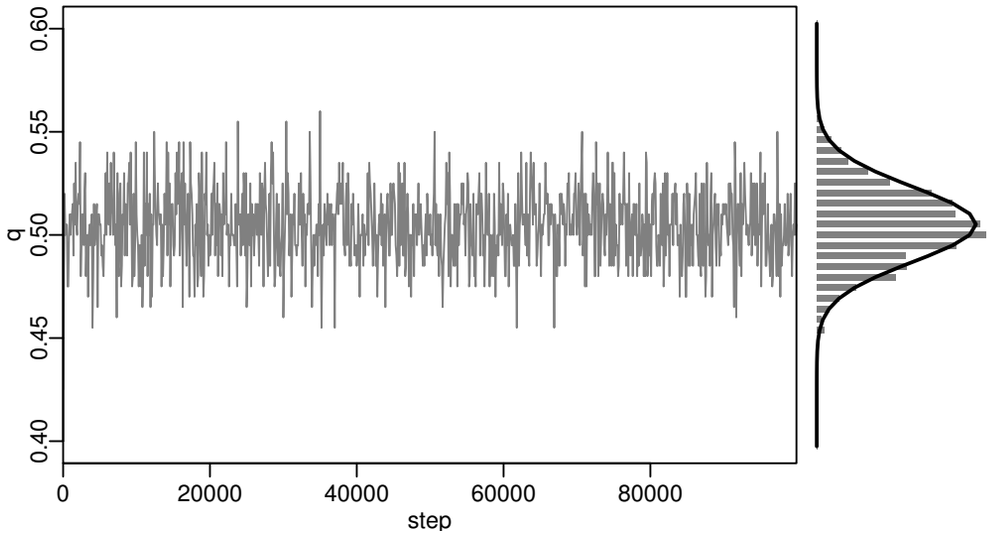
MCMC の結果として得られた「q の分布」



- 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……

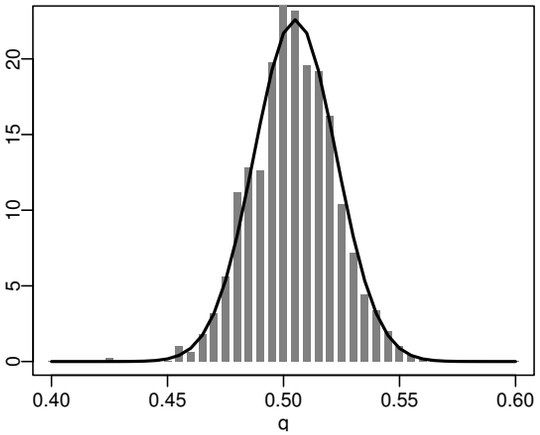
- ベイズの公式 $\quad p(q \mid \mathbf{Y}) = \dfrac{p(\mathbf{Y} \mid q) \times p(q)}{p(\mathbf{Y})}$
- $p(q \mid \mathbf{Y})$ は何かデータ $(\mathbf{Y})$ のもとで何かパラメーター (q) が得られる確率 (事後分布)
- $p(q)$ はあるパラメーター q が得られる確率 (事前分布)
- $p(\mathbf{Y} \mid q)$ パラメーターを決めたときにデータが得られる確率 (尤度に比例)
- $p(\mathbf{Y})$ はデータ $\mathbf{Y}$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

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

現在の例題で仮定している事前分布

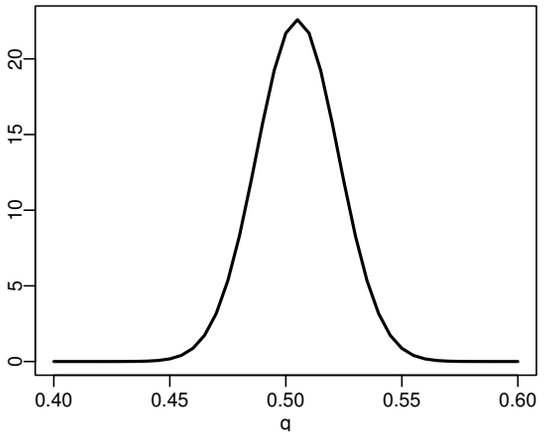
q の事前分布は一様分布，と考えるとつじつまがあう?

q の事後分布 (posterior)



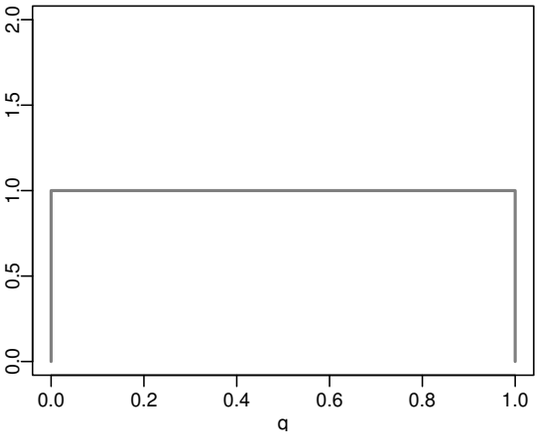
$\propto$

q の尤度 (likelihood)



$\times$

q の事前分布 (prior)



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)

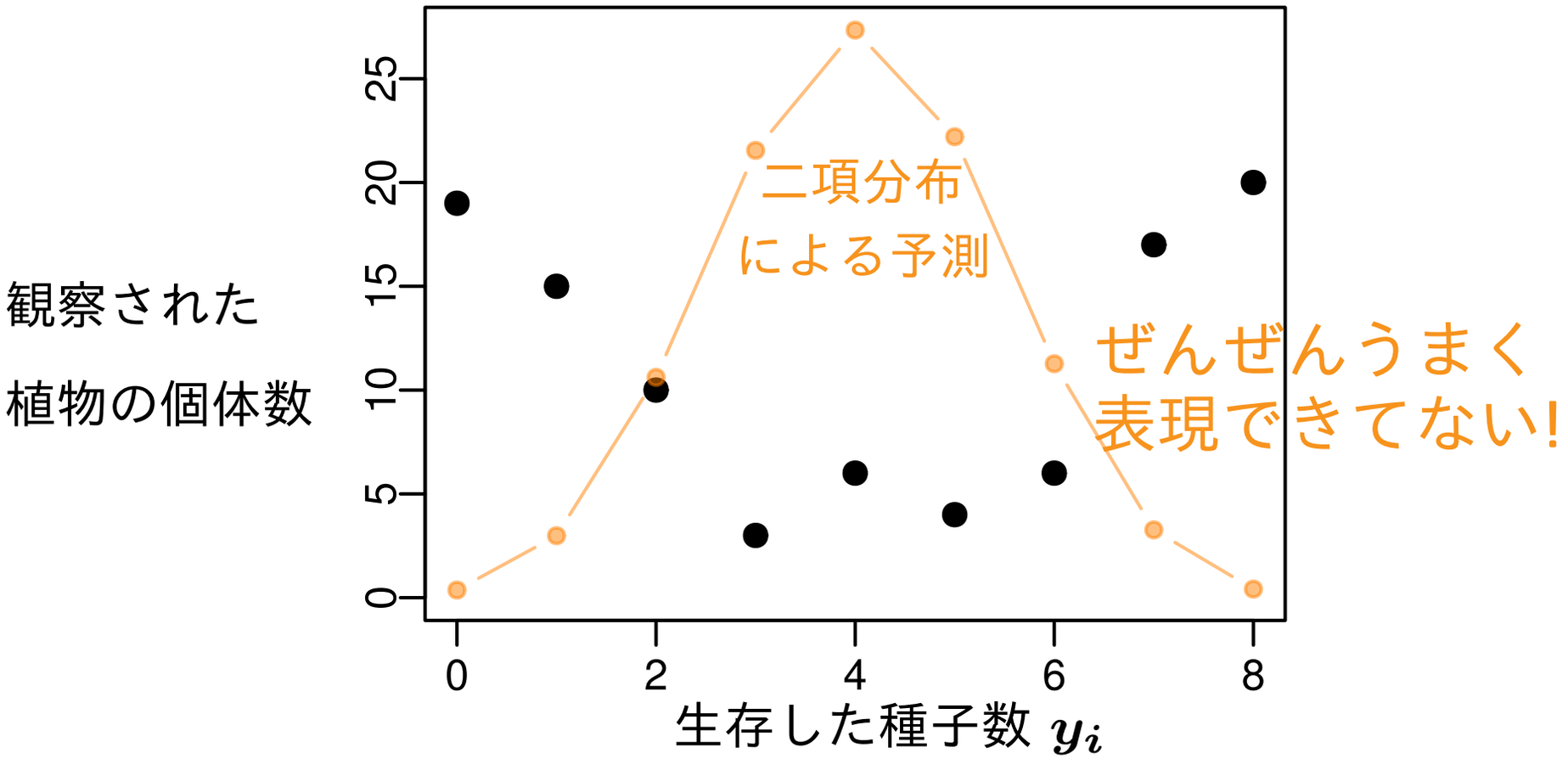
ちょっと難しい例題:

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?!

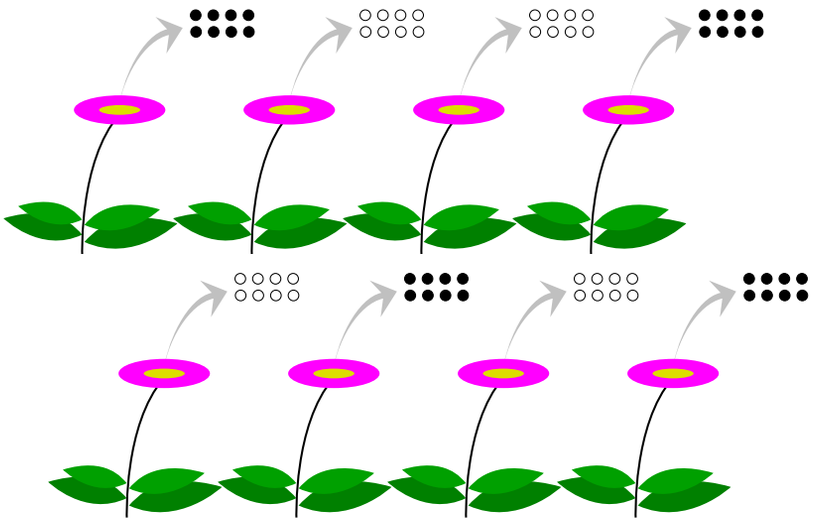
100 個体の植物の合計 800 種子中 **403** 個の生存が見られたので，平均生存確率は 0.50 と推定されたが……

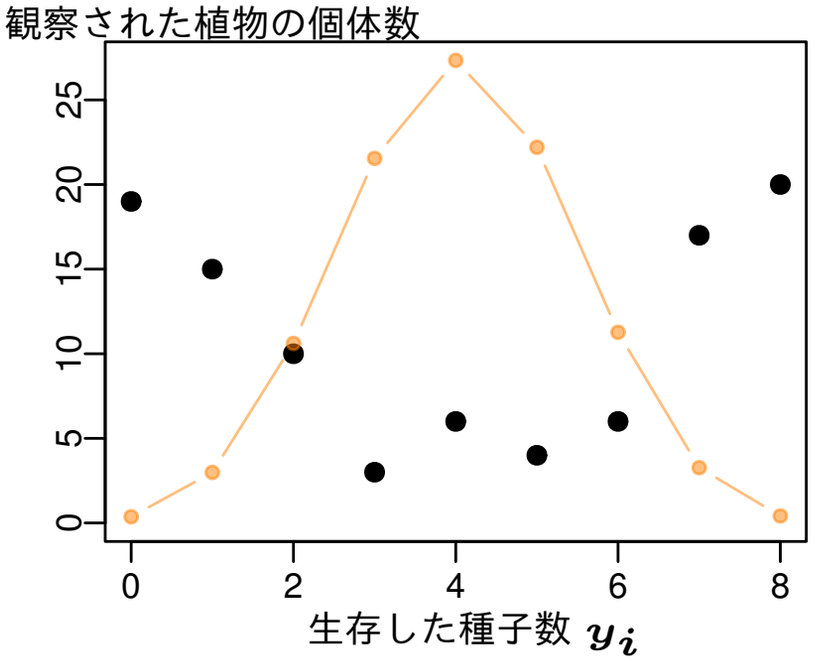


さっきの例題と同じようなデータなのに?

「個体差」 → 過分散 (overdispersion)

極端な過分散の例





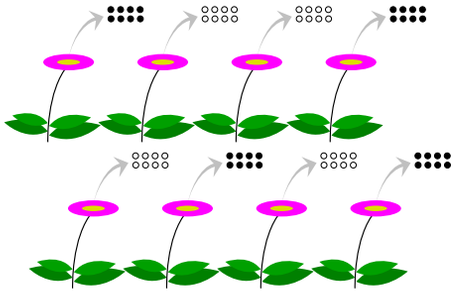
- 種子全体の平均生存確率は 0.5 ぐらいかもしれないが……
- 植物個体ごとに種子の生存確率が異なる: 「個体差」
- 「個体差」があると overdispersion が生じる
- 「個体差」の原因: ?

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

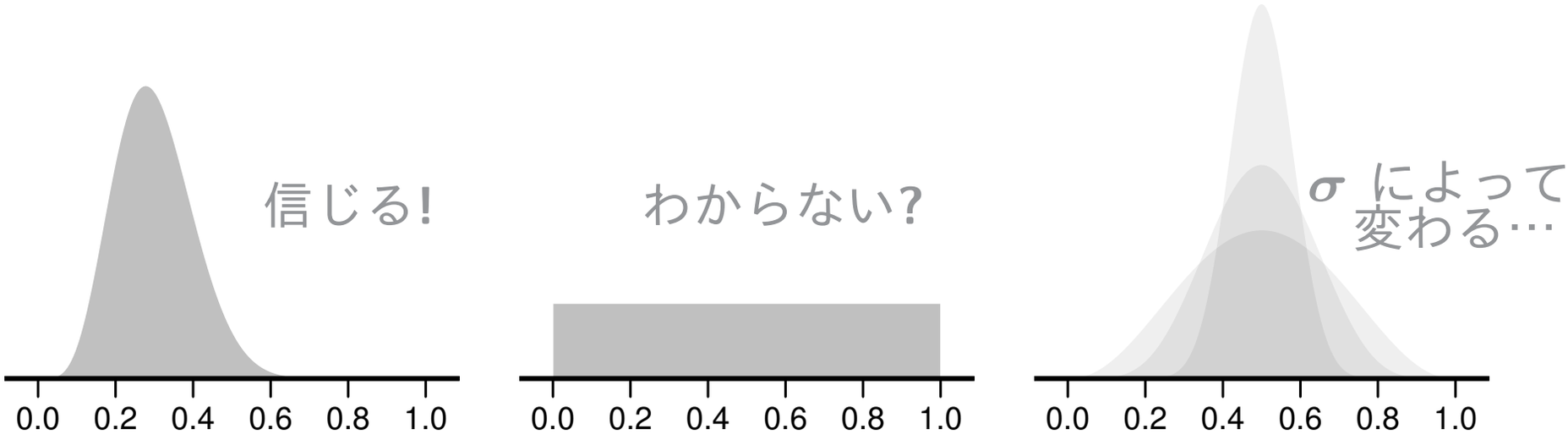


今回の例題では random effects な「個体差」だけをあつかう (説明変数なし)

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?

(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

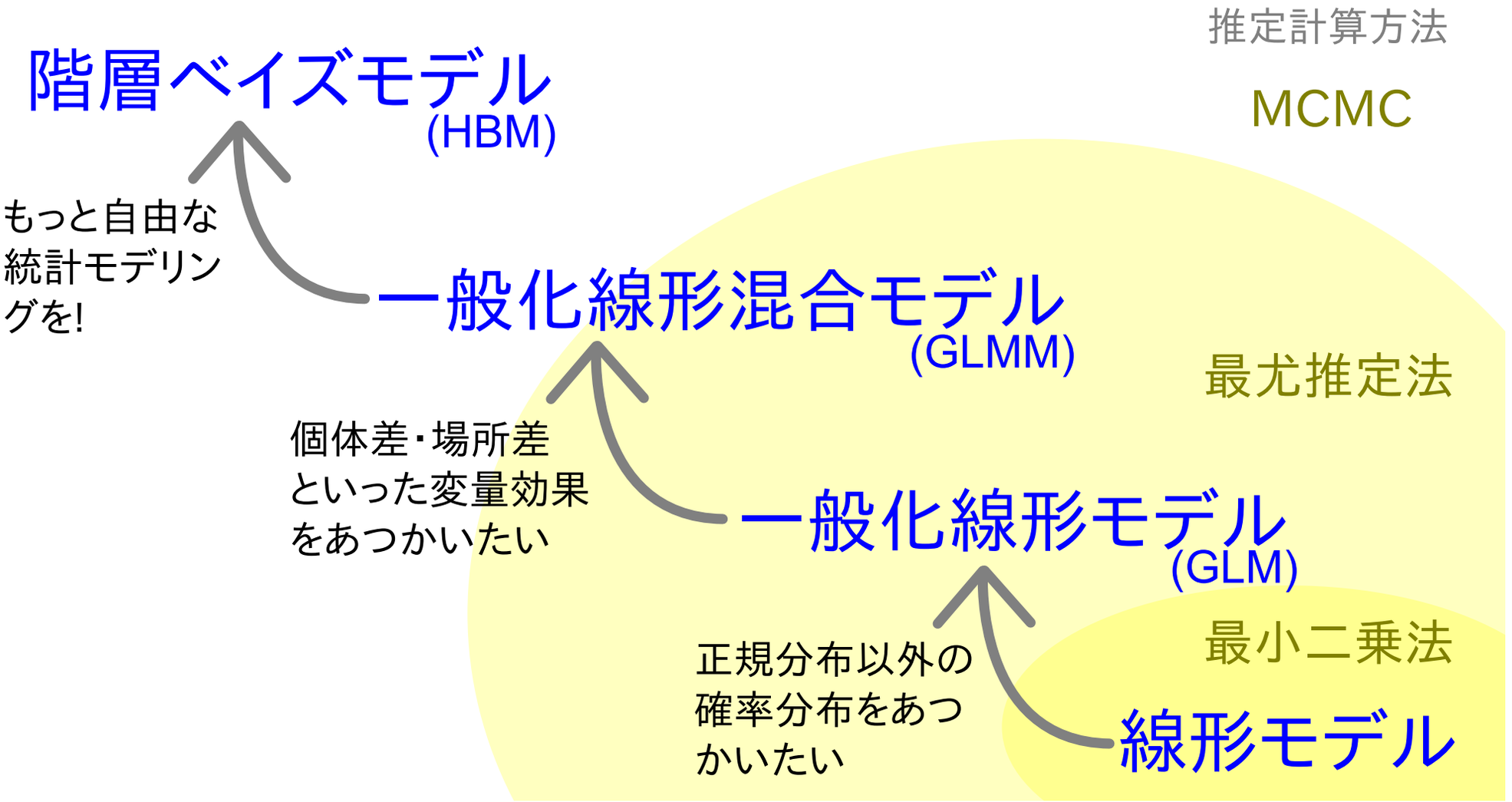


このパラメーターの事前分布は

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



モデリングやりなおし: まず二項分布の再検討

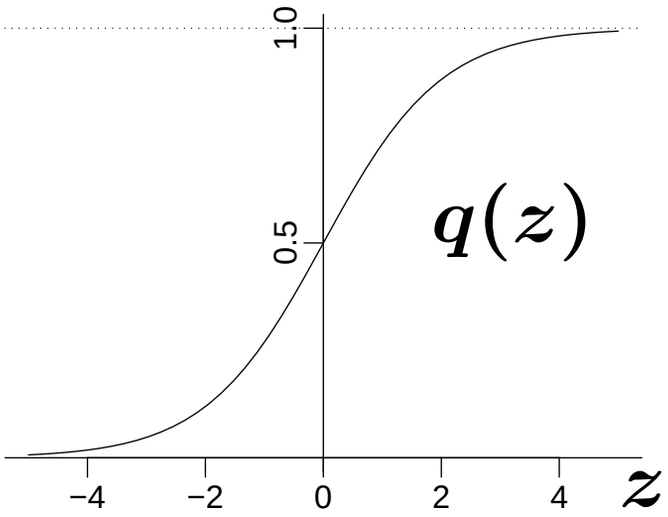
- 生存確率を推定するために 二項分布という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率は二項分布

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

- 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)

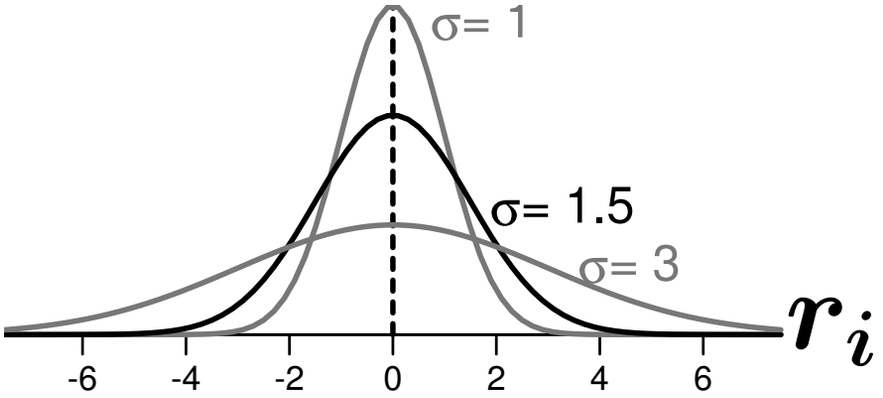
個々の個体差 r_i を最尤推定するのはまずい

- 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

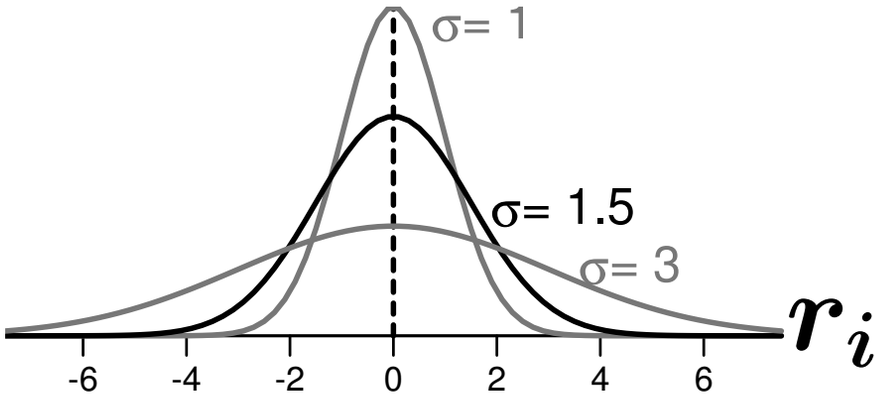
$$p(r_i \mid \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{-r_i^2}{2\sigma^2}\right)$$



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

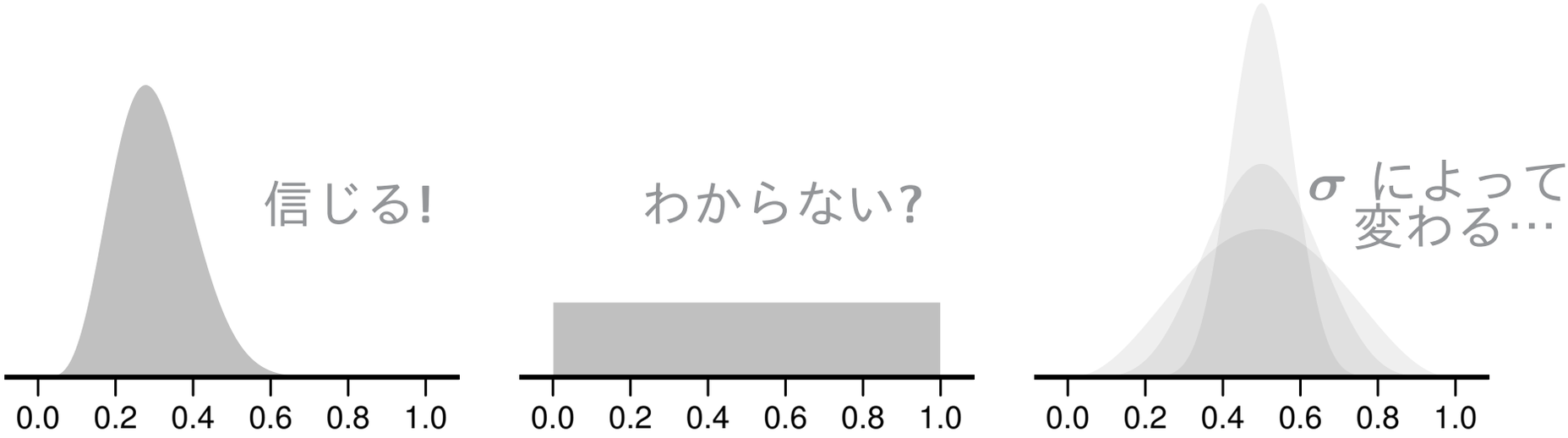
データにあわせて σ が変化する階層的な事前分布



- 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



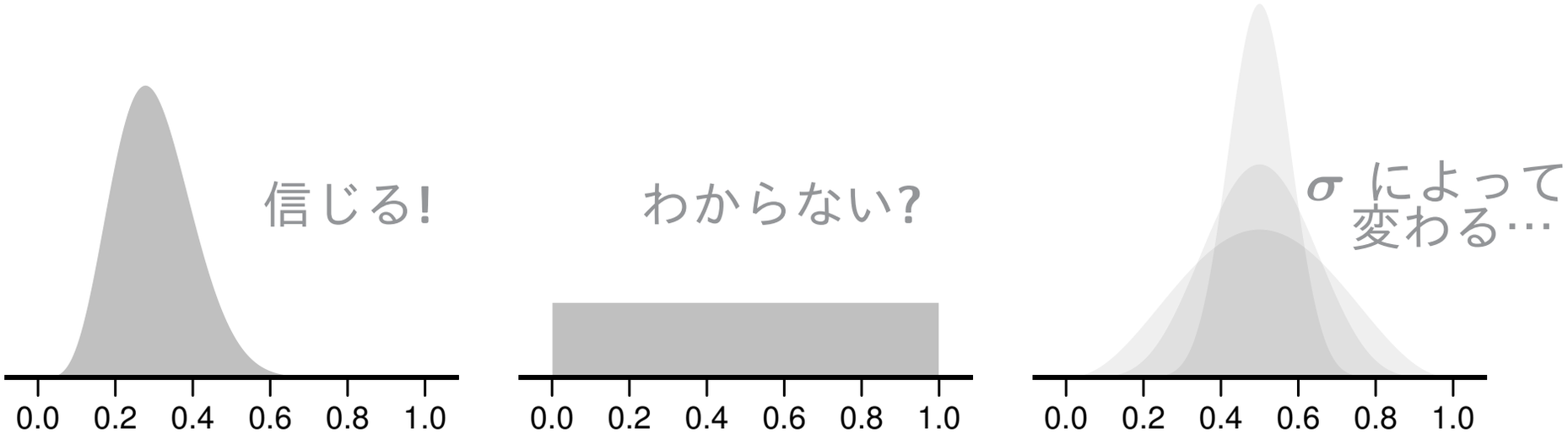
(A) 主観的な事前分布: 「自分の信じるところによれば，r_i たちはこんな分布になる」を表現している.

(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)

(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

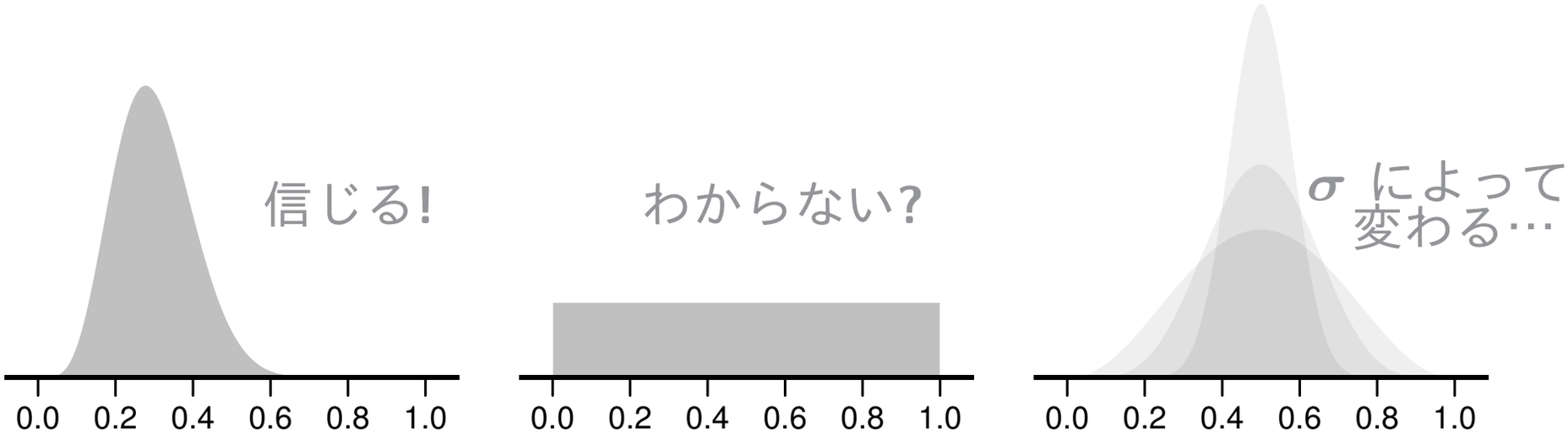


(何か植物たちの統計モデリングをやっているとすると)

- **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)

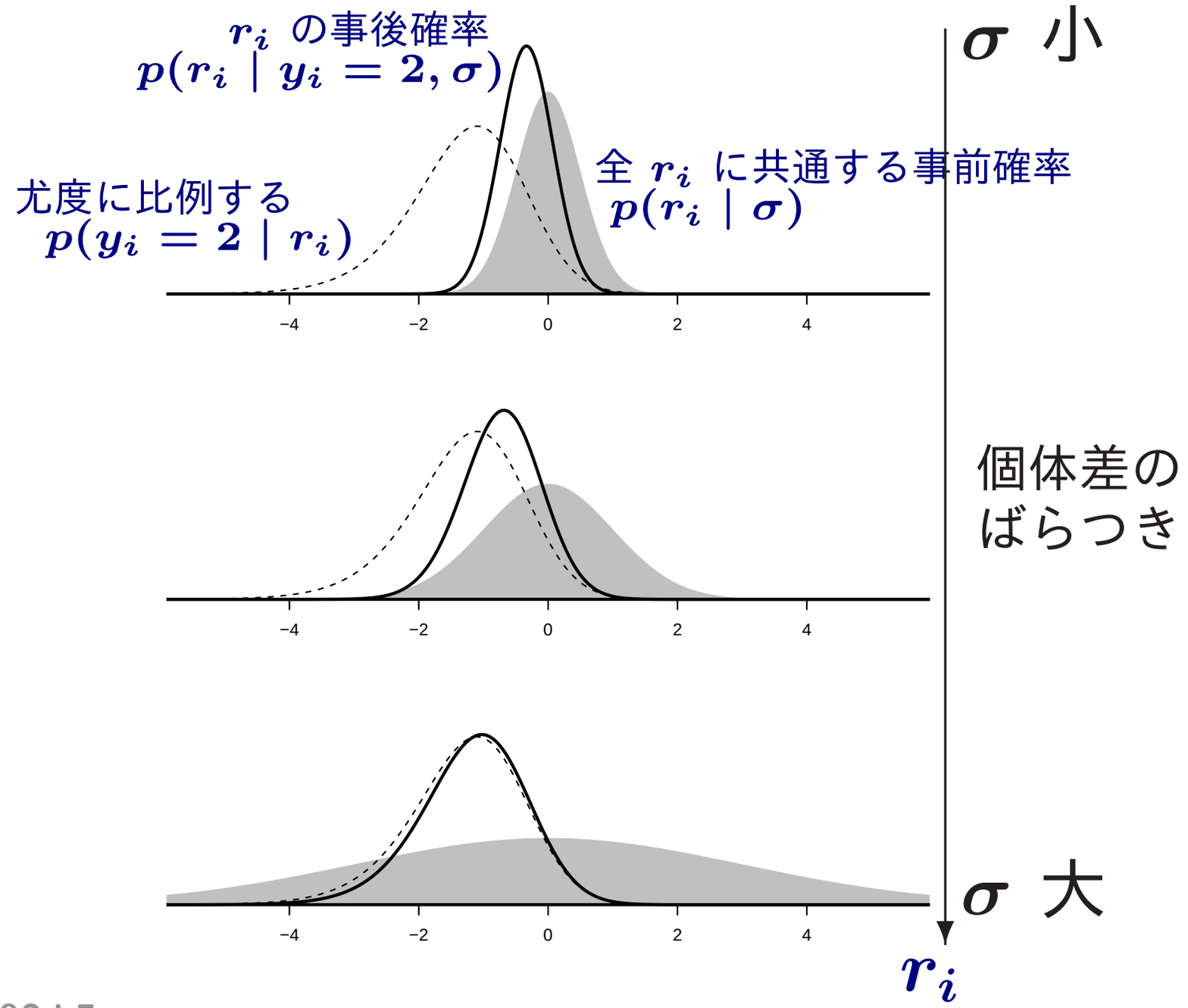
(A) 主観的な事前分布　**(B)** 無情報事前分布　**(C)** 階層的な事前分布



(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

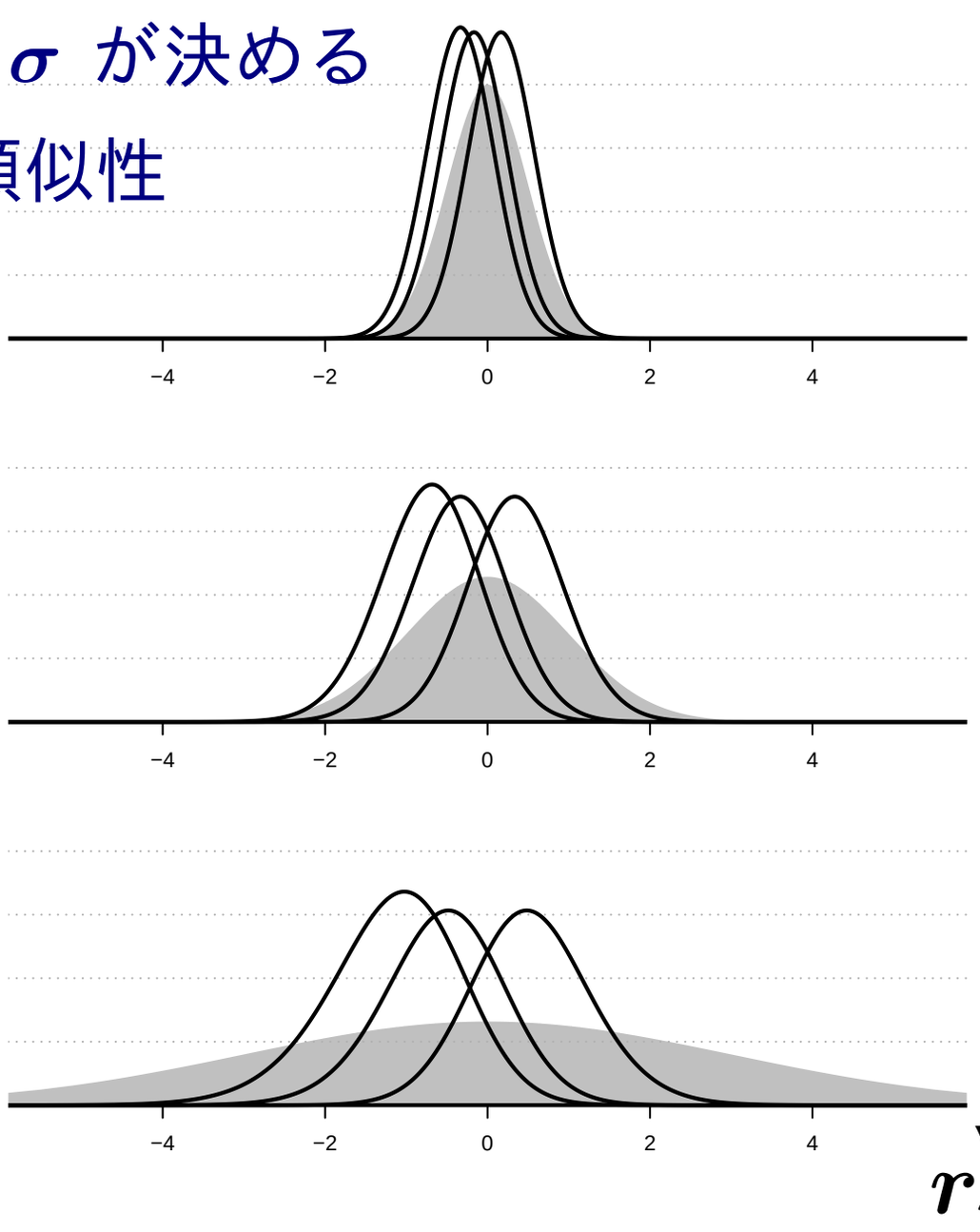
階層的な事前分布と $y_i = 2$ の個体の r_i



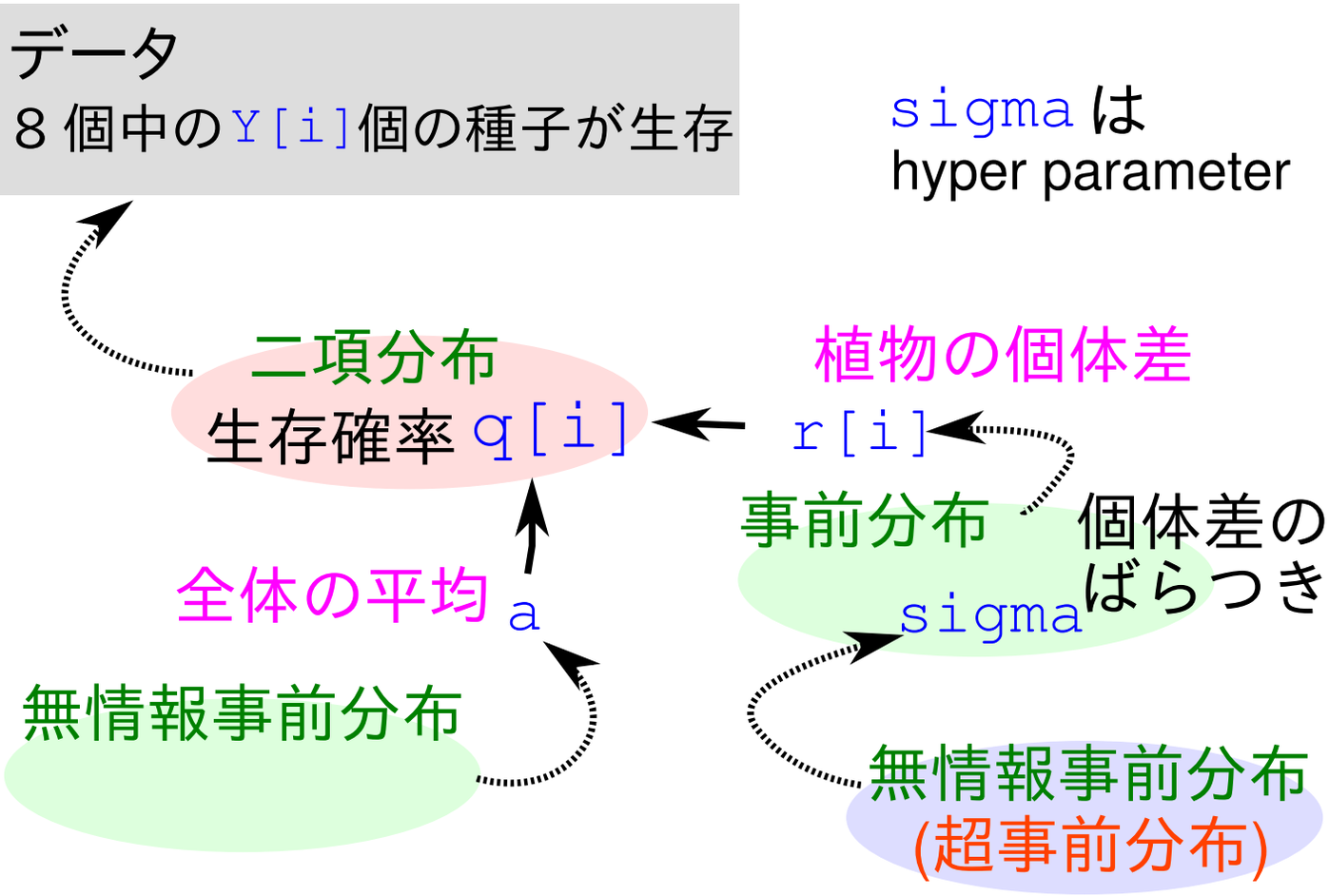
階層的な事前分布と $y_i \in \{2, 3, 5\}$ の個体の r_i

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?

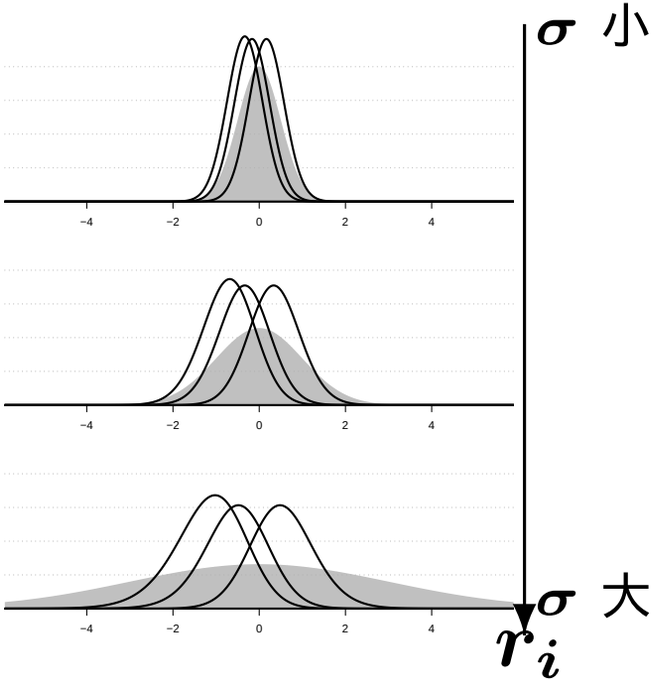


超事前分布 → 事前分布という階層があるから

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」



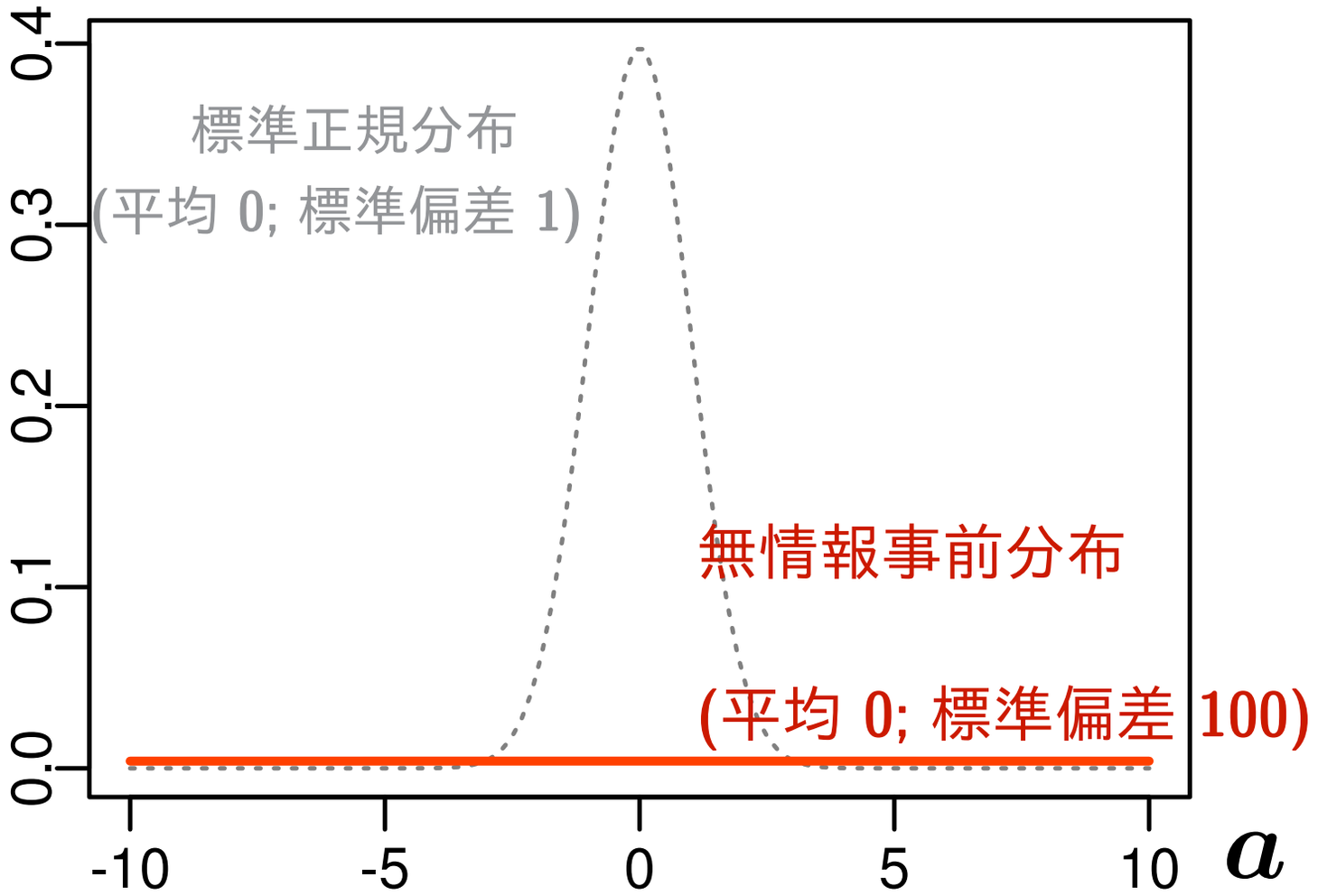
(これらに対して)

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

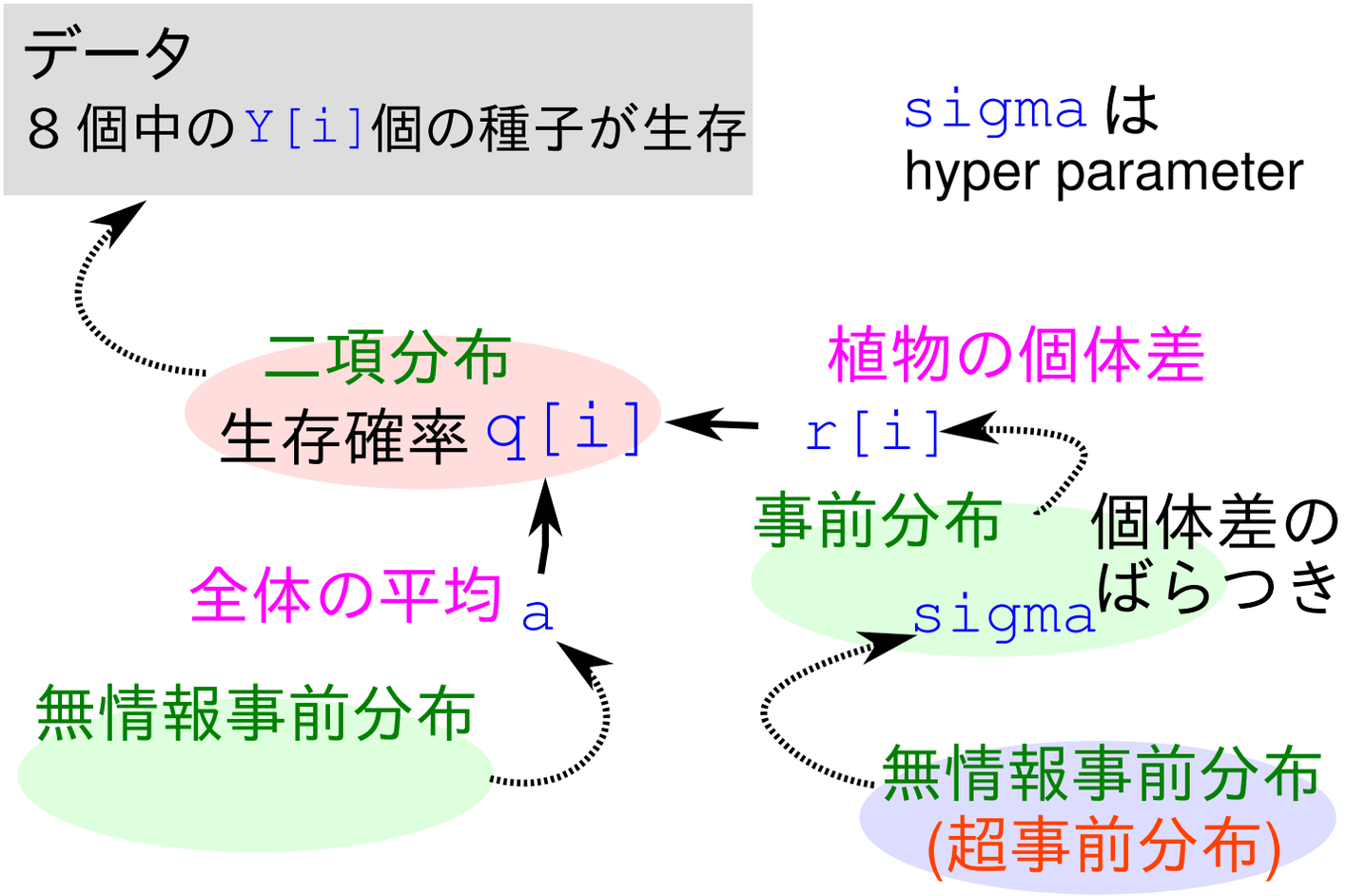
- σ はどのような値をとってもかまわない
- そこで σ の事前分布は 無情報事前分布(non-informative prior) とする
- たとえば一様分布
  - とりあえず，ここでは $0 < \sigma < 10^4$ の一様分布としてみる

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

ベイズモデルのパラメーター

を推定するための

汎用 MCMC ソフトウェア

階層ベイズモデリング，その手順のまとめ

- 観測データを説明できそうな確率分布を選ぶ
- その確率分布の平均・分散などのモデリング
- パラメーターの事前分布を設定する
  - 階層的な事前分布 — 個体差・場所差など
  - 無情報事前分布 — いわゆる「処理の効果」など
- モデリングできたら，事後分布を推定する
  - 例: **MCMC** 計算によって事後分布からのサンプルを得る
- 事後分布を解釈する

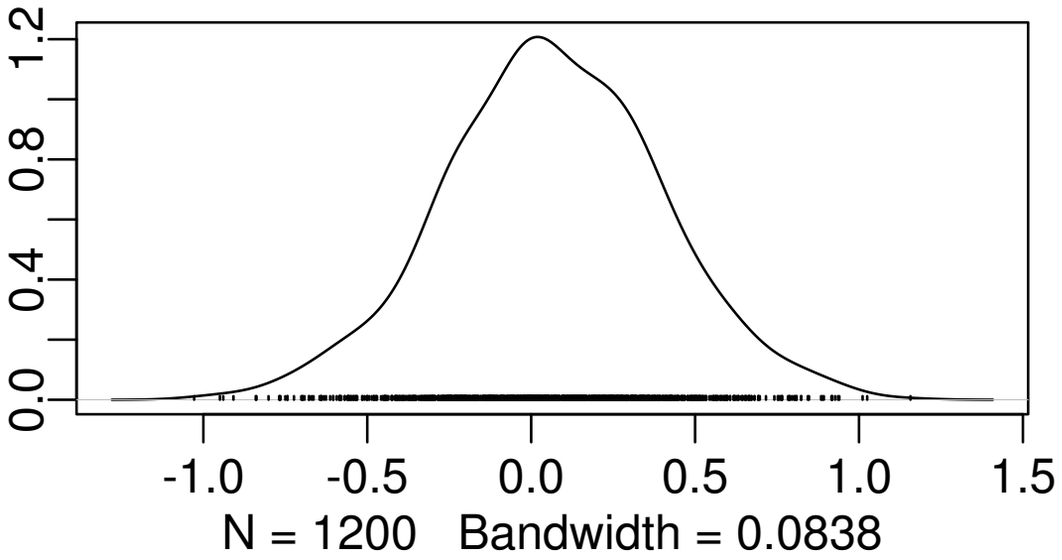
MCMC による事後分布からのサンプリング

- **M**arkov **C**hain **M**onte **C**arlo : 単純な乱数を うまく つかって「あつかいづらい」確率分布からランダムサンプルを得る方法 (アルゴリズム)
- ある種のデータを解析するためには階層ベイズモデルが必要
- そういったベイズモデルを観測データに「あてはめ」てパラメーター推定するためには **MCMC** が役にたつ，ということにしたい (MCMC 利用法のひとつ)

「事後分布からのサンプル」って何の役にたつの?

```
> post.mcmc[,"a"] # 事後分布からのサンプルを表示
 [1] -0.7592 -0.7689 -0.9008 -1.0160 -0.8439 -1.0380 -0.8561 -0.9837
 [9] -0.8043 -0.8956 -0.9243 -0.9861 -0.7943 -0.8194 -0.9006 -0.9513
[17] -0.7565 -1.1120 -1.0430 -1.1730 -0.6926 -0.8742 -0.8228 -1.0440
... (以下略) ...
```

- これらのサンプルの平均値・中央値・95% 区間を調べることで「もと」の事後分布の概要がわかる



どのようなソフトウェアで MCMC 計算するか?

1. 自作プログラム
   - 利点: 問題にあわせて自由に設計できる
   - 欠点: 階層ベイズモデル用の MCMC プログラミング，けっこうめんどう
2. R のベイズな package
   - 利点: 空間ベイズ統計など便利な専用 package がある
   - 欠点: 汎用性，とぼしい
3. 「できあい」の **Gibbs sampler** ソフトウェア
   - 利点: 「原因 $\longrightarrow$ 結果」型の階層ベイズモデルは得意
   - 欠点: それ以外の問題に応用するには……

統計ソフトウェア R

http://www.r-project.org/

R だけで何とかなる: 経験ベイズ法 (1)

今回の例題の事後分布 ($\mathbf{Y} = \{y_i\}$ はデータ)

$$p(a, \{r_i\}, \sigma \mid \mathbf{Y}) \propto \prod_{i=1}^{100} p(y_i \mid q(a + r_i))\ p(a)\ p(r_i \mid \sigma)\ p(\sigma)$$

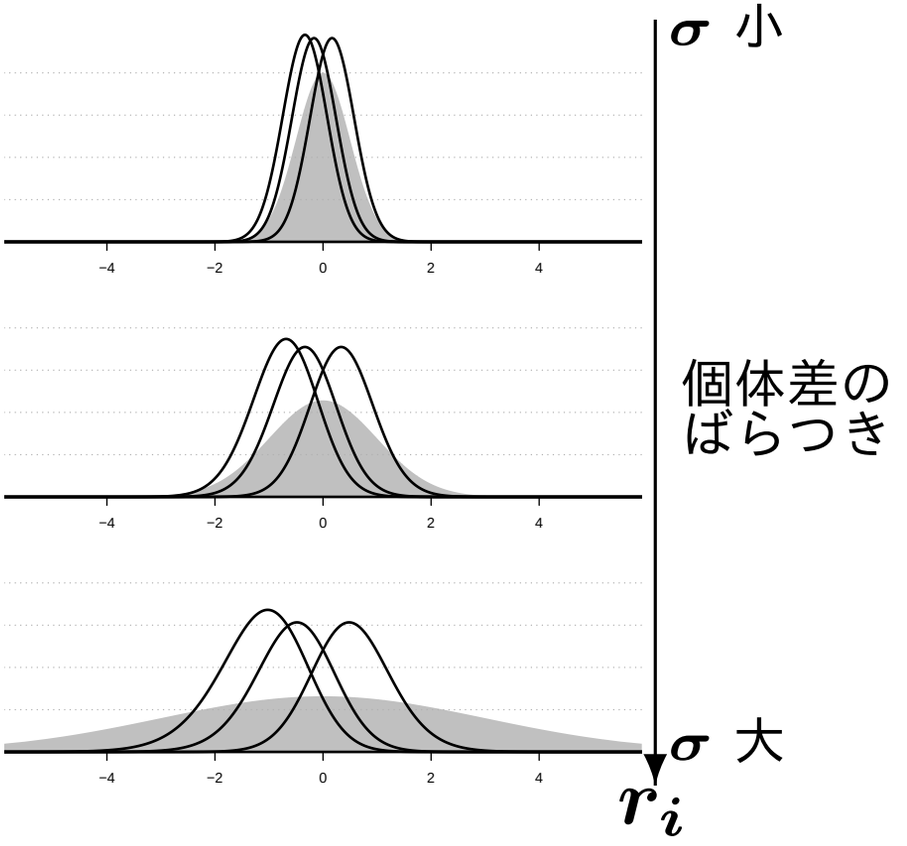
積分で「個体差」 r_i を消して，周辺尤度を定義する

$$L(a, \sigma \mid \mathbf{Y}) = \prod_{i=1}^{100} \int_{-\infty}^{\infty} p(y_i \mid q(a + r_i))\ p(r_i \mid \sigma) dr_i$$

これを最大化する $\hat{a}$ と $\hat{\sigma}$ を推定すればよい

R だけで何とかなる: 経験ベイズ法 (2)

- 周辺尤度最大化って何をやっていることになるのだろうか?
  - 最も良さそうな「『個体差』の幅」を探している
  - 同時に全個体共通の a も探している
- これは一般化線形混合モデル (GLMM) の最尤推定 (教科書の第 7 章を参照)



- R での対処例: `library(glmmML)` の `glmmML()` 関数

```
glmmML(cbind(y, N - y) ~ 1, family = binomial, などなど指定)
```

R だけで何とかなる? ちょっと無理かも……

GLMM は階層ベイズモデルの一部

- R にはいろいろな GLMM 推定関数が準備されている
  - `library(glmmML)` の `glmmML()`
  - `library(lme4)` の `lmer()`
  - `library(nlme)` の `nlme()` (正規分布のみ)
  - `library(MCMCglmm)` の `MCMCglmm()`
- しかしながら「めんどうな状況」では……ちょっと無理があるかも (推定計算がうまくいかない)

「めんどうな状況」では MCMC が有用である

この例題は簡単すぎるので経験ベイズ法で対処できる
しかし，現実的なデータ解析のための
複雑な階層ベイズモデルは MCMC で推定するほかない

- 複数の random effects (個体差・ブロック差・縦断的データ・……)
- 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
- 「隠れた」状態をあつかうモデル
  - 例: 「欠側値を補う」処理

Gibbs sampling とは何か?

- MCMC アルゴリズムのひとつ
- 複数のパラメーターの MCMC サンプリングに使う
- 例: パラメーター β_1 と β_2 の Gibbs sampling
  1. β_2 に何か適当な値を与える
  2. β_2 の値はそのままにして，その条件のもとでの β_1 の MCMC sampling をする
  3. β_1 の値はそのままにして，その条件のもとでの β_2 の MCMC sampling をする
  4. 2. – 3. をくりかえす
- 教科書の第 9 章の例題で説明

種子の生存確率の問題の場合: 事後分布

$$p(a, \{r_i\}, \sigma \mid \text{データ}) = \frac{\prod_{i=1}^{100} p(y_i \mid q(a + r_i))\, p(a)\, p(r_i \mid \sigma)\, p(\sigma)}{\iint \cdots \int (\text{分子 } \uparrow \quad \text{そのまま})\, dr_i\, d\sigma\, da}$$

分母は何か定数になるので

$$p(a, \{r_i\}, \sigma \mid \text{データ}) \propto \prod_{i=1}^{100} p(y_i \mid q(a + r_i))\, p(a)\, p(r_i \mid \sigma)\, p(\sigma)$$

$p(a, \{r_i\}, \sigma \mid \text{データ})$

$\prod_{i=1}^{100} p(y_i \mid q(a + r_i))$

事前分布たち: $p(a)\, p(r_i \mid \sigma)\, p(\sigma)$

種子の生存確率の問題の場合: Gibbs sampling

サンプリングの対象とするパラメーター以外は値を固定する

$$
\begin{aligned}
p(a \mid \cdots) &\propto \prod_{i=1}^{100} p(y_i \mid q(a + r_i))\, p(a) \\
p(\sigma \mid \cdots) &\propto \prod_{i=1}^{100} p(r_i \mid \sigma)\, p(\sigma) \\
p(r_1 \mid \cdots) &\propto p(y_1 \mid q(a + r_1))\, p(r_1 \mid \sigma) \\
p(r_2 \mid \cdots) &\propto p(y_2 \mid q(a + r_2))\, p(r_2 \mid \sigma) \\
&\vdots \\
p(r_{100} \mid \cdots) &\propto p(y_{100} \mid q(a + r_{100}))\, p(r_{100} \mid \sigma)
\end{aligned}
$$

便利な “BUGS” 汎用 Gibbs sampler たち

- BUGS でベイズモデルを記述できるソフトウェア (と久保の蛇足な論評):
  - WinBUGS — 評: 「とりあえず，これしかない」って現状?
  - OpenBUGS — 評: ココロザシは高いんでしょうけど，どうなってんの?
  - JAGS — 評: じりじりと発展中，がんばってください
- リンク集:
  `http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/ce/BayesianMcmc.html`

BUGS 言語: ベイズモデルを記述する言語

- Spiegelhalter et al. 1995. BUGS: Bayesian Using Gibbs Sampling version 0.50.

```
model { # BUGS コードで定義された階層ベイズモデルの例
    for (i in 1:N.sample) {
        Y[i] ~ dbin(q[i], N[i])
        logit(q[i]) <- a + r[i]
    }
    a ~ dnorm(0, 1.0E-4)
    for (i in 1:N.sample) {
        b[i] ~ dnorm(0, tau)
    }
    tau <- 1 / (sigma * sigma)
    sigma ~ dunif(0, 1.0E+4)
}
# あとで説明
```

なんとなく使われ続けている WinBUGS 1.4.3

- おそらく世界でもっともよく使われている Gibbs sampler
- **BUGS** 言語の実装
- 2004-09-13 に最新版 (ここで開発停止 → OpenBUGS)
- ソースなど非公開，無料，ユーザー登録不要
- Windows バイナリーとして配布されている
  - Linux 上では WINE 上で動作
  - MacOS X 上でも Darwine など駆使すると動くらしい
- へンな GUI (Linux ユーザーの偏見)
- R ユーザーにとっては R2WinBUGS が快適 (後述)

WinBUGS は Gibbs sampling しているのか?

よくある質問: WinBUGS は Gibbs sampling してるの?

- 事前分布・尤度の組みあわせによって，サンプリング方法を自動的に変更している
  - 共役事前分布がない場合は，さまざまな数値的な方法を使う
- ユーザーはそのあたりをまったく指定する必要なし (指定できない)

くわしくは WinBUGS のマニュアル読みましょう

`http://www.google.com/search?q=winbugs+user+manual`

DJ Spiegelhalter, A Thomas, NG Best, D Lunn. 2003. WinBUGS version 1.4 user manual. MRC Biostatistics Unit, Cambridge.

Continuous target distribution	Method
Conjugate	Direct sampling using standard algorithms
Log-concave	Derivative-free adaptive rejection sampling (Gilks, 1992)
Restricted range	Slice sampling (Neal, 1997)
Unrestricted range	Current point Metropolis

Discrete target distribution	Method
Finite upper bound	Inversion
Shifted Poisson	Direct sampling using standard algorithm

WinBUGS を R で使う

今回説明する WinBUGS の使いかた (概要)

- WinBUGS を R から使う
  - R から WinBUGS をよびだし「このベイズモデルのパラメーターの事後分布をこういうふうに MCMC 計算してね」と指示する
  - WinBUGS が得た事後分布からのサンプルセットを R がうけとる
- R の中では `library(R2WinBUGS)` package を使う R2WBwrapper 関数 (久保作) を使う

なんで WinBUGS を R 経由で使うの?

- WinBUGS のユーザーインターフェイスを使うのがめんどうだから
- どうせ解析に使うデータは R で準備するから
- どうせ得られた出力は R で解析・作図するから
- R には R2WinBUGS という (機能拡張用) package があって，R から WinBUGS を使うしくみが準備されてるから
  - R 上で `install.packages("R2WinBUGS")` でインストールできる

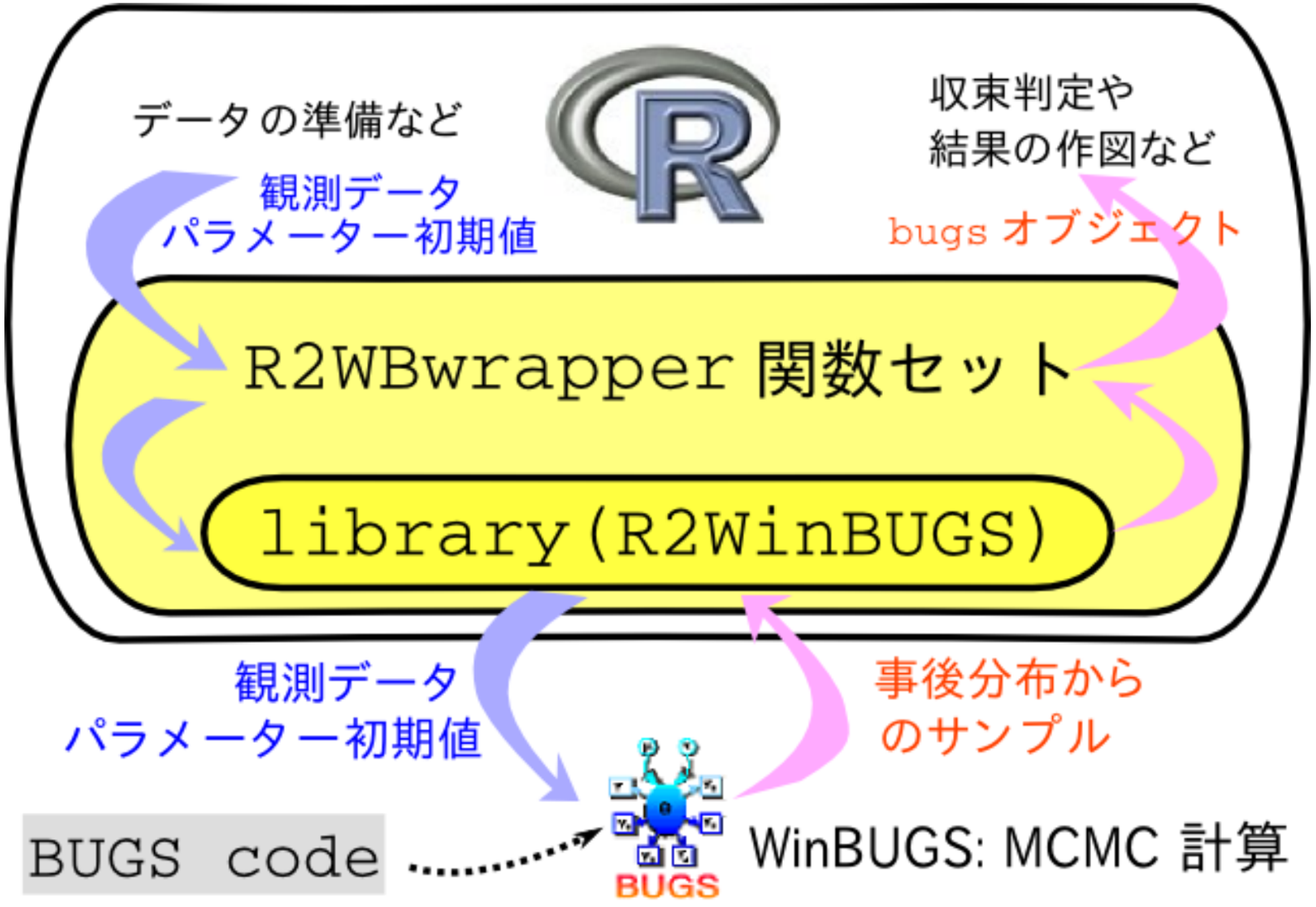
なんで R2WinBUGS をラップして使うの?

- R2WinBUGS 直接利用がめんどうだから
  - モデルをちょっと変更したらあちこち書きなおさないといけない
  - R2WBwrapper を使うとそのあたりがかなりマシになる
- Linux と Windows で「呼びだし」方法がびみょーに異なるため
  - R2WBwrapper を使うと自動的に OS にあわせた WinBUGS よびだしをする

R2WBwrapper 経由で WinBUGS を使う (1)

1. BUGS 言語でかかれた `model` ファイルを準備する
2. R2WBwrapper 関数を使う R コードを書く
3. R 上で 2. を実行
4. 出力された結果が `bugs` オブジェクトで返される
5. これを `plot()` したり `summary()` したり……オブジェクトに変換して，いろいろ事後分布の図なんかを描いてみたり……

R2WBwrapper 経由で WinBUGS を使う (2)



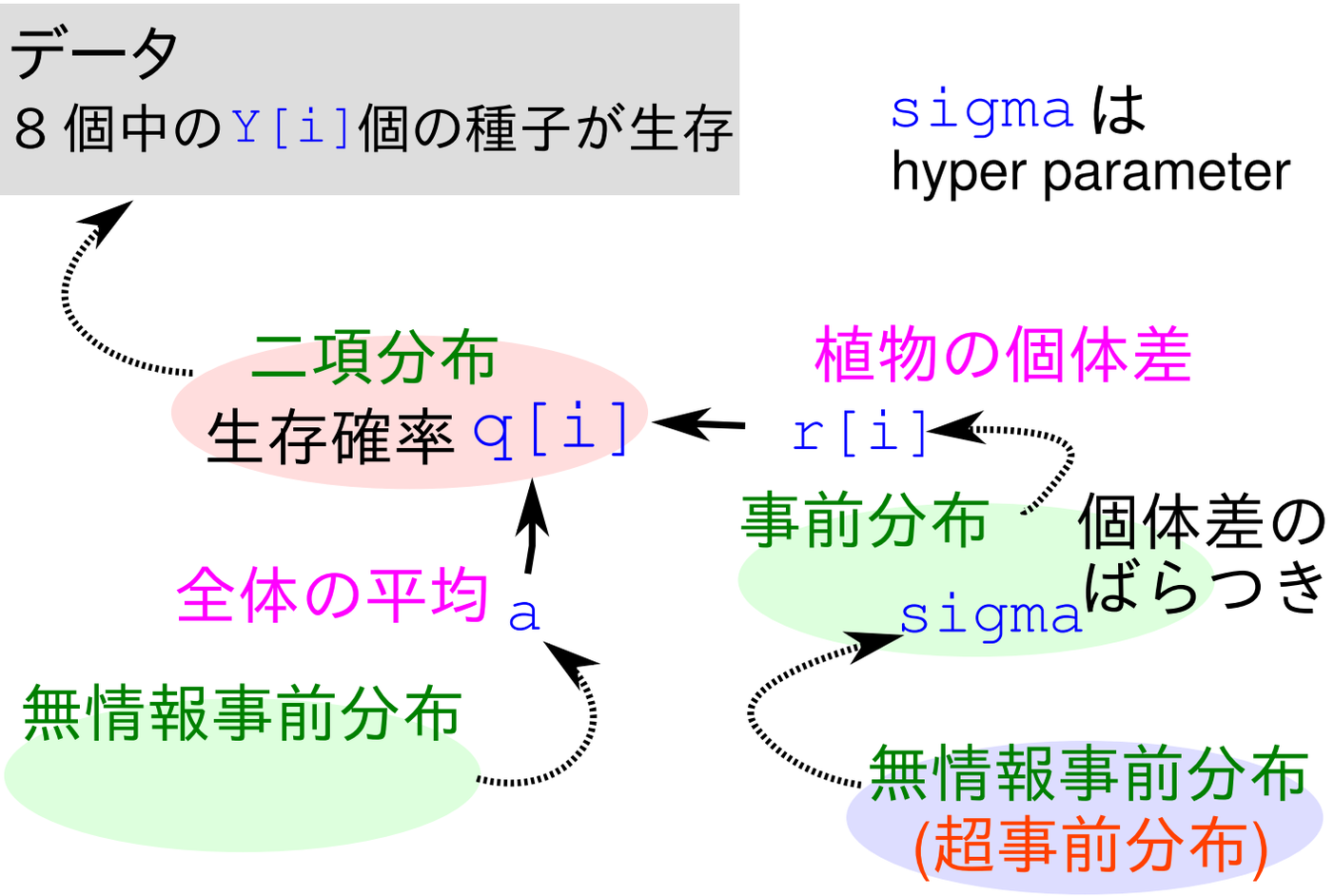
「生存確率の推定」例題を

WinBUGS で推定

「生存確率の推定」例題を WinBUGS に推定させる手順

1. 生存確率の階層ベイズモデルの構築する
2. それを BUGS 言語でかく (model.bug.txt)
3. R2WBwrapper 関数を使って R コードを書く (runbugs.R)
4. R 上で runbugs.R を実行 (source(runbugs.R) など)
5. 出力された結果が bugs オブジェクトで返される

生存確率の階層ベイズモデルってどんなでしたっけ?



$$p(a, \{r_i\}, \sigma \mid \text{データ}) \propto \prod_{i=1}^{100} p(\text{データ} \mid q(a + r_i))\, p(a)\, p(r_i \mid \sigma)\, p(\sigma)$$

事前分布の設定方法

- 階層的な (hierarchical) 事前分布にする
  - random effects 的な個体差・場所差
- 無情報 (non-informative) 事前分布にする
  - 切片や説明変数の係数など fixed effects 的なパラメーター
- 主観的な (subjective) 事前分布にする
  - あまりおすすめできない
  - (反復測定していないときの) 測定時のエラーとか

生存確率の階層ベイズモデルを BUGS 言語で

ファイル model.bug.txt の内容 (一部簡略化)

```
model{
    for (i in 1:N.sample) {
        Y[i] ~ dbin(q[i], 8)   # 観測値との対応
        logit(q[i]) <- a + r[i]   # 生存確率 q[i]
    }
    a ~ dnorm(0, 1.0E-4)          # 「切片」
    for (i in 1:N.sample) {
        r[i] ~ dnorm(0, tau)      # 個体差
    }
    tau <- 1 / (sigma * sigma)    # tau = 1 / variance
    sigma ~ dunif(0, 1.0E+4)      # 個体差のばらつき
}
```

BUGS 言語について，いくつか

- BUGS 言語は普通の意味でのプログラミング言語ではない
  - 「式」を列挙しているだけ，と考える
  - 「式」の並び順を変えても計算結果は (ほぼ) 変わらない
- 各パラメーターは二種類の「関係」それぞれで一度ずつ定義できる (二度以上は定義できない)
  1. ~ sthochastic relationship
  2. <- deterministic relationship

R2WBwrapper な R コード runbugs.R (前半部)

観測データの設定

```
d <- read.csv("data.csv") # 観測データよみこみ

clear.data.param() # いろいろ初期化
set.data("N.sample", nrow(d)) # データ数
set.data("Y", d$Y)            # 生存種子数
```

R2WBwrapper な R コード runbugs.R (後半部)

パラメーターの初期値の設定など

```
set.param("a", 0)      # 「切片」
set.param("sigma", 1) # 個体差のばらつき
set.param("r", rep(0, N.sample))  # 個体差
set.param("q", NA)     # 生存確率

post.bugs <- call.bugs(      # WinBUGS よびだし
    file = "model.bug.txt",
    n.iter = 1300, n.burnin = 100, n.thin = 3
)
```

WinBUGS に指示した事後分布のサンプリング

```
post.bugs <- call.bugs(      # WinBUGS よびだし
     file = "model.bug.txt",
     n.iter = 1300, n.burnin = 100, n.thin = 3
)
```

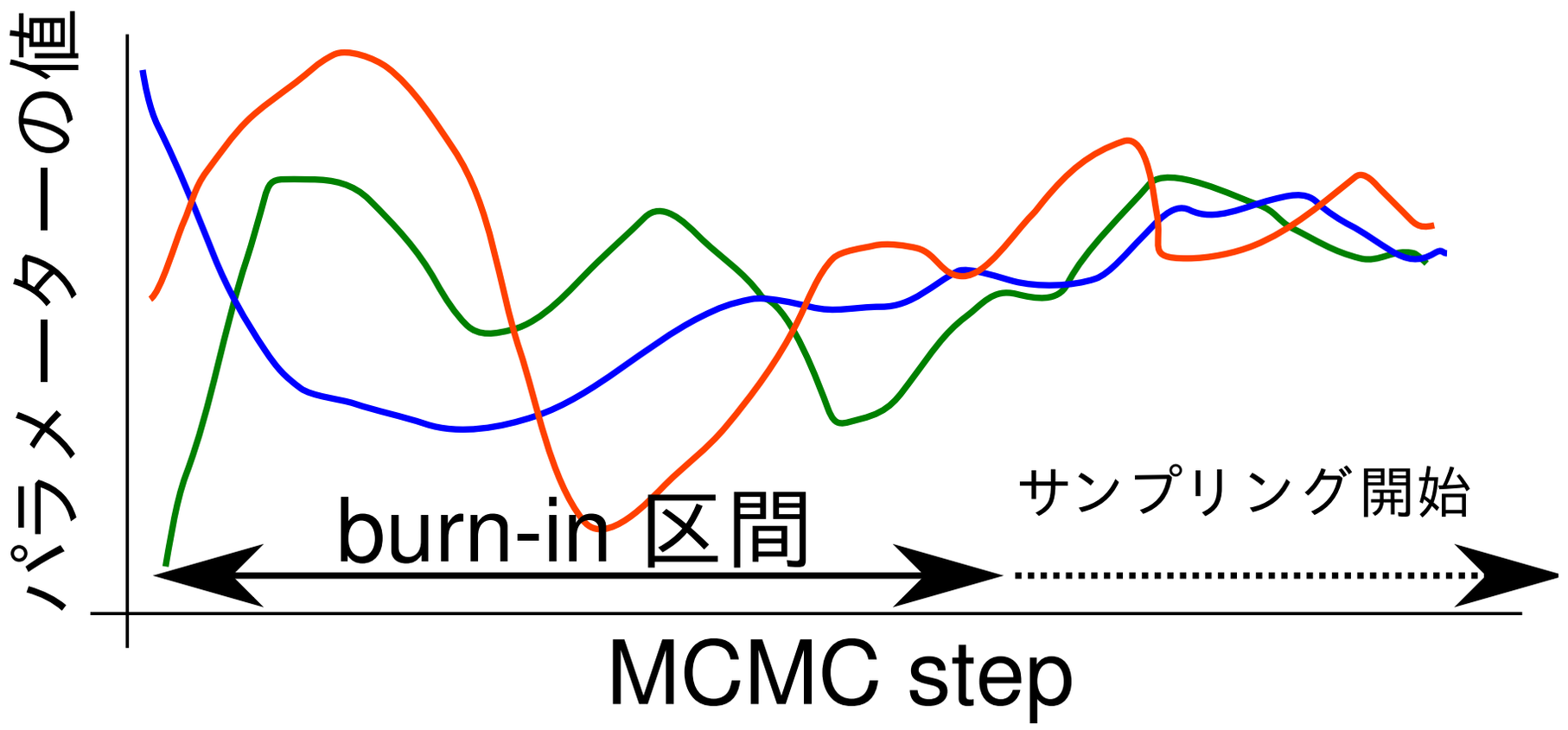
- じつは default では独立に (並列に)

  (n.chains = 3) MCMC sampling せよと指定されている (収束性をチェックするため)

- ひとつの chain の長さは 1300 step (n.iter = 1300)
- 最初の 100 step は捨てる(n.burnin = 100)
- 101 から 1300 step まで 3 step おきに値を記録する (n.thin = 5)

このあたりの設定はデータ・統計モデルによって変わる

“burn-in”: MCMC の最初のほうを捨てる

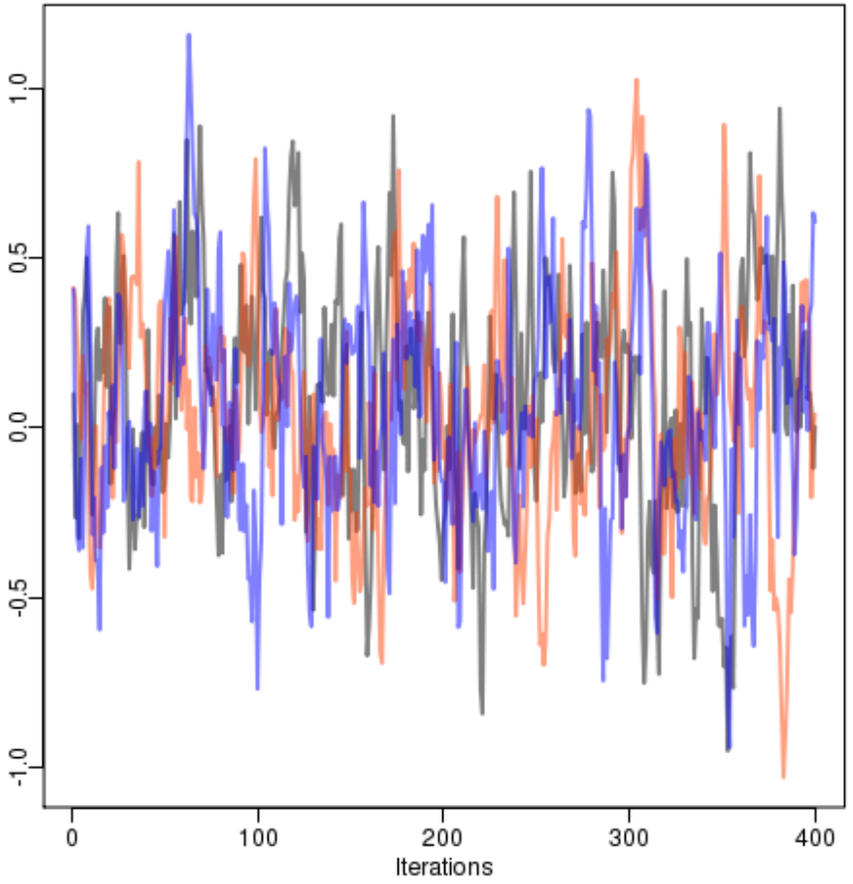


で，実際に動かすには?

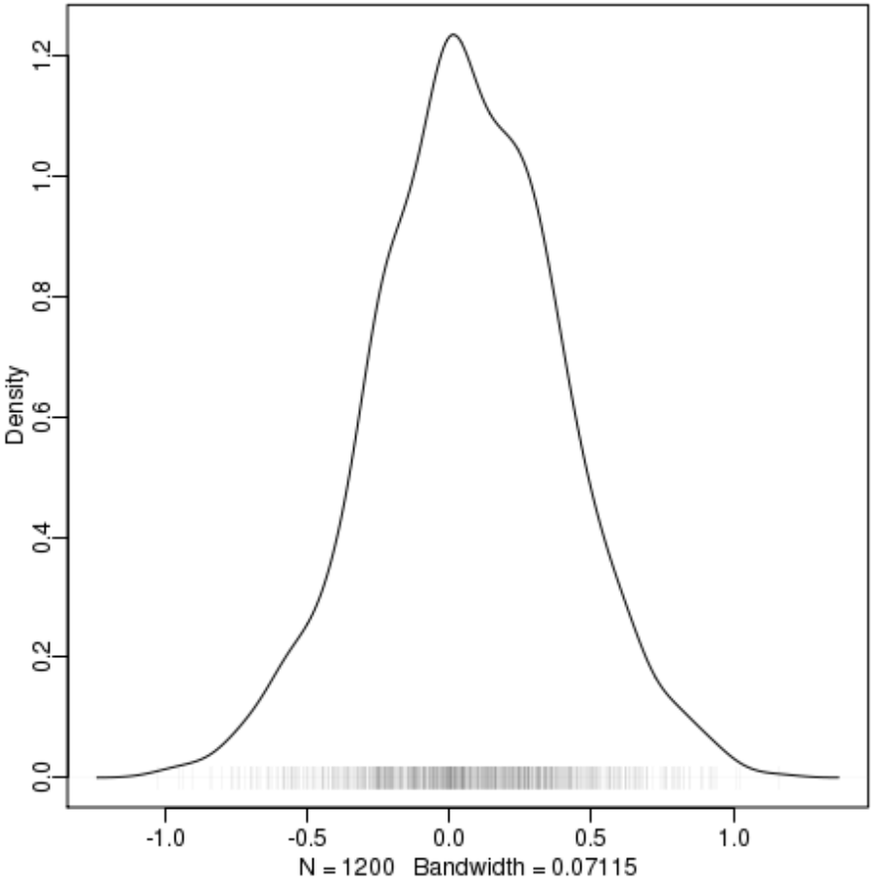
- たとえば，R 上で `source("runbugs.R")` とか
- すると WinBUGS が起動して MCMC sampling をはじめる
- この例題は簡単なのですぐに計算が終了する (WinBUGS 内で図などが表示される)
- 手動で WinBUGS を終了する
- すると WinBUGS が得た結果が R にわたされ，`post.bugs` というオブジェクトにそれが格納される

事後分布のサンプルを R で調べる

a のサンプリングの様子



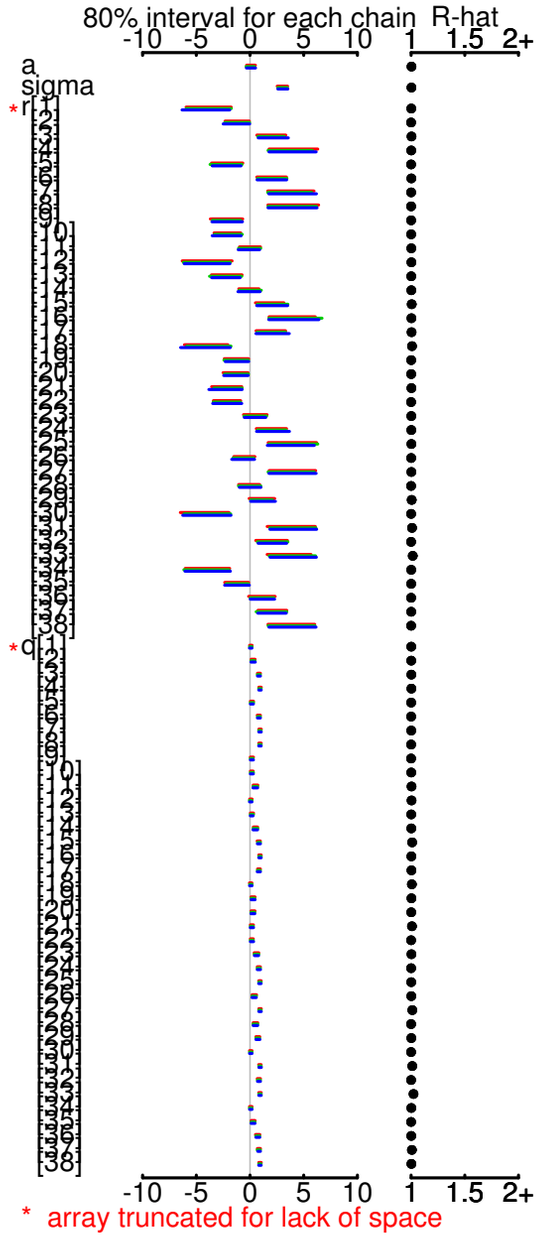
a の事後確率密度の推定

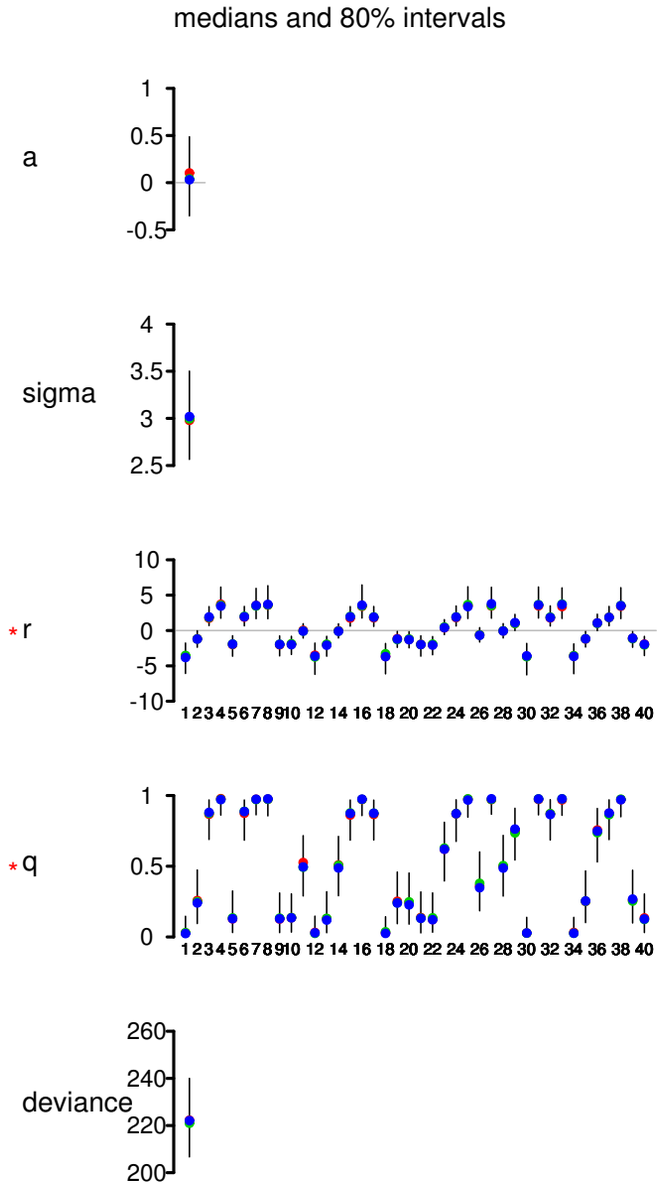


bugs オブジェクトの post.bugs を調べる (1)

- `plot(post.bugs)` → 次のページ, 実演表示
- `R-hat` は **Gelman-Rubin** の収束判定用の指数
  - $\hat{R} = \sqrt{\dfrac{\hat{\mathrm{var}}^{+}(\psi|y)}{W}}$
  - $\hat{\mathrm{var}}^{+}(\psi|y) = \dfrac{n-1}{n}W + \dfrac{1}{n}B$
  - Gelman et al. 2004. Bayesian Data Analysis. Chapman & Hall/CRC

/kubo/public_html/stat/2010/ism/winbugs/model.bug.txt", fit using WinBUGS, 3 chains, each with 1300 iteratior





bugs オブジェクトの post.bugs を調べる (2)

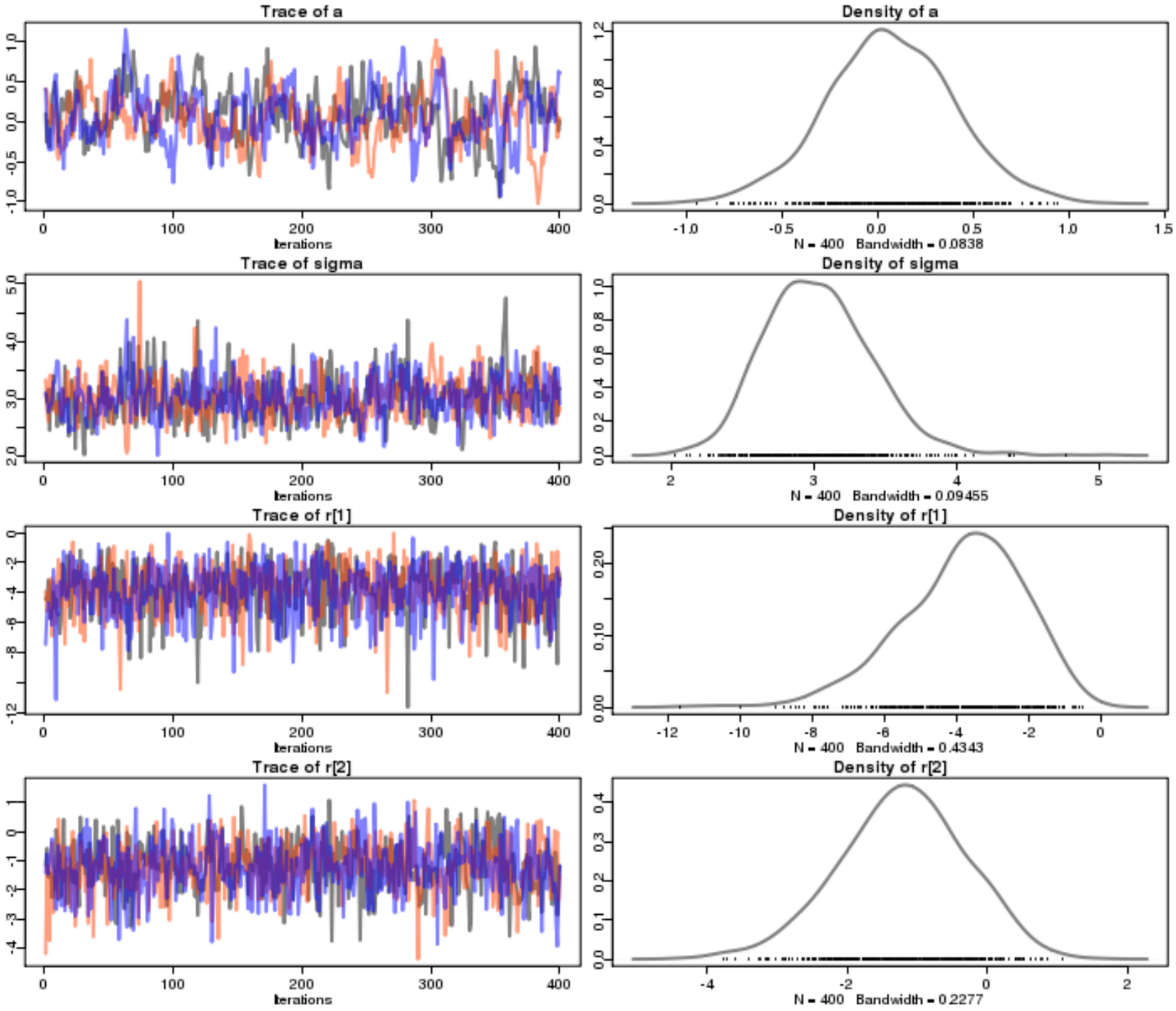
- `print(post.bugs, digits.summary = 3)`
- 事後分布の 95% 信頼区間などが表示される

	mean	sd	2.5%	25%	50%	75%	97.5%	Rhat	n.eff
a	0.031	0.357	-0.718	-0.187	0.041	0.268	0.682	1.034	72
sigma	3.060	0.376	2.365	2.807	3.029	3.288	3.830	1.002	1200
r[1]	-3.890	1.903	-8.238	-4.918	-3.514	-2.546	-1.174	1.001	1200
r[2]	-1.190	0.905	-3.137	-1.763	-1.159	-0.559	0.438	1.007	290
r[3]	2.062	1.128	0.185	1.296	1.931	2.730	4.611	1.002	1200
r[4]	3.985	1.860	1.058	2.635	3.745	5.105	8.520	1.021	130
r[5]	-2.049	1.077	-4.458	-2.679	-1.971	-1.276	-0.255	1.008	270
r[6]	1.995	1.061	0.137	1.266	1.922	2.629	4.300	1.002	900
r[7]	3.886	1.765	1.144	2.664	3.583	4.894	8.223	1.008	320
r[8]	3.862	1.763	1.142	2.590	3.591	4.814	7.993	1.011	330
r[9]	-2.093	1.136	-4.532	-2.788	-1.978	-1.313	-0.130	1.003	540
r[10]	-1.993	1.082	-4.358	-2.631	-1.905	-1.250	-0.158	1.000	1200
r[11]	-0.049	0.786	-1.654	-0.555	-0.032	0.466	1.462	1.006	320
r[12]	-3.849	1.788	-8.204	-4.874	-3.547	-2.598	-1.144	1.001	1200
r[13]	-2.005	1.115	-4.593	-2.640	-1.908	-1.254	-0.069	1.001	1200

mcmc.list クラスに変換して作図

- `post.list <- to.list(post.bugs)`
- `plot(post.list[,1:4,], smooth = F)`

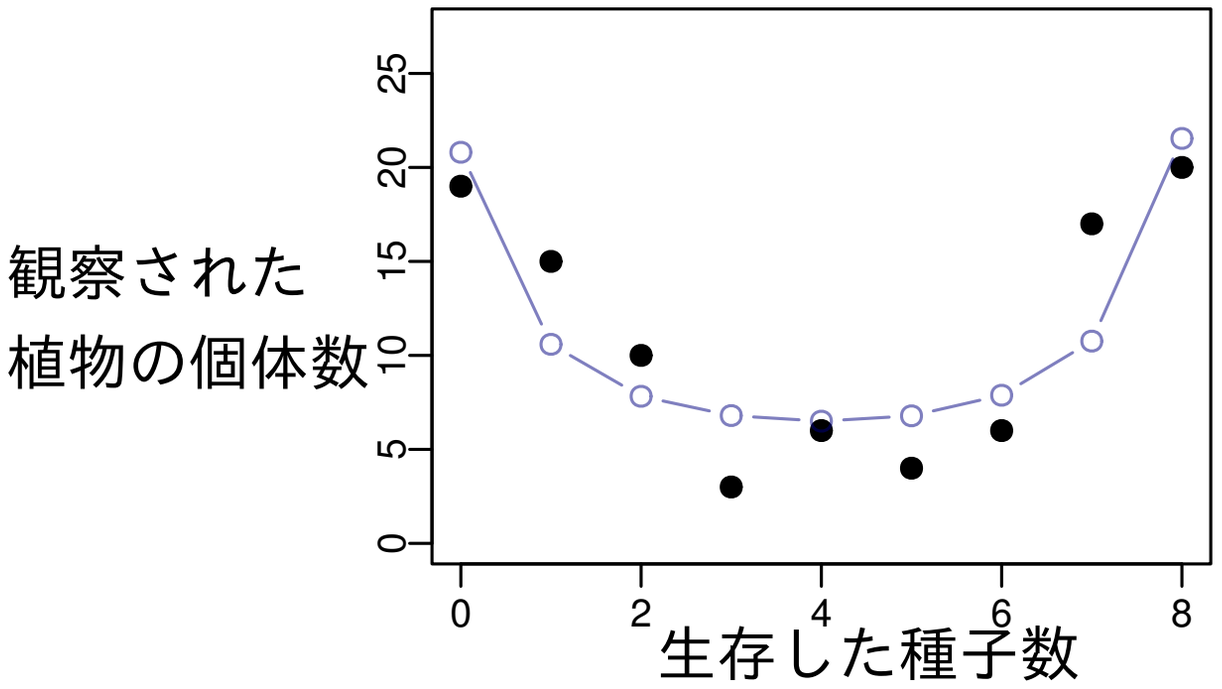
→ 次のページ, 実演表示


Trace of a
Density of a
N = 400 Bandwidth = 0.0838
Trace of sigma
Density of sigma
N = 400 Bandwidth = 0.09455
Trace of r[1]
Density of r[1]
N = 400 Bandwidth = 0.4343
Trace of r[2]
Density of r[2]
N = 400 Bandwidth = 0.2277
Iterations

mcmc クラスに変換して作図

- `post.mcmc <- to.mcmc(post.bugs)`
- これは `matrix` と同じようにあつかえるので，作図に便利

例: 推定された事後分布に基づく予測



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**

今日，説明したこと

1. **GLM は階層ベイズモデル化する**
2. **MCMC をどんなソフトウェアで動かす?**

   まあ，**WinBUGS** + **R** が無難ではないでしょうか

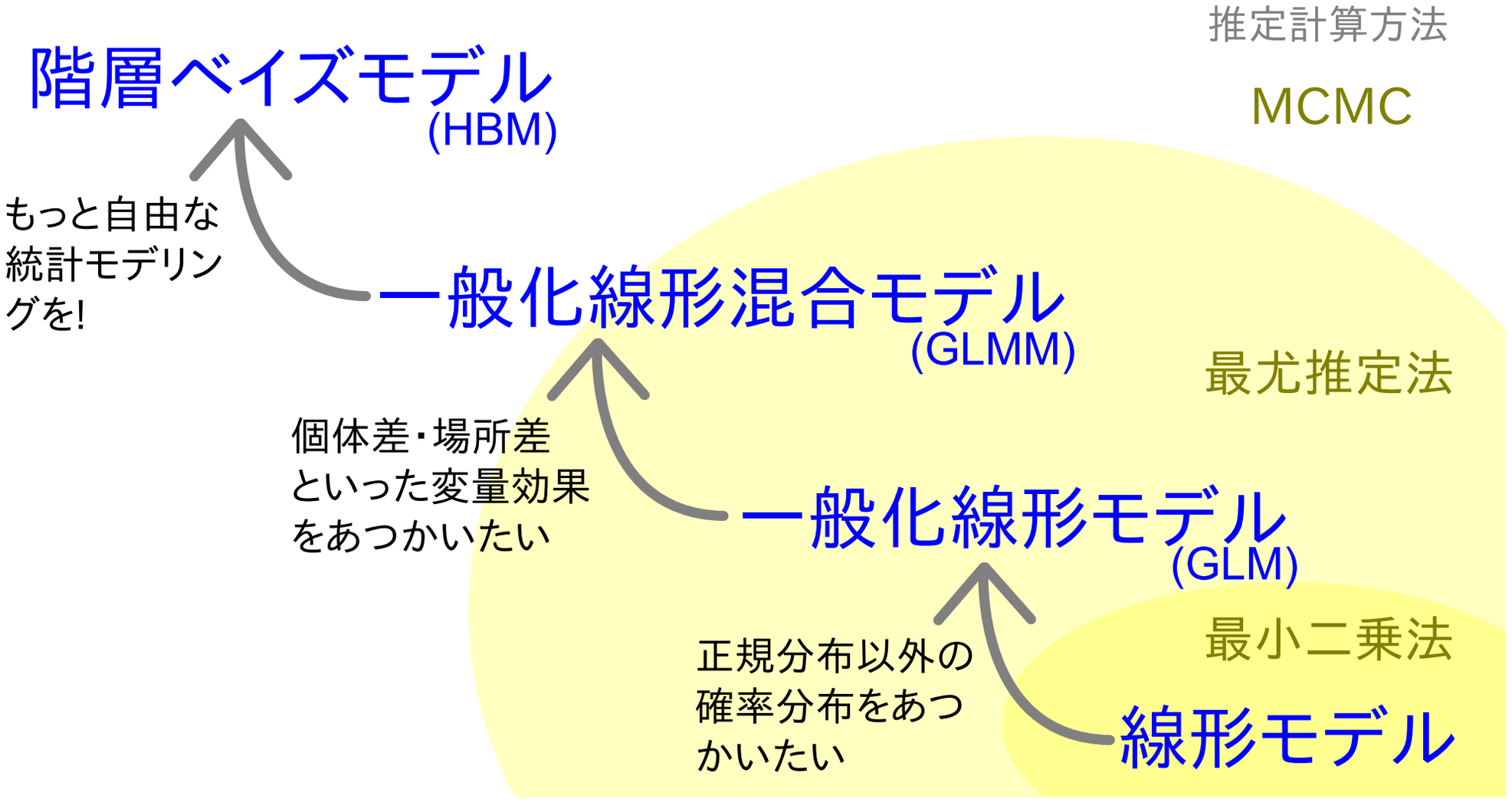
3. **WinBUGS を R で使う**

   R2WBwrapper 関数セットを経由して

4. **WinBUGS でパラメーターの事後分布推定**

   そして結果を **R** 内で解析・作図・変換する

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