統計モデリング入門 筑波大 (大塚) 集中講義 [08]

マルコフ連鎖モンテカルロ法

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

筑波大集中講義 http://goo.gl/HvRhXn

2015–03–01

ファイル更新時刻: 2015–03–24 18:06

この時間に説明したいこと

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 (前の時間の最初に登場!)
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!
3. MCMC のためのソフトウェア
   - 事後分布からサンプリングしたい

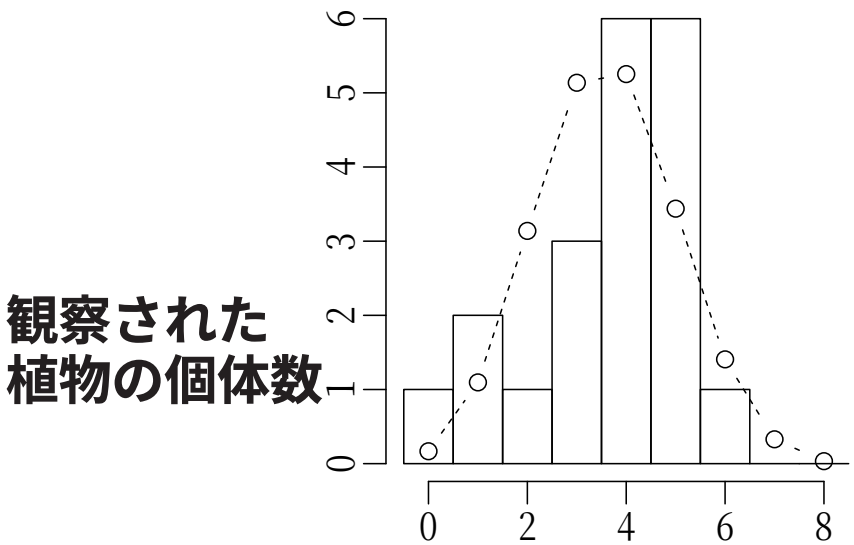
1. MCMC サンプリングのための例題

二項分布のパラメーターを最尤推定 (前の時間の最初に登場!)

あえてものすごく簡単な例題

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



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

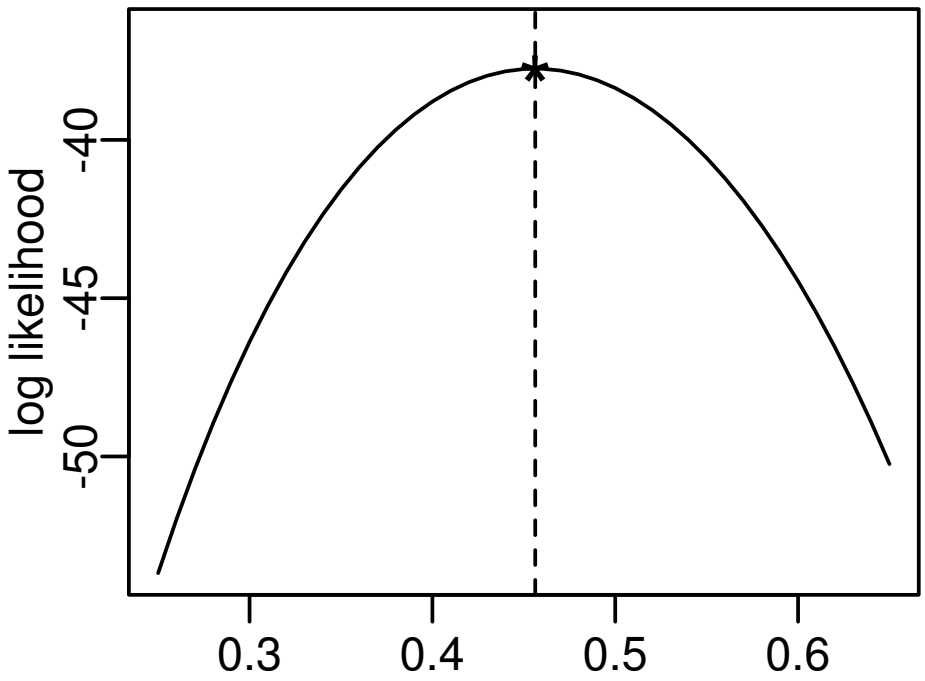
- **対数尤度 $L(q \mid$ データ$)$ が最大になるパラメーター q の値をさがしだすこと**

- **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**

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

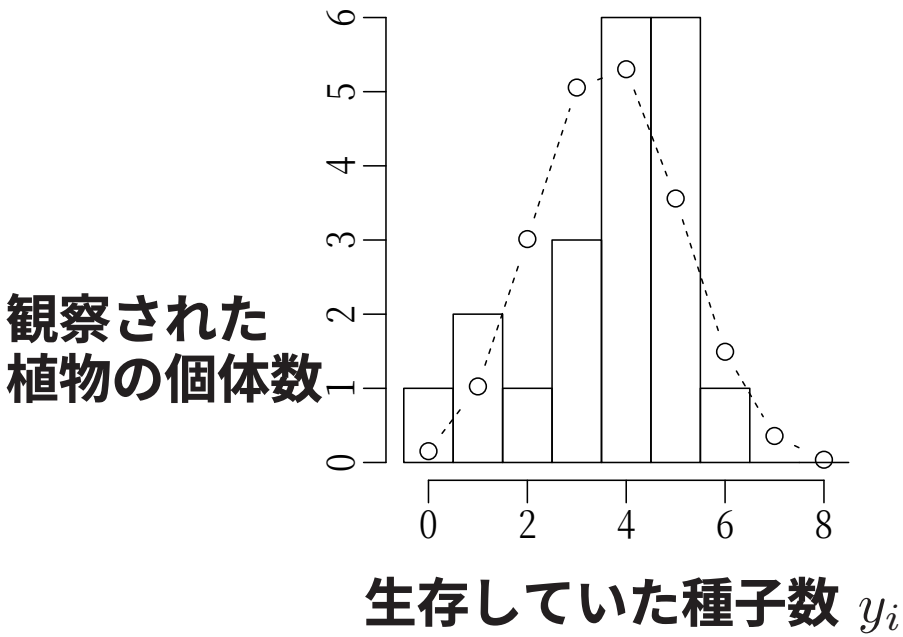
- **生存確率 q が全個体共通の場合の最尤推定量・最尤推定値は**

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



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「なぜかしら」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」……??

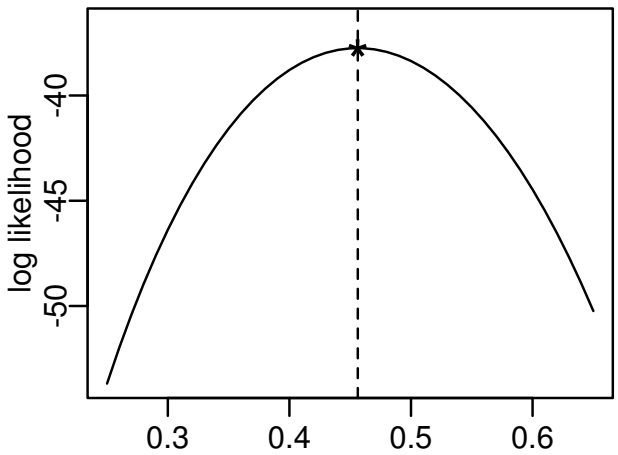
MCMC をもちださなくてもいい簡単すぎる問題

説明のためあえてメトロポリス法を適用してみる

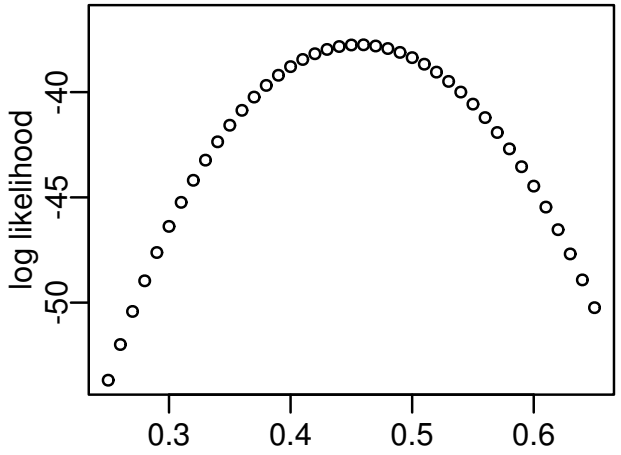
メトロポリス法を説明するための準備

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



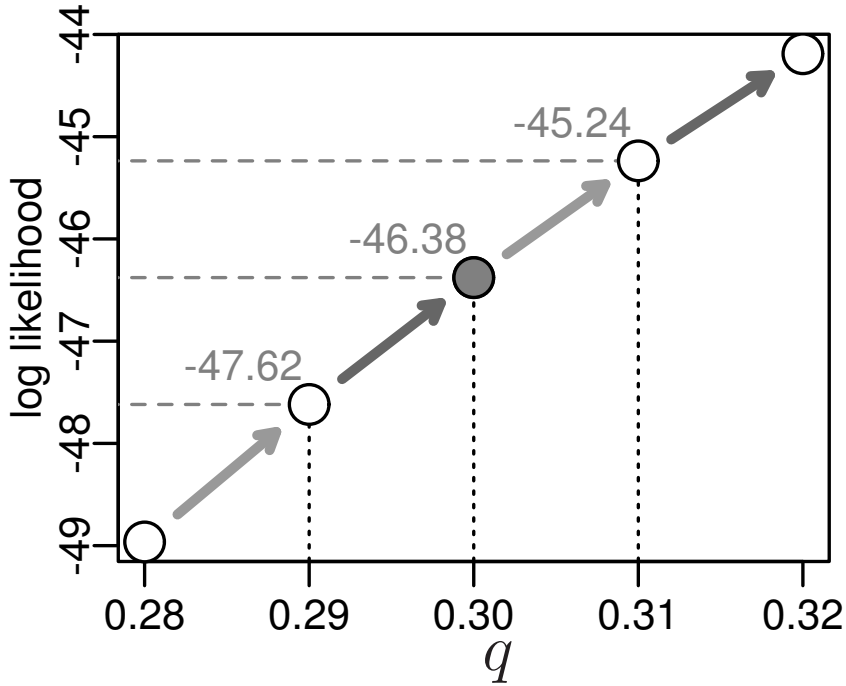
説明を簡単にするため

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**

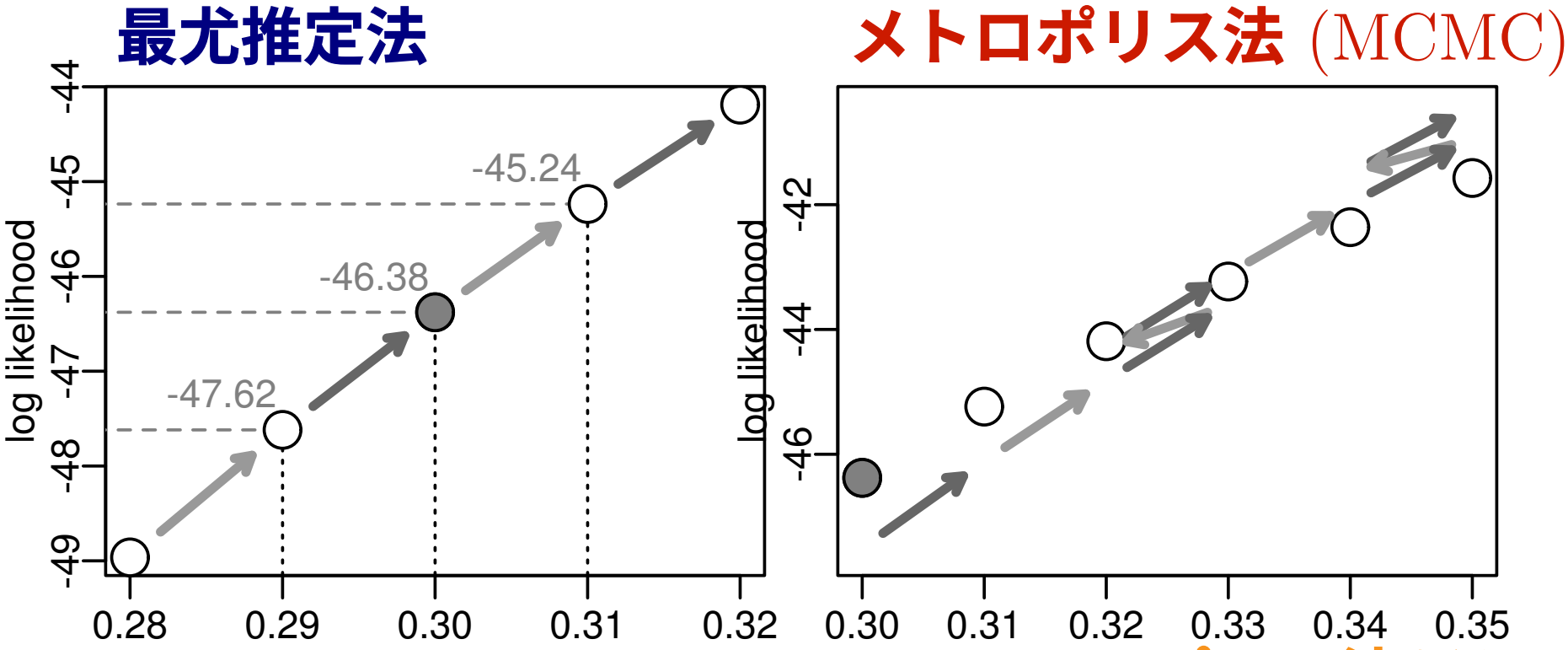
   (新しく選んだ q の値を q_{new} としましょう)

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

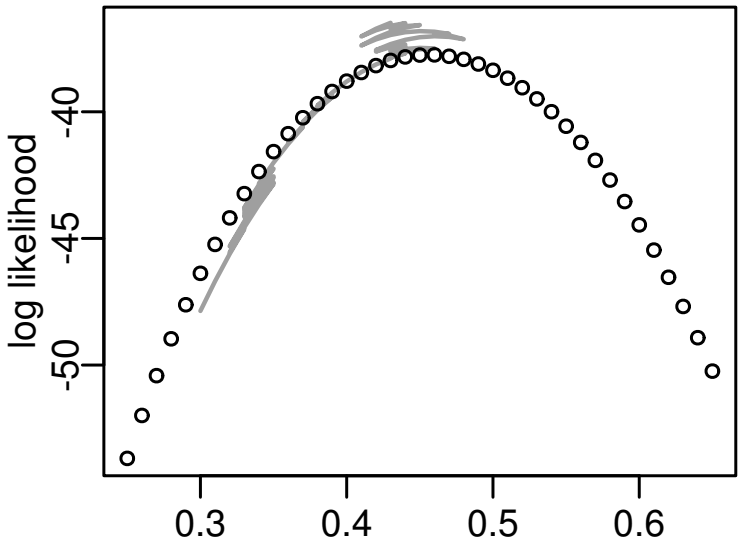


メトロポリス法だと
「単調な山のぼり」にはならない

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

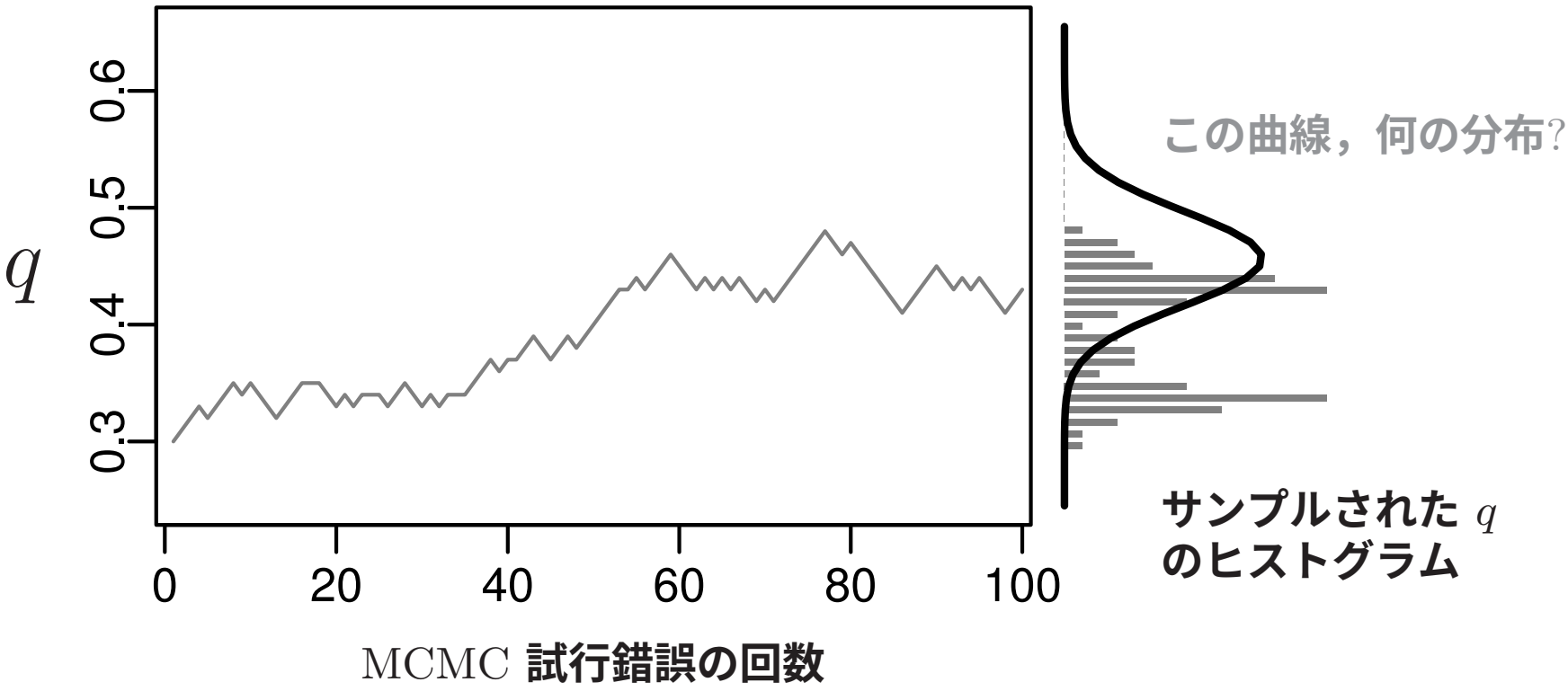


ときどきはでに落っこちる

何のためにこんなことをやるのか?

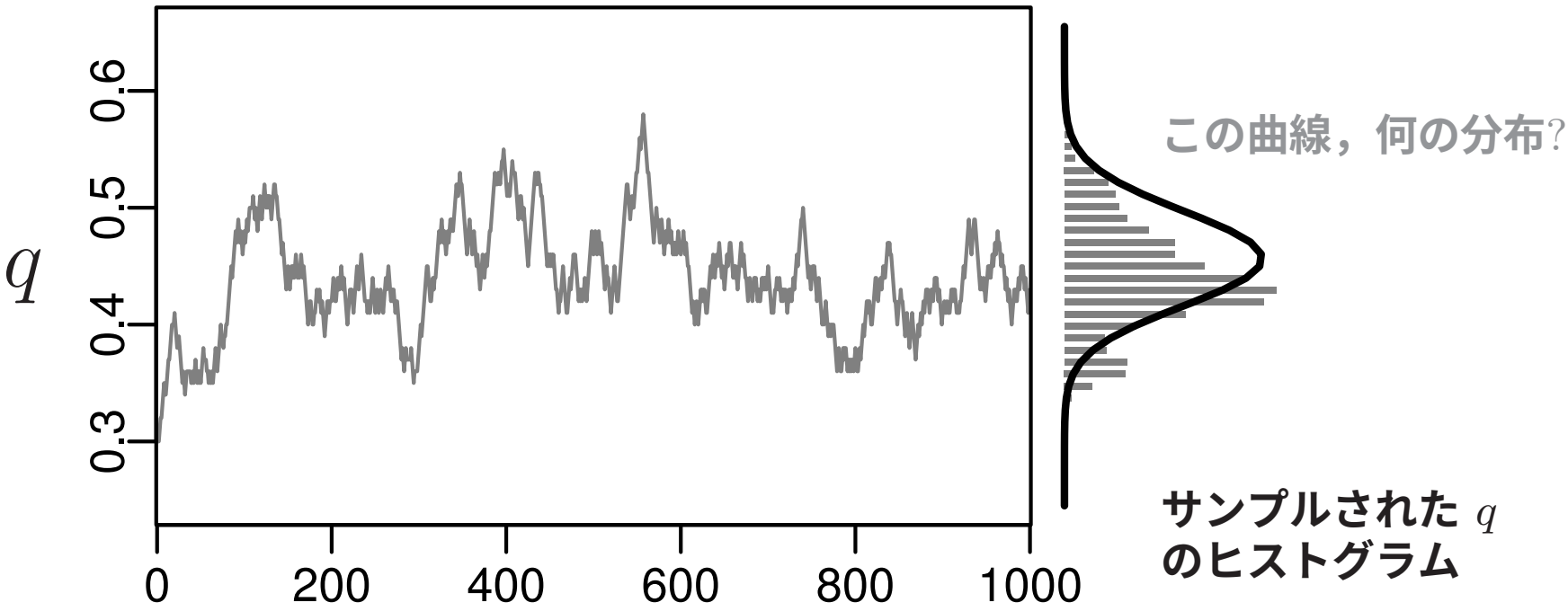
q の変化していく様子を記録してみよう

ステップごとに q の値を**サンプリング**



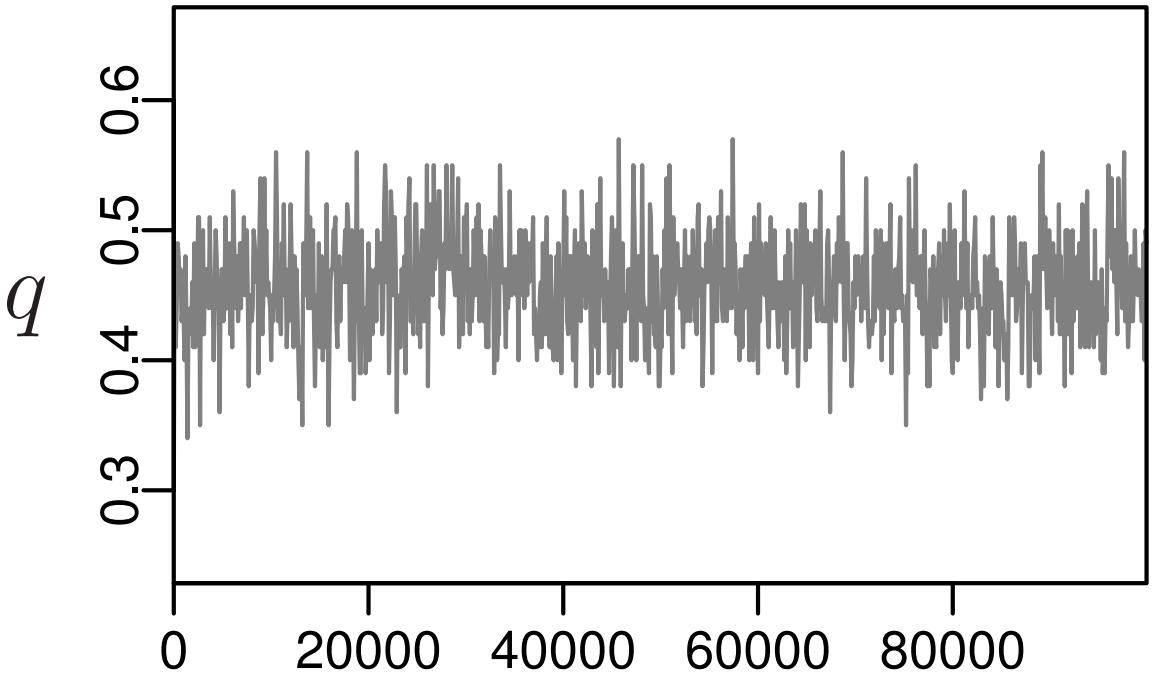
もっと試行錯誤してみたほうがいいのかな?

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



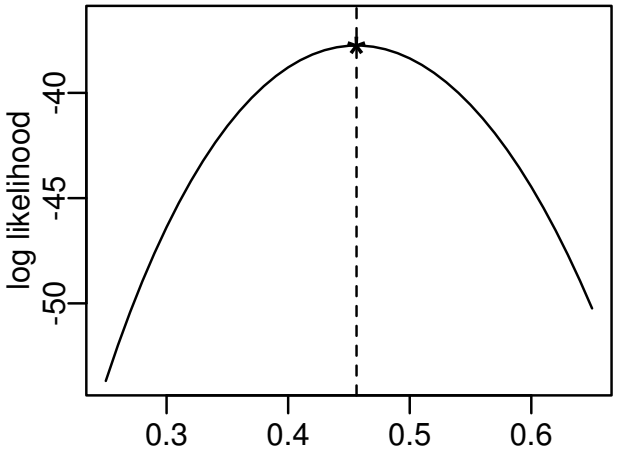
じつはこれは
「q の確率分布」
……このあと説明

サンプルされた q
のヒストグラム

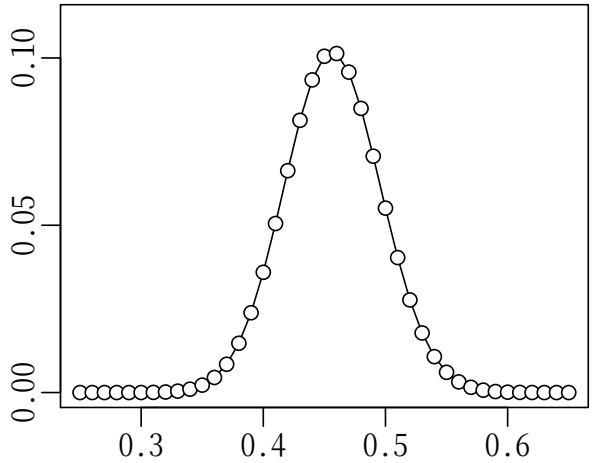
なんだか，ある「山」のかたちにまとまったぞ?

MCMC は何を**サンプリング**している?

対数尤度 $\log L(q)$



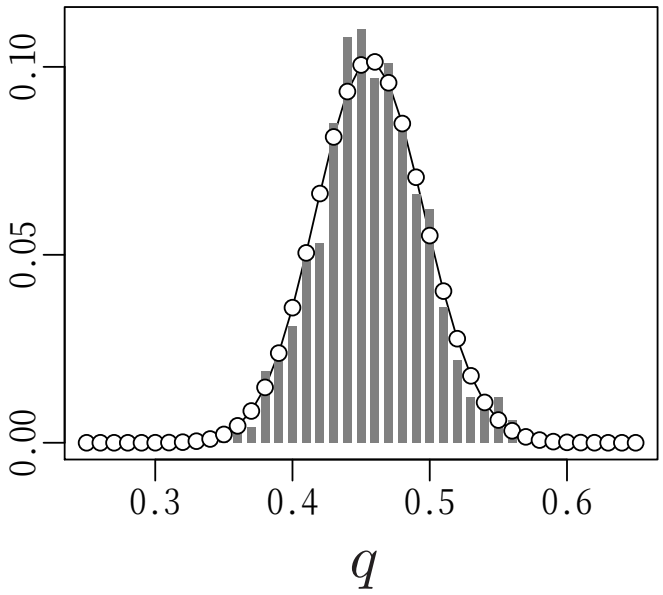
尤度 $L(q)$ **に**
比例する確率分布



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……

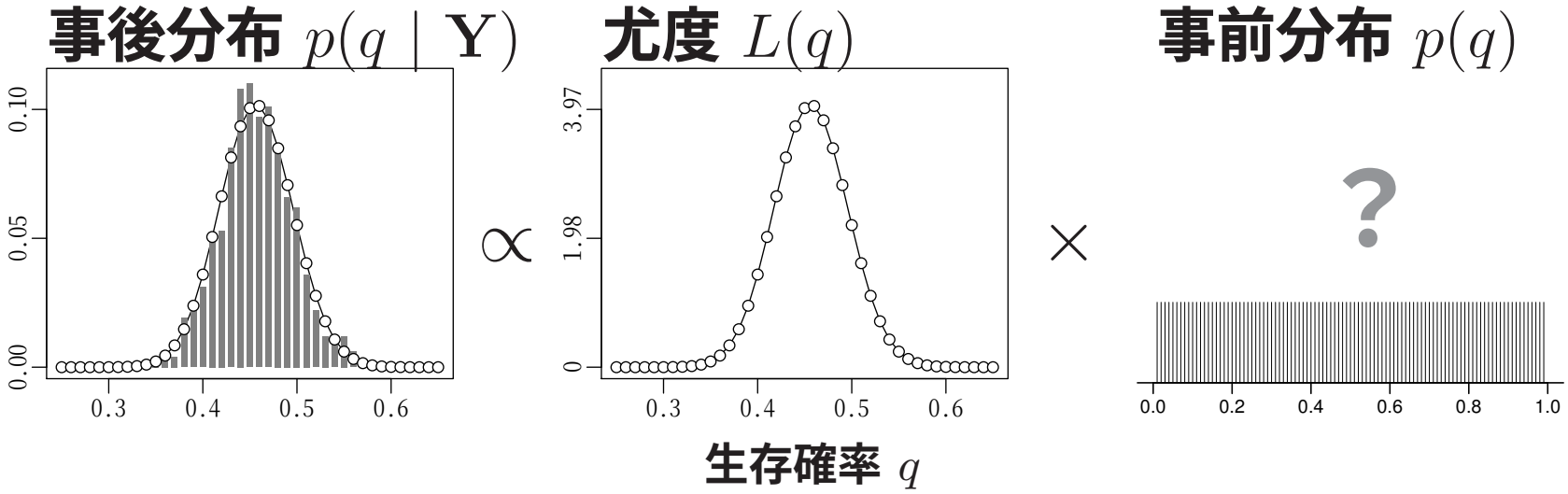
- **ベイズの公式** $p(q \mid \mathrm{Y}) = \dfrac{p(\mathrm{Y} \mid q) \times p(q)}{p(\mathrm{Y})}$
- $p(q \mid \mathrm{Y})$ **は何かデータ** (Y) **のもとで何かパラメーター** (q) **が得られる確率** **(事後分布)**
- $p(q)$ **はあるパラメーター** q **が得られる確率** **(事前分布)**
- $p(\mathrm{Y} \mid q)$ **パラメーターを決めたときにデータが得られる確率** **(尤度に比例)**
- $p(\mathrm{Y})$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

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

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

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

事後分布からサンプリングしたい

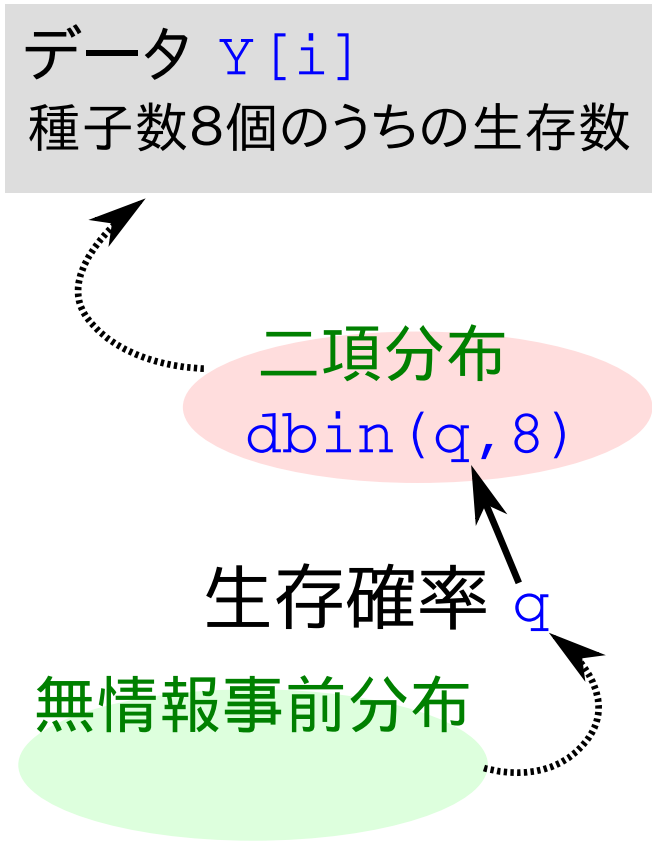
Gibbs sampling

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



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 JAGS3.4.0

- 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……
```

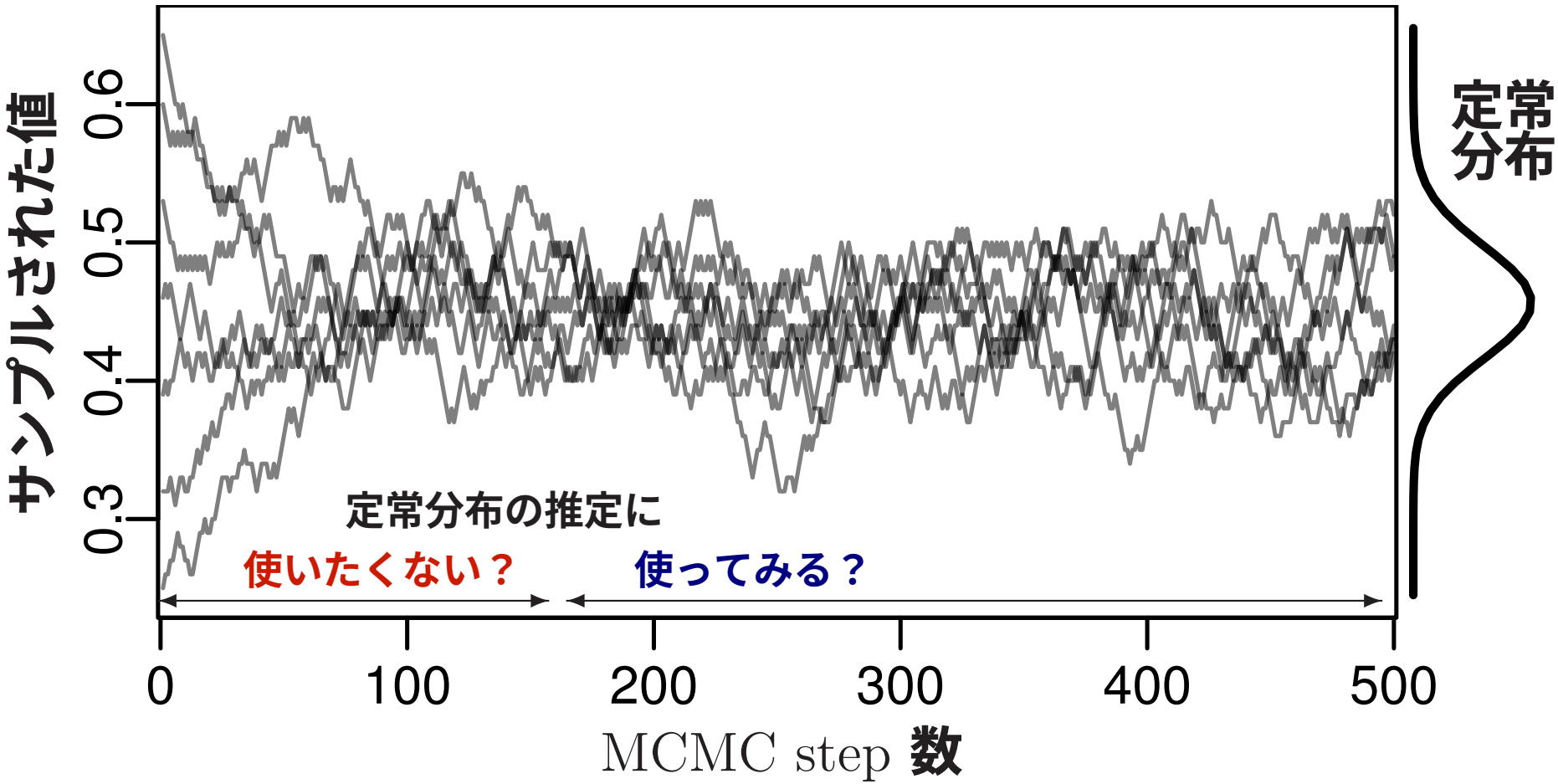
R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (2 / 3)

```
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……
```

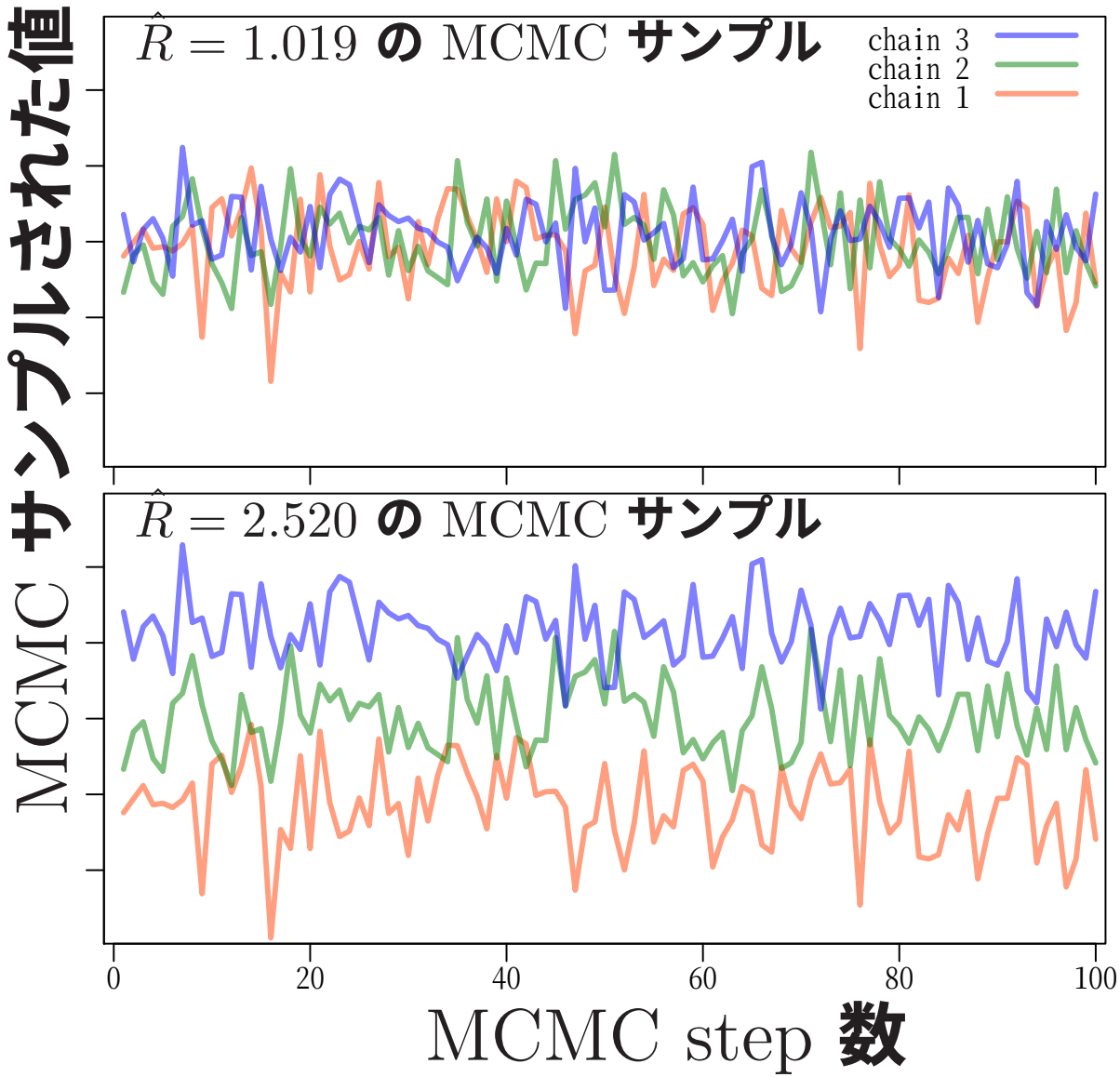
R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (3 / 3)

```
# 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



まあ，
いいかな……

何やら
問題あり!

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)`