統計モデリング入門 2018 (f)

階層ベイズモデル Hierarchical Bayesian Model

久保拓弥 kubo@ees.hokudai.ac.jp

北大環境科学院の講義 http://goo.gl/76c4i

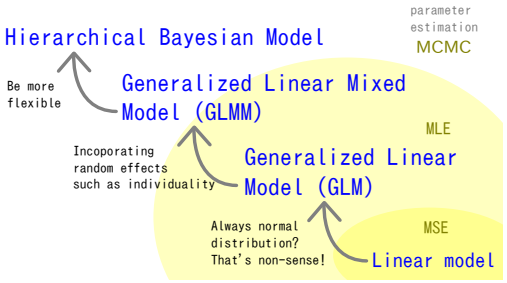
2018–07–02

ファイル更新時刻: 2018–07–02 13:55

今日の統計モデル: 階層ベイズモデル

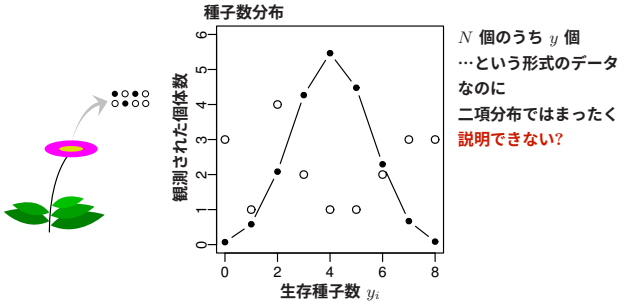
HBM

The development of linear models



そして Markov Chain Monte Carlo (MCMC) を使った Bayesian Estimation (ベイズ推定)

Why? GLM is not enough ...



N 個のうち y 個
…という形式のデータ
なのに
二項分布ではまったく
説明できない?

階層ベイズモデルが必要!

Apply Hierarchical Bayesian Model (HBM)!

もくじ

今日のハナシ

1. MCMC sampling のための 例題 (example)

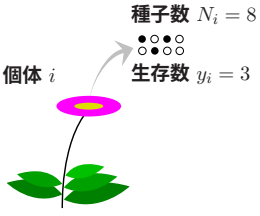
logistic regression: binomial distribution

and logit link function

example seed survivorship, again

例題: 植物の種子の生存確率

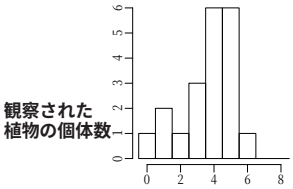
- 架空植物の種子の生存を調べた
- 種子: 生きていれば発芽する
  - どの個体でも 8 個 の種子を調べた
- 生存確率: ある種子が生きている確率



- データ: 植物 20 個体，合計 160 種子の生存の有無を調べた
- 73 種子が生きていた — このデータを統計モデル化したい

二項分布を説明するための例題

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 (no individual difference!)

生存確率 q と 二項分布 の関係

binomial distribution

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

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

- In this example ....
  - 個体差はない no individual difference
  - つまり すべての個体で同じ生存確率 q

尤度 (ゆうど): 20 個体ぶんのデータが観察される確率

- 観察データ $\{y_i\}$ が確定しているときに
- パラメータ q は値が自由にとりうると考える
- 尤度 likelihood は 20 個体ぶんのデータが得られる確率の積，パラメータ q の関数として定義される

$$L(q|\{y_i\}) = \prod_{i=1}^{20} p(y_i \mid q)$$

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	1	2	1	3	6	6	1	0	0

対数尤度 方程式と 最尤推定

log likelihood MLE

- この尤度 $L(q \mid$ 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

$$\log L(q \mid \text{データ}) = \sum_{i=1}^{20} \log \binom{N_i}{y_i} + \sum_{i=1}^{20} \{y_i \log(q) + (N_i - y_i)\log(1-q)\}$$

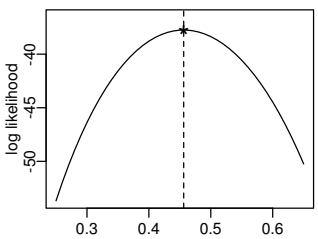
- この対数尤度を最大化するように未知パラメーター q の値を決めてやるのが最尤推定

最尤推定 (MLE) : 二項分布の場合

maximum likelihood estimation

- 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

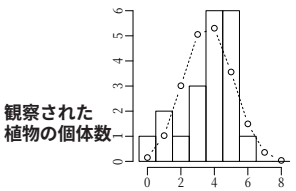
$\hat{q} = \frac{\text{生存種子数}}{\text{調査種子数}} = \frac{73}{160} = 0.456$ ぐらい



二項分布で説明できる 8 種子中 y_i 個の生存

fitting binomial distribution

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



2. The same data, but applying Markov Chain Monte-Carlo (MCMC)

最尤推定と Markov chain Monte Carlo (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

Maximum likelihood Estimation (MLE) vs. MCMC

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 Metropolis Method (Metropolis method) であつかう
- 得られる結果: 「パラメーターの値の分布」……??

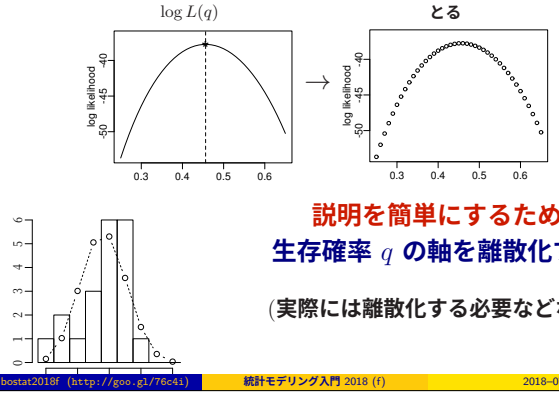
MCMC をもちださなくてもいい簡単すぎる問題
説明のためあえて Metropolis Method を適用してみる

An example for MCMC

MCMC 法を説明するための例題

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

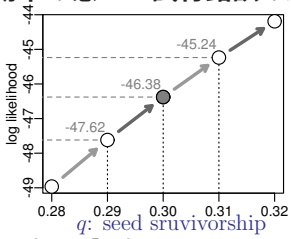
(実際には離散化する必要などない)

How to sample q?

試行錯誤による q の最尤推定値の探索

trial and error MLE

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

An example of Metropolis walking

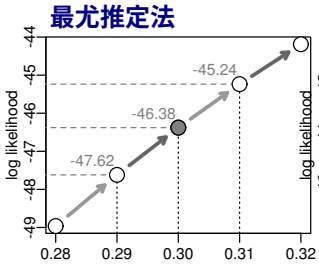
この例題の Metropolis Method のルール

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**

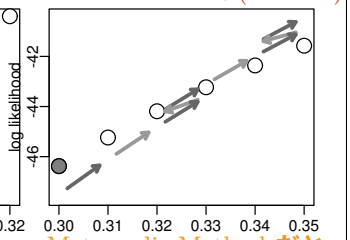
($q = 0.01$ や $q = 0.99$ でどうなるんだ，といった問題は省略)

Metropolis Method Rule: how to move q

最尤推定法



メトロポリス法 (MCMC)

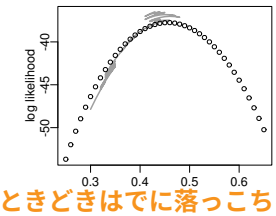


Metropolis Method **だと**
「単調な山のぼり」にはならない

Log likelihood landscape

対数尤度関数の「山」でうろうろする q の値

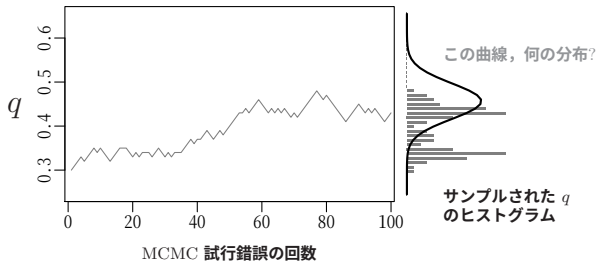
Metropolis Method (**そして一般の** MCMC) **は**
最適化ではない (not seeking the optimial point!



ときどきはでに落っこちる

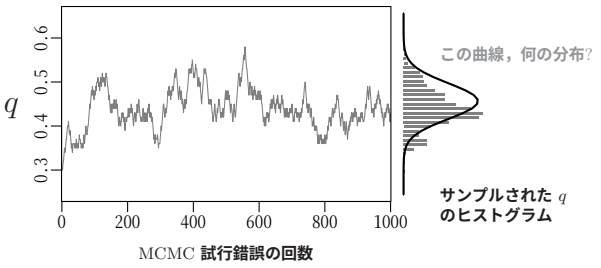
何のためにこんなことをやるのか? What for MCMC?
q **の変化していく様子を記録してみよう**

Sampling q values based on MCMC rules



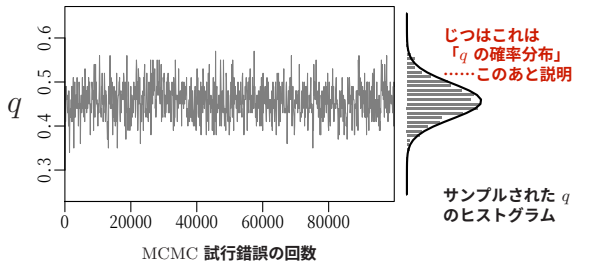
もっと試行錯誤してみたほうがいいのかな?

もっと長くサンプリングしてみる longer sampling



まだまだ……?

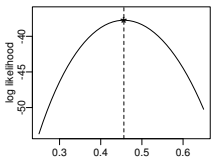
もっともっと長くサンプリングしてみる more ...



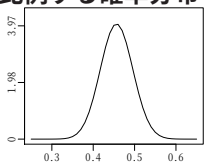
なんだか，ある「山」のかたちにまとまったぞ?

What for MCMC sampling?

対数尤度 $\log L(q)$



尤度 $L(q)$ **に**
比例する確率分布

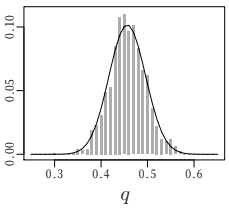


尤度に比例する確率分布からのランダムサンプル

最尤推定はパラメーターの値の点推定
MCMC **は "パラメーターの事後分布" (←推定したいこと)**
は こういう分布ですよ と推定している

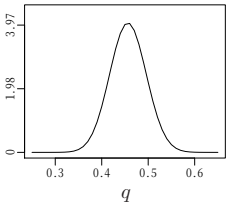
empirical distribution

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!**

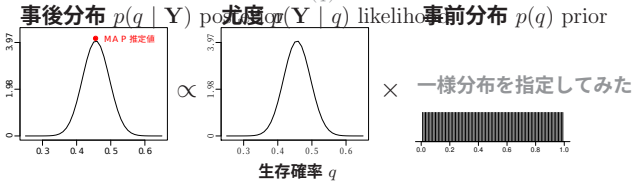
しかし (非ベイズな統計学) ふつうの統計学 では q の分布 とかありえない



- パラメーター $q = 0.4500000\cdots$ といったスカラー値であり，分布ではない!
- 信頼区間は “q の推定値のばらつき” でもない!
- ベイズ統計学 なら “パラメーターの分布” としても何の問題もありません

ベイズ統計モデル：尤度・事前分布・事後分布

$$\underbrace{p(q \mid \mathbf{Y})}_{\text{事後分布 posterior}} \propto \underbrace{L(q)}_{\text{尤度 } p(\mathbf{Y} \mid q) \text{ likelihood}} \times \underbrace{p(q)}_{\text{事前分布 prior}}$$



一様分布を指定してみた

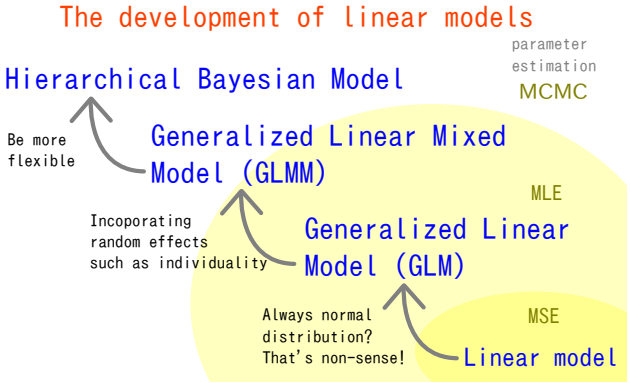
3. Softwares for MCMC sampling

“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... is it enough?

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



簡単な GLMM なら R だけで推定可能

- 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

さまざまな MCMC アルゴリズム

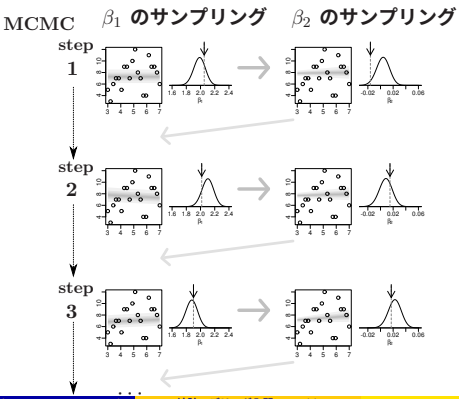
いろいろな MCMC

- Metropolis Method: 試行錯誤で値を変化させていく MCMC
  - Metropolis-Hastings: その改良版
- Gibbs sampling: 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
- HMC sampling: Stan で使われている
  - 久保はよくわかっていない

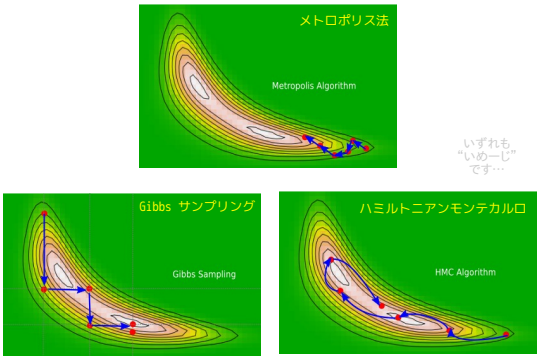
Gibbs sampling とは何か?

- 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)



MCMC sampling 法のあれこれ



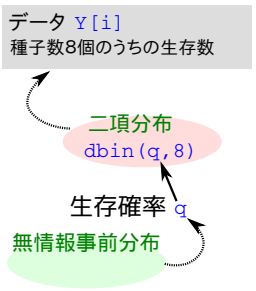
いずれも "いめーじ" です…

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 — 歴史を変えて……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 — いま一番の注目
    - 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

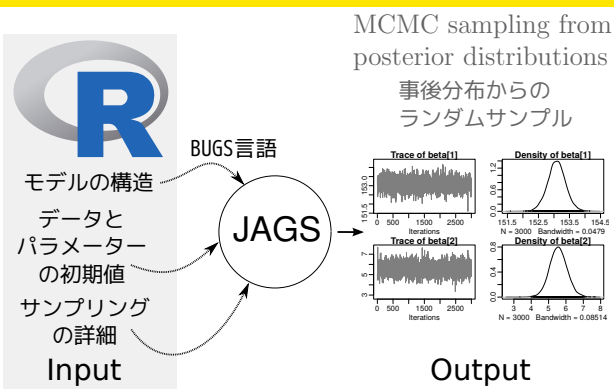
BUGS 言語: ベイズモデルを記述する言語

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

いろいろな OS で使える JAGS 4.3.0

- 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
- 開発進行中
- R からの使う: `library(rjags)`

JAGS を R の “したうけ” として使う



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……
```

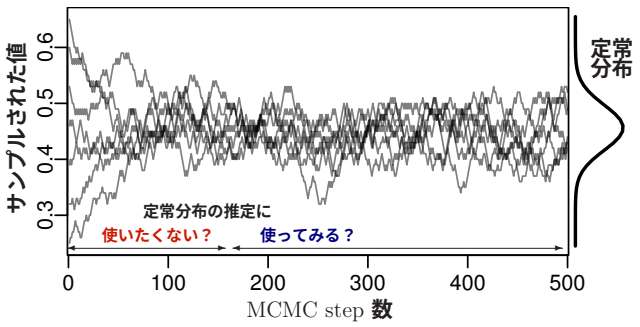

R から JAGS にこんなかんじで仕事を命じる (2 / 3)

```
load("mcmc.RData") # (data.RData ではなく mcmc.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)

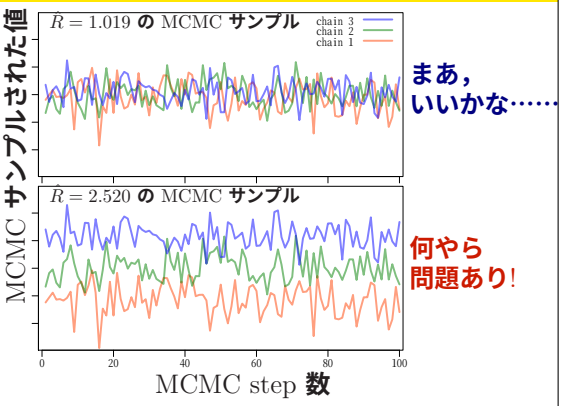
```
# burn-in
update(model, n.burnin) # burn in

# 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



check convergence

試行間で差がないかを 収束診断 する



まあ，
いいかな……

何やら
問題あり!

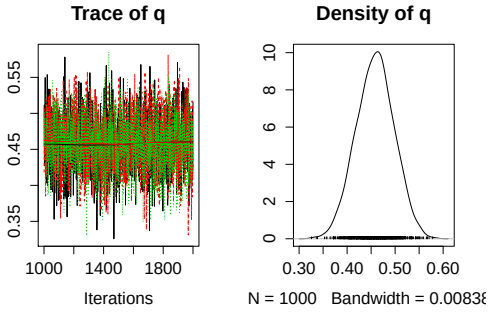
convergence check

収束診断 の $\hat{R}$ (アールハット) 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

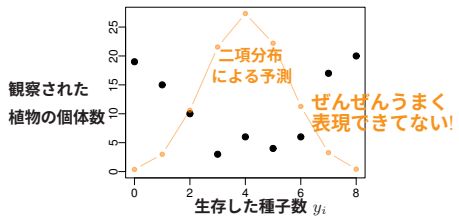
GLMM のベイズモデル化

hierarchical Bayesian
階層ベイズモデルとなる

Binomial distribution can NOT explain the DATA!

二項分布では説明できない観測データ!

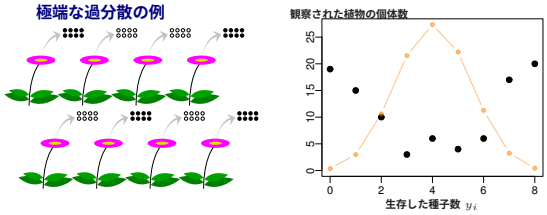
100 個体の植物の合計 800 種子中 403 個の生存が見られたので，平均生存確率は 0.50 と推定されたが……



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)

individual difference

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: 植物個体ごとに見えない “差” があると仮定

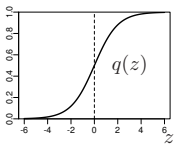
- 生存確率を推定するために 二項分布という確率分布を使う
- 個体 i の N_i 種子中 y_i 個が生存する確率は二項分布

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

- 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

各個体の生存確率は logistic 回帰のモデルを使う

- 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 = データのよみあげ

number of parameters　　sample size

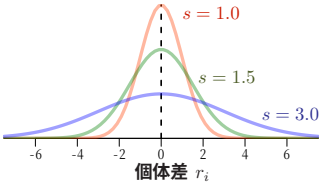
パラメーター数 > サンプルサイズ

- 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” と等価)

そこで，次のように考えてみる

suppose $\{r_i\}$ follow the Gausssian distribution

$\{r_i\}$ のばらつきは正規分布だと考えてみる

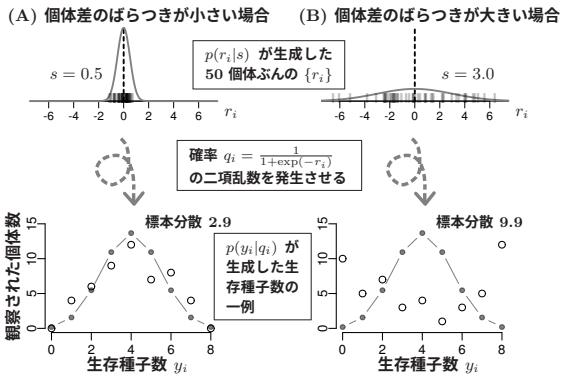


$$p(r_i \mid s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2s^2}\right)$$

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」.

overdispersion

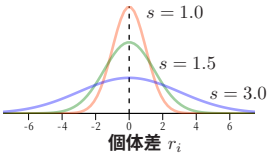
ひとつの例示: 個体差 r_i の分布と　過分散　の関係



prior

これは r_i の 事前分布 の指定，ということ

前回の講義で $\{r_i\}$ 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

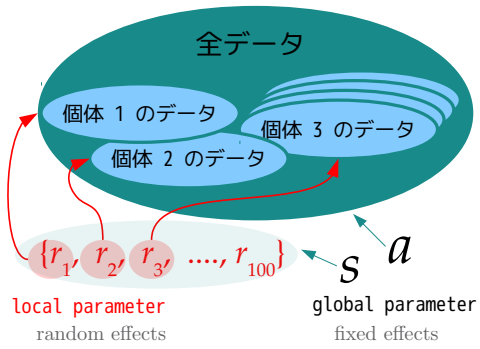


$$p(r_i \mid s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2s^2}\right)$$

GLMM と階層ベイズモデル | GLMM のベイズモデル化

Grobal and local parameters in the model

統計モデルの大域的・局所的なパラメーター

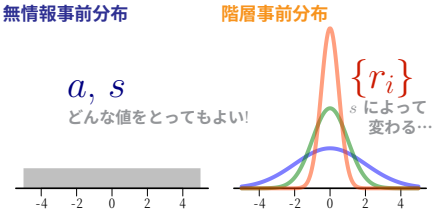


データのどの部分を説明しているのか?

GLMM と階層ベイズモデル | GLMM のベイズモデル化

choose proper priors: non-informative and hierarchical priors

パラメーターごとに適切な事前分布を選ぶ

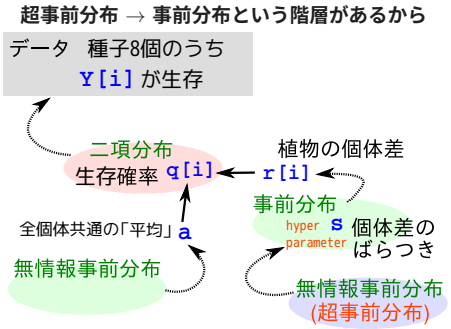


パラメーターの種類	説明する範囲	事前分布
全体に共通する平均・ばらつき	global 大域的	無情報事前分布
個体・グループごとのずれ	local 局所的	階層事前分布

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: Hierarchical and non-informative priors

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

階層ベイズモデルの 推定 | ソフトウェア JAGS を使ってみる

5. 階層ベイズモデルの estimation 推定

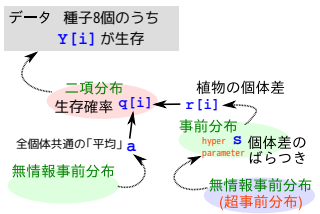
ソフトウェア JAGS を使ってみる

R の “したうけ” として JAGS を使う

階層ベイズモデルの 推定 | ソフトウェア JAGS を使ってみる

階層ベイズモデルを BUGS コードで記述する

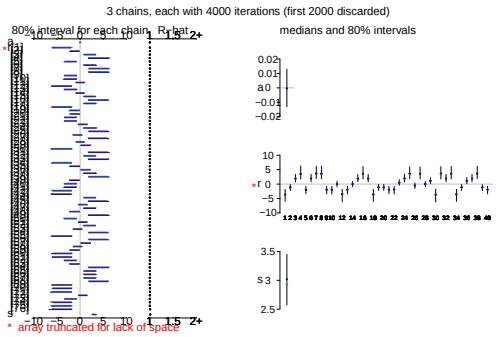
```
model
{
  for (i in 1:N.data) {
    Y[i] ~ dbin(q[i], 8)
    logit(q[i]) <- a + r[i]
  }
  a ~ dnorm(0, 1.0E-4)
  for (i in 1:N.data) {
    r[i] ~ dnorm(0, tau)
  }
  tau <- 1 / (s * s)
  s ~ dunif(0, 1.0E+4)
}
```



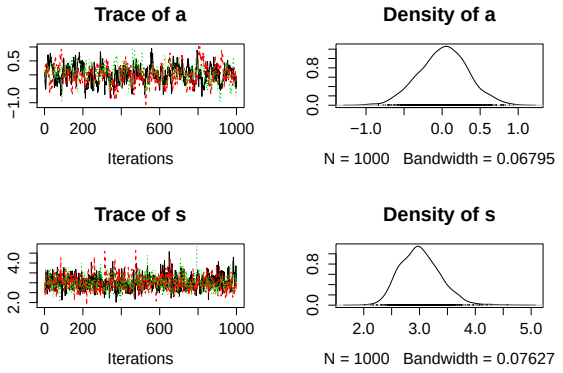
階層ベイズモデルの 推定 | ソフトウェア JAGS を使ってみる

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
```



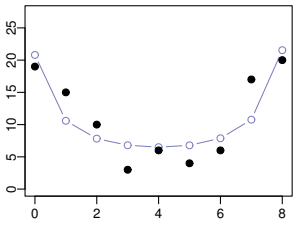
各パラメーターの事後分布サンプルを R で調べる



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
- ……このあとごちゃごちゃと計算する必要あるけど，省略……

観察された植物の個体数



生存していた種子数

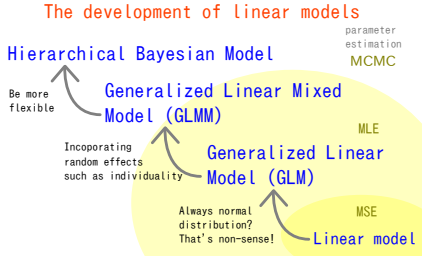
6. 階層ベイズモデル (HBM)? or GLMM?

Model: HBM and GLMM are equivalent

Estimation: NOT equivalent

Genralized Liear Mixed Model

一般化線形混合モデル



Improve logistic regression model (GLM)!

ロジスティック回帰のモデル

probability distribution: binomial distribution

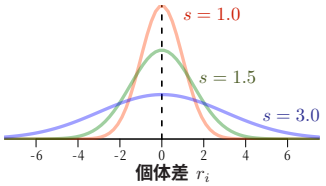
- 確率分布 : 二項分布

linear predictor

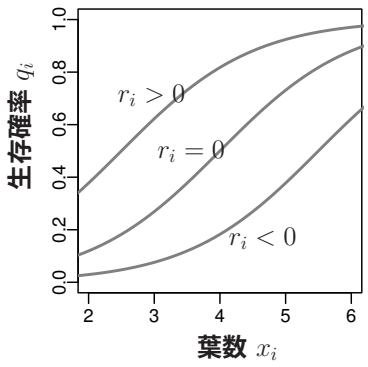
- 線形予測子: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$

link function

- リンク関数: logit リンク関数



個体 i の個体差を r_i としてみよう



fixed effects random effects
固定効果 と ランダム効果

Generalized Linear Mixed Model (GLMM)
linear predictor
で使う Mixed **な 線形予測子**: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$

- fixed effects: $\beta_1 + \beta_2 x_i$
- random effects: $+r_i$

fixed? random? **よくわからん……?**

global parameter と local parameter

Generalized Linear Mixed Model (GLMM)
linear predictor
で使う Mixed **な 線形予測子**: $\beta_1 + \beta_2 x_i + r_i$

- fixed effects: $\beta_1 + \beta_2 x_i$
  - global parameter — for all individuals
- **全個体のばらつき** s **も** global parameter
- random effects: $+r_i$
  - local parameter — only for individual i

maximum likelihood estimation of GLMM

データ $y_i \sim$ binomial distribution

$$p(y_i \mid \beta_1, \beta_2) = \binom{8}{y_i} q_i^{y_i} (1 - q_i)^{8 - y_i}$$

個体差 $r_i \sim$ Gaussian distribution

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

Integrate out r_i!

$$L_i = \int_{-\infty}^{\infty} p(y_i \mid \beta_1, \beta_2, r_i)\, p(r_i \mid s) dr_i$$

likedhood for all data
全データの尤度 — β_1, β_2, s **の関数**

$$L(\beta_1, \beta_2, s) = \prod_i L_i$$

- Model: HBM and GLMM are same
- Estimation: NOT same

Hierarchical Bayesiam model (HBM)
is better because we can apply MCMC
estimation.
Maximum likelihood estimation (MLE)
is NOT easy!

次回予告
The next topic
階層ベイズモデルと時間変化モデル
Hierarchical Bayesiam Model (HBM) & Time Change Model