統計モデリング入門 新潟大 2015 (6)
MCMC と階層ベイズモデル

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp, @KuboBook

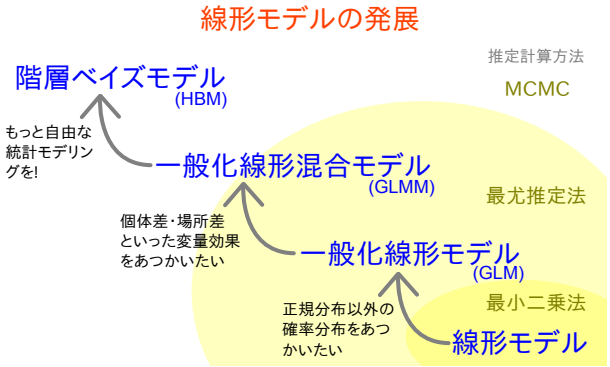
新潟大学集中講義 http://goo.gl/m8HSBM

2015–05–27

ファイル更新時刻: 2015–05–18 16:48

この時間に説明したいこと

"統計モデリング入門" に登場する統計モデル



データの特徴にあわせて線形モデルを改良・発展させる

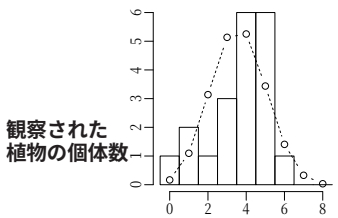
1. MCMC サンプリングのための例題

二項分布のパラメーターを最尤推定 (同じもの再掲)

前の時間の最初のハナシを少しくりかえします

簡単すぎる例題: 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	1	2	1	3	6	6	1	0	0



生存していた種子数 y_i

これは個体差なしの均質な集団

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

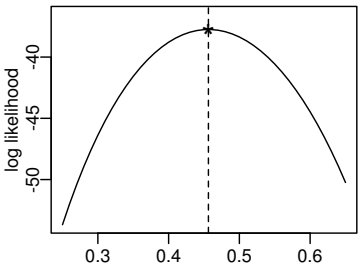
$$p(y_i \mid q) = \binom{N_i}{y_i} q^{y_i} (1-q)^{N_i - y_i},$$

- 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

最尤推定 (MLE) とは何か

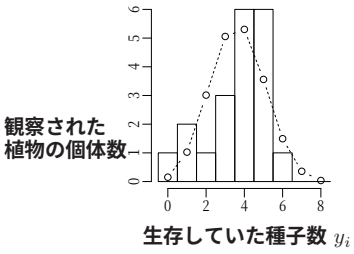
- 対数尤度 $L(q \mid$ データ$)$ が最大になるパラメーター q の値をさがしだすこと
- 対数尤度 $\log L(q \mid$ データ$)$ を q で偏微分して 0 となる $\hat{q}$ が対数尤度最大
  $\partial \log L(q \mid$ データ$)/\partial q = 0$
- 生存確率 q が全個体共通の場合の最尤推定量・最尤推定値は

$\hat{q} = \frac{\text{生存種子数}}{\text{調査種子数}} = \frac{73}{160} = 0.456$ ぐらい



二項分布で説明できる 8 種子中 y_i 個の生存

$\hat{q} = 0.46$ なので $\binom{8}{y} 0.46^y \ 0.54^{8-y}$



とりあえずここまでで
確率分布を適切に選んで統計モデリング，
統計モデルのパラメーターを
最尤 (さいゆう) 推定 する
…… といったことを説明しました

2. 同じような推定を MCMC でやってみる

最尤推定と MCMC はちがう!

そして “なんとなーく” ベイズ統計モデルと関連づけ

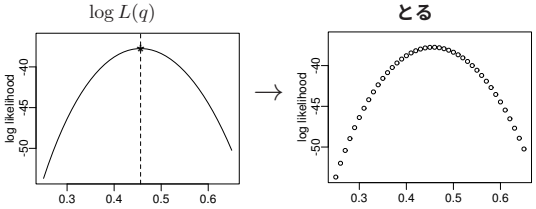
ここでやること: 尤度と MCMC の関係を考える

- 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
- Markov chain Monte Carlo (MCMC) 法のひとつである**メトロポリス法** (Metropolis method) であつかう
- 得られる結果: 「パラメーターの値の分布」……??

MCMC をもちださなくてもいい簡単すぎる問題
説明のためあえてメトロポリス法を適用してみる

メトロポリス法を説明するための準備

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

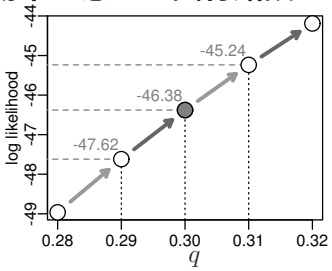


説明を簡単にするため
生存確率 q の軸を離散化する

(実際には離散化する必要などない)

試行錯誤による q の最尤推定値の探索

ちょっと効率の悪い「試行錯誤の最尤推定」



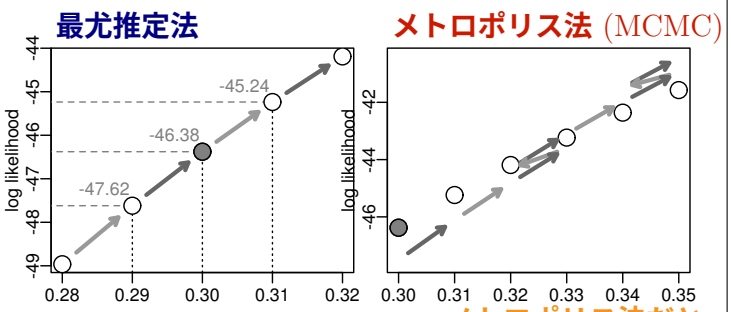
1. q の値の「行き先」を「両隣」どちらかにランダムに決める
2. 「行き先」が現在の尤度より高ければ，q の値をそちらに変更
3. 尤度が変化しなくなるまで (1), (2) をくりかえす

メトロポリス法のルール: この例題の場合

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 0.3)
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_{new} としましょう)
3. q_{new} における尤度 $L(q_{\mathrm{new}})$ ともとの尤度 $L(q)$ を比較
   - $L(q_{\mathrm{new}}) \geq L(q)$ (あてはまり改善): $q \leftarrow q_{\mathrm{new}}$
   - $L(q_{\mathrm{new}}) < L(q)$ (あてはまり改悪):
     - 確率 $r = L(q_{\mathrm{new}})/L(q)$ で $q \leftarrow q_{\mathrm{new}}$
     - 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)

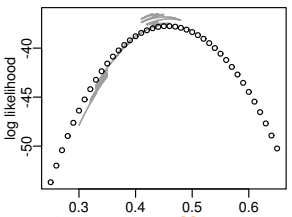
メトロポリス法のルールで q を動かす



メトロポリス法だと
「単調な山のぼり」にはならない

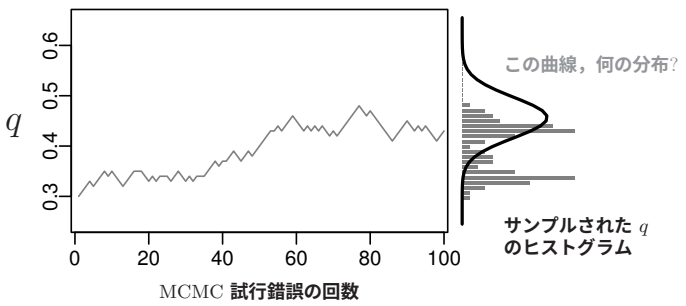
対数尤度関数の「山」でうろうろする q の値

メトロポリス法 (そして一般の MCMC) は
最適化ではない



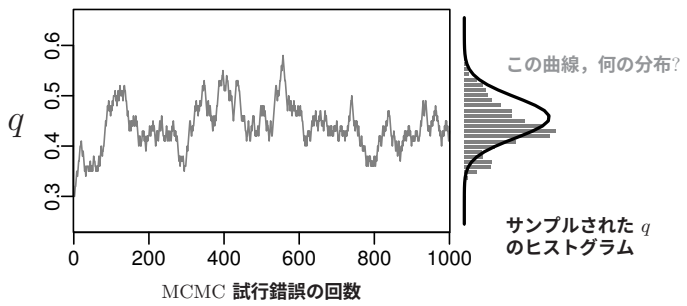
ときどきはでに落っこちる
何のためにこんなことをやるのか?
q の変化していく様子を記録してみよう

ステップごとに q の値をサンプリング



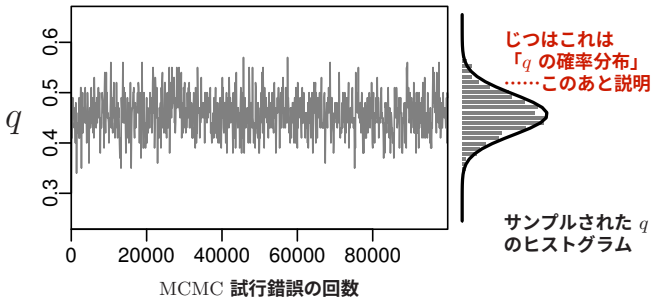
もっと試行錯誤してみたほうがいいのかな?

もっと長くサンプリングしてみる



まだまだ……?

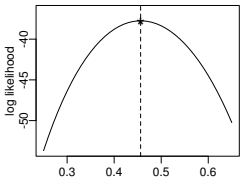
もっともっと長くサンプリングしてみる



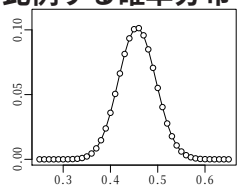
なんだか，ある「山」のかたちにまとまったぞ?

MCMC は何を**サンプリング**している?

対数尤度 $\log L(q)$



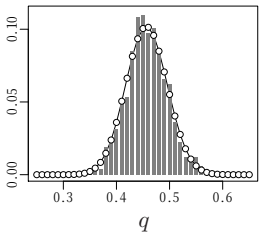
尤度 $L(q)$ に
比例する確率分布



尤度に比例する確率分布からのランダムサンプル

マルコフ連鎖の定常分布は $p(q) = \dfrac{L(q)}{\sum_q L(q)}$ となる

MCMC の結果として得られた q の経験分布



- データと統計モデル (二項分布) を決めて，MCMC サンプリングすると，$p(q)$ からのランダムサンプルが得られる
- このランダムサンプルをもとに，q の平均や 95% 区間などがわかる— **便利じゃないか**!

MCMC という推定方法から
「パラメーター q の確率分布」
というちょっと奇妙な考えかたが
でてきた ……

「ふつう」の統計学では
「パラメーターの確率分布」といった
考えかたはしない，しかし ……

ベイズ統計学なら
「パラメーターの確率分布」はぜんぜん
自然な考えかただ

ベイズモデル: 尤度・事後分布・事前分布……

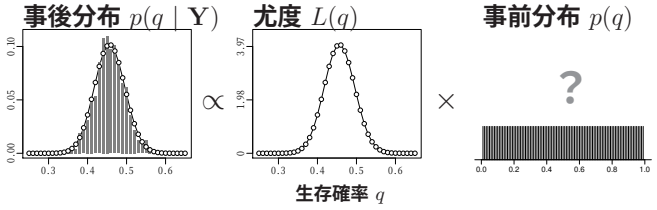
- ベイズの公式 $p(q \mid \mathbf{Y}) = \dfrac{p(\mathbf{Y} \mid q) \times p(q)}{p(\mathbf{Y})}$
- $p(q \mid \mathbf{Y})$ は何かデータ $(\mathbf{Y})$ のもとで何かパラメーター (q) が得られる確率 (事後分布)
- $p(q)$ はあるパラメーター q が得られる確率 (事前分布)
- $p(\mathbf{Y} \mid q)$ パラメーターを決めたときにデータが得られる確率 (尤度に比例)
- $p(\mathbf{Y})$ はデータ $\mathbf{Y}$ が得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

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

$$\propto \text{尤度} \times \text{事前分布}$$

ベイズ統計にむりやりこじつけてみると?

q の事前分布は一様分布，と考えるとつじつまがあう?



事前分布ってのがよくわからない……

以上の説明は，
「MCMC によって得られる結果」
は
「ベイズ統計でいうパラメーターの事後分布」
と考えると解釈しやすいかも
といったことを
ばくぜんかつなんとなく対応づける
ひとつのこころみでありました……

厳密な正当化とかそういったものではありません

3. MCMC のためのソフトウェア

"Gibbs sampling" などが簡単にできるような……

事後分布から効率よくサンプリングしたい

統計ソフトウェア R

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

簡単な GLMM なら R だけで推定可能

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

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

積分で「個体差」 r_i を消して，周辺尤度を定義する

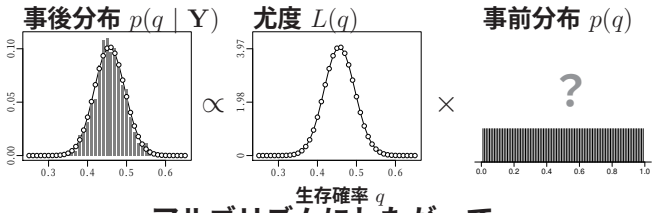
$$L(a, s \mid \mathbf{Y}) = \prod_{i=1}^{100} \int_{-\infty}^{\infty} p(y_i \mid q(a + r_i))\ p(r_i \mid s) dr_i$$

これを最大化する $\hat{a}$ と $\hat{s}$ を推定すればよい
— 経験ベイズ法 (empirical Bayesian method)

しかし，「R だけ」では限界があるかも

- R にはいろいろな GLMM の最尤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)
- しかし もうちょっと複雑な GLMM，たとえば個体差 + 地域差をいれた統計モデルの最尤推定はかなり難しい (ヘンな結果が得られたりする)
- 積分がたくさん入っている尤度関数の評価がしんどい

そこで MCMC による事後分布からのサンプリング!

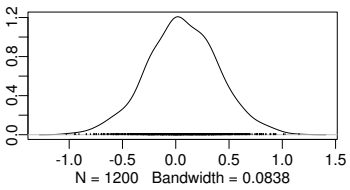


アルゴリズムにしたがって
乱数を発生させていくだけで OK

再確認:「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. "BUGS" で "Gibbs sampler" なソフトウェア
   - 利点: 幅ひろい問題に適用できて，便利
   - 欠点というほどでもないけど，多少の勉強が必要
   - えーっと "Gibbs sampler" って何?

さまざまな MCMC アルゴリズム

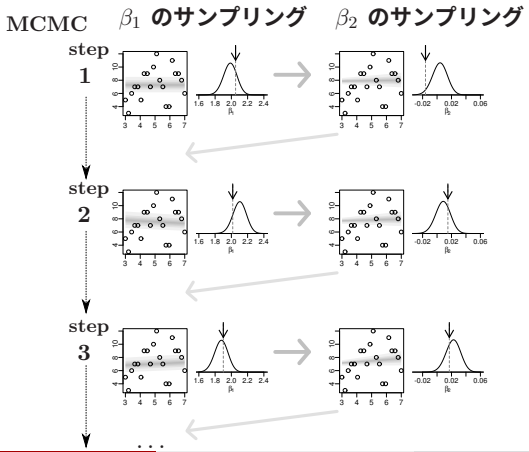
いろいろな MCMC

- 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・サンプリング: 条件つき確率分布を使った MCMC
  - 複数の変数 (パラメーター・状態) を効率よくサンプリング

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 (条件つき事後分布)
  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 (条件つき事後分布)
  4. 2. – 3. をくりかえす
- 教科書の第 9 章の例題で説明

図解: Gibbs sampling (統計モデリング入門の第 9 章)



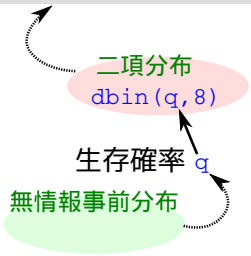
便利な "BUGS" 汎用 Gibbs sampler たち

- BUGS 言語 (+ っぽいもの) でベイズモデルを記述できるソフトウェア
  - WinBUGS — ありがとう，さようなら?
  - OpenBUGS — 予算が足りなくて停滞?
  - JAGS — お手軽で良い，どんな OS でも動く
  - Stan — たぶん "次" はこれ
    — 今日は紹介しませんが ……
- リンク集: http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/ce/BayesianMcmc.html

えーと……BUGS 言語って何?

このベイズモデルを BUGS 言語で記述したい

データ Y[i]
種子数8個のうちの生存数



BUGS 言語コード

```
for (i in 1:N.sample) {
  Y[i] ~ dbin(q, 8)
}
q ~ dunif(0.0, 1.0)
```

矢印は手順ではなく，依存関係をあらわしている

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.

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
- 歴史を変えたソフトウェアだけど，開発も停止していることだし，まあ，もう "ごくろうさま" ということで……

いろいろな OS で使える JAGS 3.4.0

- R core team のひとり Martyn Plummer さんが開発
  - Just Another Gibbs Sampler
- C++ で実装されている
  - R がインストールされていることが必要
- Linux, Windows, Mac OS X バイナリ版もある
- ぢりぢりと開発進行中
- R からの使う: library(rjags)

R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (1 / 3)

```
library(rjags)
library(R2WinBUGS) # to use write.model()

model.bugs <- function()
{
  for (i in 1:N.data) {
    Y[i] ~ dbin(q, 8) # 二項分布にしたがう
  }
  q ~ dunif(0.0, 1.0) # q の事前分布は一様分布
}
file.model <- "model.bug.txt"
write.model(model.bugs, file.model) # ファイル出力

# 次につづく……
```

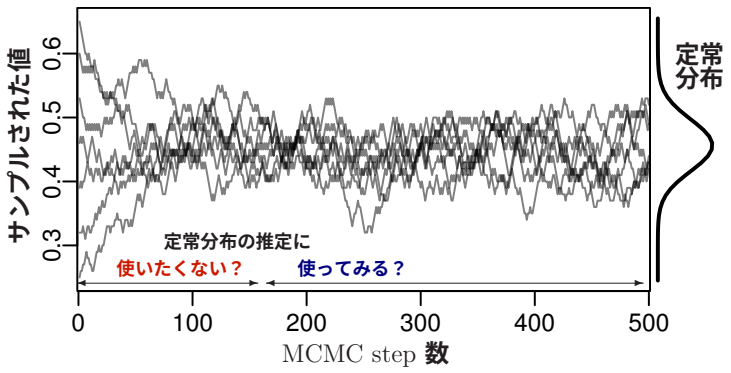
R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (2 / 3)

```
load("data.RData")
list.data <- list(Y = data, N.data = length(data))
inits <- list(q = 0.5)
n.burnin <- 1000
n.chain <- 3
n.thin <- 1
n.iter <- n.thin * 1000

model <- jags.model(
  file = file.model, data = list.data,
  inits = inits, n.chain = n.chain
)

# まだ次につづく……
```

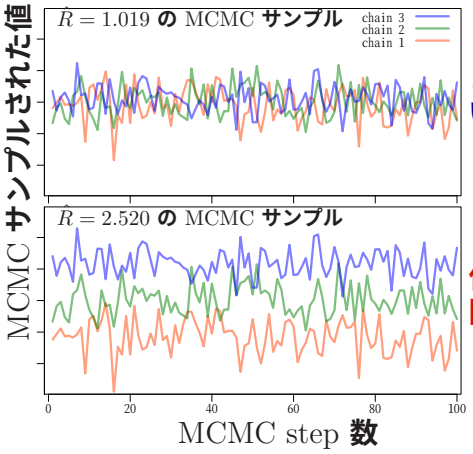

R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (3 / 3)

```
# burn-in
update(model, n.burnin) # burn in

# サンプリング結果を post.mcmc.list に格納
post.mcmc.list <- coda.samples(
  model = model,
  variable.names = names(inits),
  n.iter = n.iter,
  thin = n.thin
)
#  おわり
```


burn in って何? → 「使いたくない」長さの指定



試行間で差がないかを「診断」する

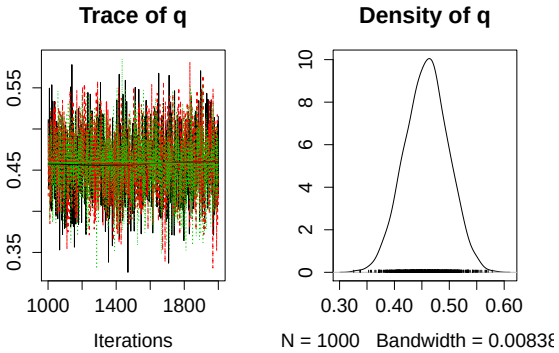


収束診断の $\hat{R}$ 指数

- `gelman.diag(post.mcmc.list)` → 実演表示
- `R-hat` は Gelman-Rubin の収束判定用の指数
  - $\hat{R} = \sqrt{\frac{\hat{\mathrm{var}}^+(\psi|y)}{W}}$
  - $\hat{\mathrm{var}}^+(\psi|y) = \frac{n-1}{n}W + \frac{1}{n}B$
  - W : サンプル列内の variance の平均
  - B : サンプル列間の variance
  - Gelman et al. 2004. Bayesian Data Analysis. Chapman & Hall/CRC

Gibbs sampling → 事後分布の推定

- `plot(post.mcmc.list)`



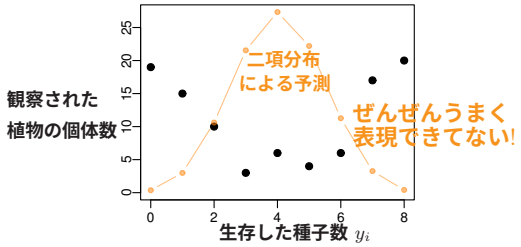
4. GLMM と階層ベイズモデル

GLMM のベイズモデル化

階層ベイズモデルとなる

二項分布では説明できない観測データ!

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……

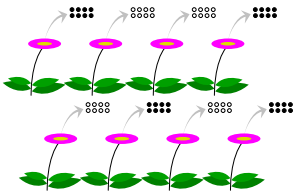


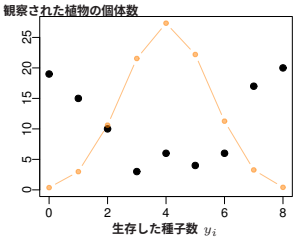
さっきの例題と同じようなデータなのに?

(「統計モデリング入門」第 10 章の最初の例題)

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」の原因は観測できない・観測されていない

モデリングやりなおし: 個体差を考慮する

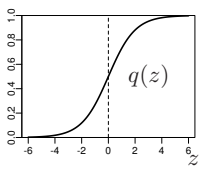
- 生存確率を推定するために 二項分布という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率は二項分布

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

- ここで仮定していること
  - 個体差があるので個体ごとに生存確率 q_i が異なる

GLM わざ: ロジスティック関数で表現する生存確率

- 生存確率 $q_i = q(z_i)$ をロジスティック関数 $q(z) = 1/\{1+\exp(-z)\}$ で表現



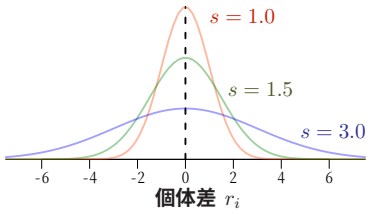
- 線形予測子 $z_i = a + r_i$ とする
  - パラメーター a: 全体の平均
  - パラメーター r_i: 個体 i の個体差 (ずれ)

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)

そこで，次のように考えてみる

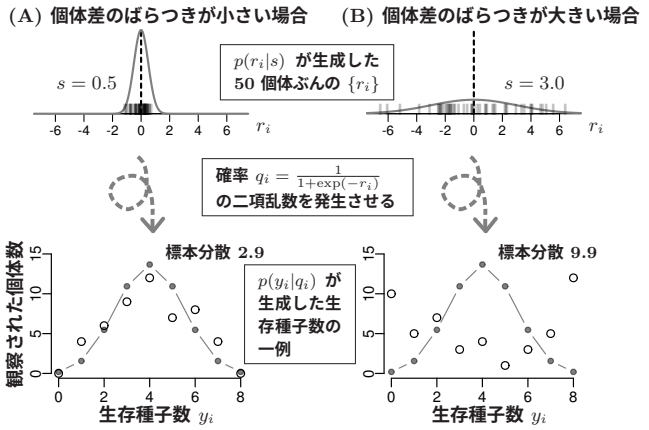
$\{r_i\}$ のばらつきは正規分布だと考えてみる



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

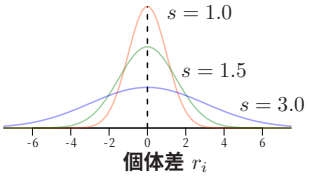
この確率密度 $p(r_i \mid s)$ は r_i の「出現しやすさ」をあらわしていると解釈すればよいでしょう．r_i がゼロにちかい個体はわりと「ありがち」で，r_i の絶対値が大きな個体は相対的に「あまりいない」．

ひとつの例示: 個体差 r_i の分布と過分散の関係



これは r_i の事前分布の指定，ということ

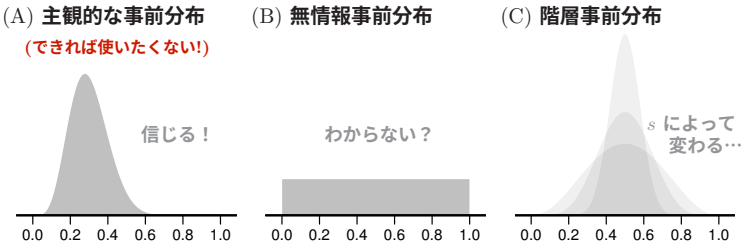
前回の授業で $\{r_i\}$ は正規分布にしたがうと仮定したが
ベイズ統計モデリングでは 「100 個の r_i たちに
共通する事前分布として正規分布 を指定した」
ということになる



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

ベイズ統計モデルでよく使われる三種類の事前分布

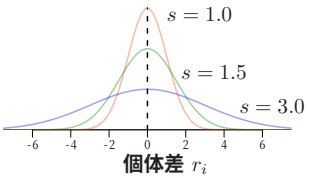
たいていのベイズ統計モデルでは，ひとつのモデルの中で複数の種類の事前分布を混ぜて使用する．



r_i の事前分布として階層事前分布を指定する

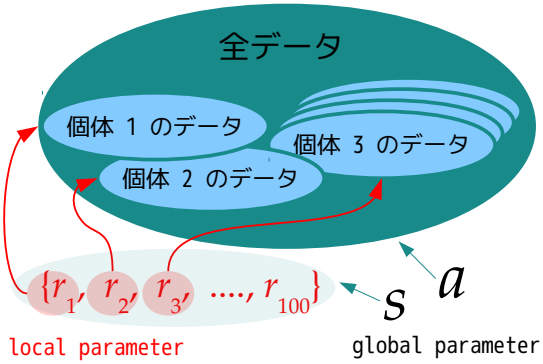
階層事前分布の利点

「データにあわせて」事前分布が変形!



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

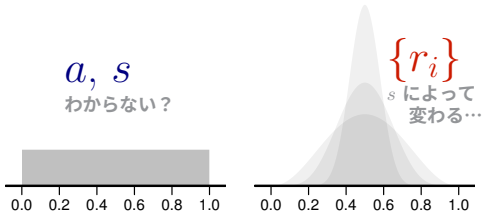
統計モデルの大域的・局所的なパラメーター



データのどの部分を説明しているのか?

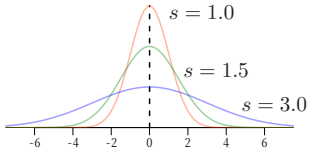
パラメーターごとに適切な事前分布を選ぶ

(B) 無情報事前分布　　(C) 階層事前分布



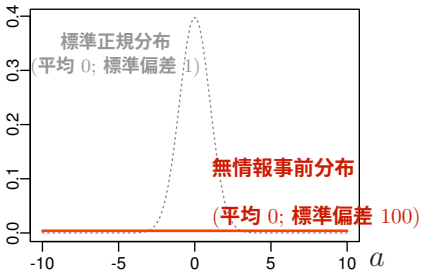
パラメーターの種類	説明する範囲	事前分布
全体に共通する平均・ばらつき	大域的	無情報事前分布
個体・グループごとのずれ	局所的	階層事前分布

個体差 $\{r_i\}$ のばらつき s の無情報事前分布



- s はどのような値をとってもかまわない
- そこで s 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，ここでは $0 < s < 10^4$ の一様分布としてみる

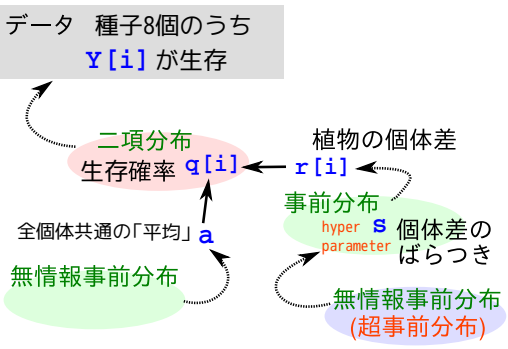
全個体の「切片」 a の無情報事前分布



「生存確率の (logit) 平均 a は何でもよい」と表現している

階層ベイズモデル: 事前分布の階層性

超事前分布 → 事前分布という階層があるから



矢印は手順ではなく，依存関係をあらわしている

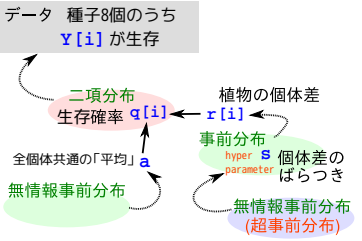
5. 階層ベイズモデルの推定

ソフトウェア JAGS を使ってみる

R の “したうけ” として JAGS を使う

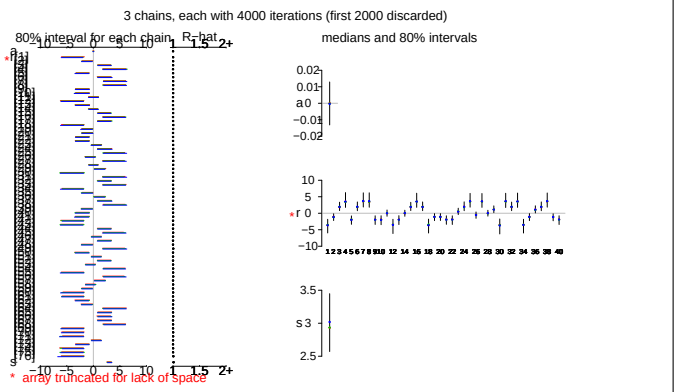
階層ベイズモデルを BUGS コードで記述する

```
model
{
  for (i in 1:N.data) {
    Y[i] ~ dbin(q[i], 8)
    logit(q[i]) <- a + r[i]
  }
  a ~ dnorm(0, 1.0E-4)
  for (i in 1:N.data) {
    r[i] ~ dnorm(0, tau)
  }
  tau <- 1 / (s * s)
  s ~ dunif(0, 1.0E+4)
}
```



JAGS で得られた事後分布サンプルの要約

```
> source("mcmc.list2bugs.R")                    # なんとなく便利なので…
> post.bugs <- mcmc.list2bugs(post.mcmc.list) # bugs クラスに変換
```

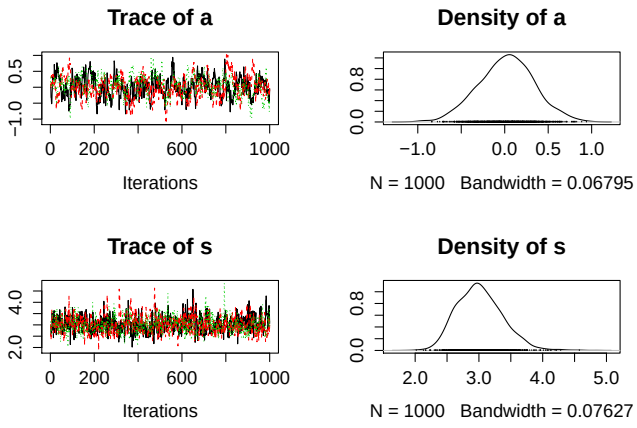


bugs オブジェクトの post.bugs を調べる

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

```
3 chains, each with 4000 iterations (first 2000 discarded), n.thin = 2
n.sims = 3000 iterations saved
         mean    sd   2.5%    25%    50%    75%  97.5%  Rhat n.eff
a       0.020 0.321 -0.618 -0.190  0.028  0.236  0.651 1.007   380
s       3.015 0.359  2.406  2.757  2.990  3.235  3.749 1.002  1200
r[1]   -3.778 1.713 -7.619 -4.763 -3.524 -2.568 -1.062 1.001  3000
r[2]   -1.147 0.885 -2.997 -1.700 -1.118 -0.531  0.464 1.001  3000
r[3]    2.014 1.074  0.203  1.282  1.923  2.648  4.410 1.001  3000
r[4]    3.765 1.722  0.998  2.533  3.558  4.840  7.592 1.001  3000
r[5]   -2.108 1.111 -4.480 -2.775 -2.047 -1.342 -0.164 1.001  2300
... （中略）
r[99]   2.054 1.103  0.184  1.270  1.996  2.716  4.414 1.001  3000
r[100] -3.828 1.766 -7.993 -4.829 -3.544 -2.588 -1.082 1.002  1100
```


各パラメーターの事後分布サンプルを R で調べる



得られた事後分布サンプルを組みあわせて予測

- `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**