# Bridgeサンプリングを用いた ベイズモデルの評価(仮)

専修大学大学院 文学研究科 M2 北條大樹

#### 2017/10/15 IRT勉強会@専修大学

# あなたの心に Bridge Sampling 私とあなたの Bayes Factor を求めよう

Bridgeサンプリングを用いたベイズモデルの評価 –専修大学大学院 文学研究科 M2 北條大樹

- ・ベイズファクター
- ・様々なBF算出方法
- Bridge Sampling
- WARP-III
- ・実際の心理学研究での応用例
- ・まとめ

- Gronau, Q. F., Sarafoglou, A., Matzke, D., Ly, A., Boehm, U., Marsman, M., ... & Steingroever, H. (2017). A tutorial on bridge sampling. *arXiv preprint arXiv:1703.05984v2*.
- Gronau, Q. F., Wagenmakers, E. J., Heck, D. W., & Matzke, D.
   (2017). A Simple Method for Comparing Complex Models: Bayesian Model Comparison for Hierarchical Multinomial Processing Tree Models using Warp-III Bridge Sampling.
- Wang, L., & Meng, X. L. (2016). Warp bridge sampling: the next generation. *arXiv preprint arXiv:1609.07690*.
- Meng, X. L., & Schilling, S. (2002). Warp bridge sampling. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 11(3), 552-586.

## ベイズファクター

•パラメータ推定の文脈で、我々の興味のあるパラメータ0の不確かさを観測データyから求めるとき

と表される。

 モデル比較の文脈では、m 個の候補モデルがあり、データ y を 所与としたときの i 番目のモデルの相対的な最もらしさを表す モデル事後確率は、

$$p(M_i|y) = rac{p(y|M_i)p(M_i)}{\Sigma_{j=1}^m p(y|M_j)p(M_j)}$$
事後モデル確率  $\Sigma$  周辺尤度×事前モデル確率

事後モデル確率 = 周辺尤度×事前モデル確率 / 候補すべての周辺尤度×事前モデル確率

## ベイズファクター

• もしここでm=2だったら… (比較したいモデルが2つのみ)

$$p(M_1|y) = \frac{p(y|M_1)p(M_1)}{\sum_{j=1}^{m} p(y|M_j)p(M_j)} \qquad p(M_2|y) = \frac{p(y|M_2)p(M_2)}{\sum_{j=1}^{m} p(y|M_j)p(M_j)}$$

• つまりオッズで表すことが可能

事後オッズ ベイズファクター 事前オッズ

$$\frac{p(M_1|y)}{p(M_2|y)} = \frac{p(y|M_1)}{p(y|M_2)} \times \frac{p(M_1)}{p(M_2)}$$

• 次のようにも

ベイズファクター 
$$BF_{12} = \frac{p(y|M_1)}{p(y|M_2)} = \frac{\frac{p(M_1|y)}{p(M_2|y)}}{\frac{p(M_1)}{p(M_2)}}$$
事前オッズ

ベイズファクターとは、データによって与えられたモデルM2に比してモデルM1を支持する程度(オッズ)の変化を表す

## ベイズファクターって何?

- ある者は、、、
  - "standard Bayesian solution to the hypothesis testing and model selection problems" (Lewis & Rftery, 1997, p648)
- またある者は、、、
- "the primary tool used in Bayesian inference for hypothesis testing and model selection" (Berger, 2006, p.378)
- またあるOKADAは、、、"ベイズの枠組みでのモデル比較を考える際に、ベイズファクターは最も順当な考え方である。"

それなのになぜBFを使わないのか?

## Q. なぜBFを使わないのか?

A. 使わないというよりは、**使えない(解析的に周辺尤度を計算できない)**ケースが多い。﴿('ω'♣) ∭ ∭ ∭ ∭ ( ﴿'ω')﴿\ø\_重積分ワッショイ

どんなケースで使えないのか?

- ・非線形モデル
- •パラメータ数が多い場合(特に階層モデル)

⇒むしろ、ベイズファクターを使えるモデルを探すほうが、使えないモデルを挙げていくより早いかも。。。

#### じゃあ、結局BFは求められないのか?

## 我々の最後の武器は何だろう。。。

#### • そう、MCMC(;´Д`) /\ア/\ア





#### MCMCでこれを解決しよう。

## 我々の最後の武器は何だろう。。。

### • そう、MCMC(;´Д`)ハァハァ



- 1. Naive Monte Carlo Estimator
- 2. Importance Sampling Estimator (重点サンプリング法)
- 3. Generalized Harmonic Mean Estimator (一般化調和平均法??)
- 4. Bridge Sampling (ブリッジサンプリング)
- 5. WARP-III bridge sampling or WARP-U bridge sampling

#### 今回は、4.5.の手法を重点的に紹介

1,2,3の詳しい話については、Gronau et al. (2017)を参照し、その後原著へ

## 再確認: 求めたいもの

・BFを求めたい、すなわち、周辺尤度を求めれば勝ち

$$BF_{12} = \frac{p(y|M_1)}{p(y|M_2)}$$

• 周辺尤度って?

$$p(y|M) = \int p(y|\theta, M)p(\theta|M)d\theta$$

周辺尤度

尤度 事前分布

興味のあるモデルで yが観測される確率

= 事前分布を通した尤度の積分

= θを所与とするときの尤度の重み付き平均 (重みというのは事前分布θの最もらしさのこと)

•次のようにも...

$$p(y|M) = \mathbb{E}_{prior}(p(y|\theta, M))$$

 $\mathbb{E}_{nrior}$ は事前分布の期待値を表す。

### 速習 Naive Monte Carlo Estimator

• 周辺尤度を求めたい。ただ、ここでどのモデルのとかはない

$$p(y|M) = \mathbb{E}_{prior}(p(y|\theta, M))$$
  $p(y) = \mathbb{E}_{prior}(p(y|\theta))$ 

これを近似するには、θにおける事前分布からのN個のサンプルで大度を評価し、その結果を平均すればよい。

$$p(y) = \mathbb{E}_{prior}(p(y|\theta))$$

$$\hat{p}_1(y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} p(y|\tilde{\theta}_i) \qquad \tilde{\theta}_i \sim p(\theta)$$
太度の平均 事前分布からのサンプル

• コインの例で考えた具体例は、Gronau et al. (2017) p8-9 にて

この方法が使えるのは、事前分布と事後分布の形が似ていて、オーバーラップ していることが条件。

## 速習 Importance Sampling Estimator

- 事後分布と'似ていない'事前分布を使うのではなく、importance density(**重点密度**)  $g_{IS}(\theta)$ を導入。
- ・重点密度の特徴は、**尤度の高いところのθを重点的にサンプリングし、尤度の低いところはあまりサンプリング**しない。
- •以下のようにして $g_{IS}(\theta)$ を導入できる。

$$p(y) = \int p(y|\theta)p(\theta)d\theta$$

$$= \int p(y|\theta)p(\theta)\frac{g_{IS}(\theta)}{g_{IS}(\theta)}d\theta$$

$$= \int \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{g_{IS}(\theta)}g_{IS}(\theta)d\theta$$

$$= \mathbb{E}_{g_{IS}(\theta)}\left(\frac{p(y|\theta)p(\theta)}{g_{IS}(\theta)}\right)$$

## 速習 Importance Sampling Estimator

実際に推定するときは、、、

$$\hat{p}_{2}(y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{p(y|\tilde{\theta}_{i})p(\tilde{\theta}_{i})}{g_{IS}(\tilde{\theta}_{i})} \qquad \tilde{\theta}_{i} \sim g_{IS}(\theta)$$

調整された尤度の平均 重点密度からのサンプル

- 適切な重点密度はどのような特徴をもつべき?
  - ・評価が簡単
  - 事後分布と同一の定義域をもつ
  - 事後分布によく似ている
  - ・事後分布よりも厚い裾(fatter tail)を持つこと

## 速習 Importance Sampling Estimator

- どのように重点密度を決めるか?
  - ・コインの例では、事後分布はβ分布で表せる。そのため適切な重点密度をβ 分布と一様分布の混合分布で定義しようとしている。
  - この際、混合分布におけるベータ分布は、事後分布からのサンプルを使ってモーメント推定をして得たモーメントを用いている。
    - モーメント:β分布でいえばα、βパラメータを指し、正規分布でいえば平均と標準偏差パラメータをさす。
  - 最後に、ベータ分布と一様分布の混合具合を決めるチューニング(重み) パラメータをrを用意し、これによってどっちの分布を多めにチューニン グするかを決めて、重点密度分布からのサンプリングを行う。
    - ※ *r*の調節が大変。

## 速習 Generalized Harmonic Mean Estimator

- Importance Samplingとは対照的で、thinner tailになるようにする。
- そして、事後分布からのサンプルを使って計算するように変更。

$$\frac{1}{p(y)} = \int \frac{1}{p(y)} g_{IS}(\theta) d\theta$$

$$= \int \frac{p(\theta|y)}{p(y|\theta)p(\theta)} g_{IS}(\theta) d\theta$$

$$= \int \frac{g_{IS}(\theta)}{p(y|\theta)p(\theta)} p(\theta|y) d\theta$$

$$= \mathbb{E}_{post} \left( \frac{g_{IS}(\theta)}{p(y|\theta)p(\theta)} \right)$$

$$p(y) = \left(\mathbb{E}_{post}\left(\frac{g_{IS}(\theta)}{p(y|\theta)p(\theta)}\right)\right)^{-1}$$

参考:Importance Sampling

$$p(y) = \mathbb{E}_{g_{IS}(\theta)} \left( \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{g_{IS}(\theta)} \right)$$

- 逆数になっている
- ・ 事後分布からのサンプルを使う

実際に推定するときは、、、

注:  $\theta_j^* 
brace \tilde{\theta}_i$ は、違う分布 からサンプリングされ ていることに注意

- 適切な重点密度はどのような特徴をもつべき?
  - ・評価が簡単
  - 事後分布と同一の定義域をもつ
  - 事後分布によく似ている
  - ・事後分布よりも薄い裾(thinner tail)を持つこと
- コインの例では、事後サンプルが0-1の範囲しか取らないので、 サンプルをまず、プロビット変換して、-∞~∞(正規分布)の範囲 で考えられるようにして、Importance Sampling 同様にモーメント推定を行う。

### 速習 Generalized Harmonic Mean Estimator

#### 重点密度

$$\hat{p}_3(y) = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{g_{IS}(\theta_j^*)}{p(y|\theta_j^*)p(\theta_j^*)}\right)^{-1}$$

尤度 事前分布

 $\theta_j^* \sim p(\theta|y)$ 

注:  $\theta_j^* ext{ } extstyle{ } extstyle{$ 

事後分布からの サンプル

• プロビット変換をして考える場合

#### 重点密度

$$\hat{p}_3(y) = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{\frac{1}{\hat{\sigma}} \phi\left(\frac{\xi_j^* - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right)}{p(y|\Phi(\xi_j^*)) \phi(\xi_j^*)}\right)^{-1}$$

尤度 事前分布

 $\xi_j^* = \Phi^{-1}(\theta_j^*) \text{ and } \theta_j^* \sim p(\theta|y)$ 

事後分布からのサンプル $\theta_j^*$ を プロビット変換したサンプル $\xi_j^*$ 

と表現できる

## ここまでまとめ

- Importance Samplingでは、**重点密度分布からのサンプル\tilde{\theta}\_iを利用**して、周辺尤度を求めようとする。
- Generalized Harmonic Mean Estimatorでは、上記の逆数を考えることで**事後分布からのサンプル\theta\_j^\***から最適な重点密度分布を探して周辺尤度を求めようとした。
- ただ、2つの方法の欠点は、分布の裾に強い仮定(厚いか・薄いか) を置いており、これが高次元空間では満たすことができない。
- どうする?
- ⇒ようやく Bridge Sampler が登場。



## **Bridge Sampling Estimator**

WARP-I

WARP-II

WARP-III

WARP-U

### **Bridge Sampling**

• ここで適当に比を書いてみる。

尤度 事前分布 Bridge関数 提案分布 
$$1 = \frac{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)g(\theta)d\theta}{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)g(\theta)d\theta}$$
 尤度 事前分布 Bridge関数 提案分布

• なんとなく周辺尤度p(y)を両辺に掛けてみる。

$$p(y) = \frac{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)g(\theta)d\theta}{\int \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{p(y)}h(\theta)g(\theta)d\theta}$$

$$= \frac{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)}{\int h(\theta)g(\theta)}\frac{g(\theta)d\theta}{g(\theta)d\theta}$$

$$= \frac{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)}{\int h(\theta)g(\theta)}\frac{g(\theta)d\theta}{g(\theta)d\theta}$$
**EXAMPLE 1**

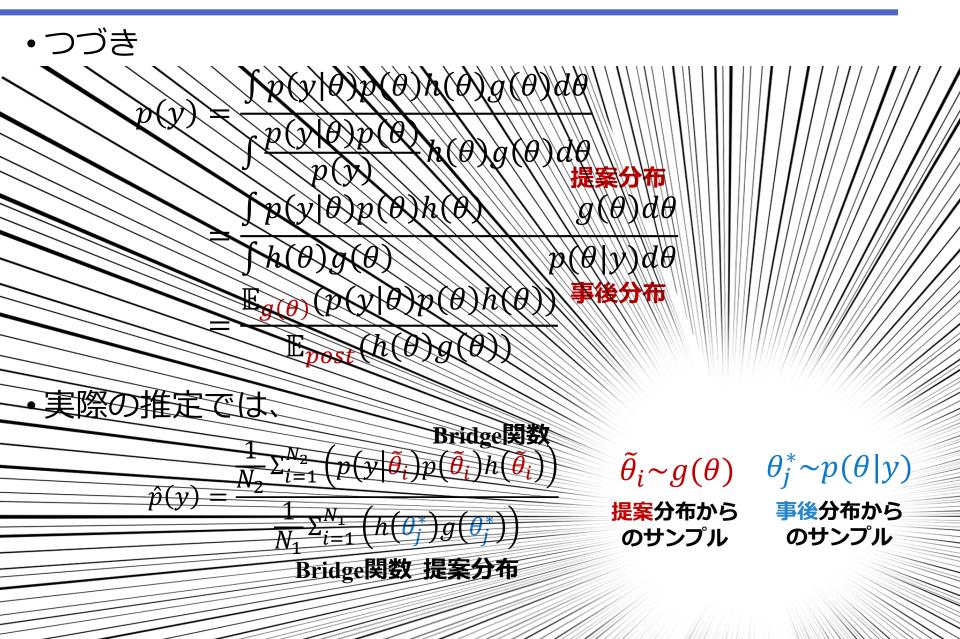
### **Bridge Sampling**

#### • つづき

$$\begin{split} p(y) &= \frac{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)g(\theta)d\theta}{\int \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{p(y)}h(\theta)g(\theta)d\theta} \\ &= \frac{\int p(y|\theta)p(\theta)h(\theta)}{\int h(\theta)g(\theta)} \frac{g(\theta)d\theta}{\int h(\theta)g(\theta)} \\ &= \frac{\mathbb{E}_{g(\theta)}(p(y|\theta)p(\theta)h(\theta))}{\mathbb{E}_{post}(h(\theta)g(\theta))} \end{split}$$

• 実際の推定では、

## **Bridge Sampling**



## おわかりいただけただろうか?

## 提案分布はImportance Samplingのあれ

Importance Sampling

$$\hat{p}_2(y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{p(y|\tilde{\theta}_i)p(\tilde{\theta}_i)}{g_{IS}(\tilde{\theta}_i)} \qquad \tilde{\theta}_i \sim g_{IS}(\theta)$$

調整された尤度の平均 重点密度からのサンプル

Generalized Harmonic Mean Estimator

$$\hat{p}_3(y) = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{g_{IS}(\theta_j^*)}{p(y|\theta_j^*)p(\theta_j^*)}\right)^{-1} \qquad \theta_j^* \sim p(\theta|y)$$

尤度 事前分布

事後分布からの サンプル

Bridge Sampling

## 最適なBridge関数(Meng & Wong, 1996)

• これが最適。相対的なMSE(平均二乗誤差)を最小にできる

ここで、
$$s_1 = \frac{N_1}{N_2 + N_1}$$
,  $s_2 = \frac{N_2}{N_2 + N_1}$ , Cは定数

- ここで問題がある。
  - 周辺尤度p(y)を評価するため $h(\theta)$ を導入したのに、その最適関数に周辺尤度p(y)が入っている。

- ・周辺尤度を求めたいのに周辺尤度を求めないと周辺尤度がわからない。
- ⇒どうする?

## 何回もこれを計算して収束させたものを使おう32

• t回目の最適関数 $h(\theta)$ をt+1回目の周辺尤度 $p(\hat{y})$ の式に代入

$$h(\theta) = C \cdot \frac{1}{s_1 p(y|\theta) p(\theta) + s_2 \hat{p}(y)^t g(\theta)}$$

$$\hat{p}(y)^{t+1} = \frac{\frac{1}{N_2} \sum_{i=1}^{N_2} \frac{p(y|\tilde{\theta}_i) p(\tilde{\theta}_i)}{s_1 p(y|\tilde{\theta}_i) p(\tilde{\theta}_i) + s_2 \hat{p}(y)^t g(\tilde{\theta}_i)}}{\frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \frac{g(\theta_i^*)}{s_1 p(y|\theta_i^*) p(\theta_i^*) + s_2 \hat{p}(y)^t g(\theta_i^*)}}$$

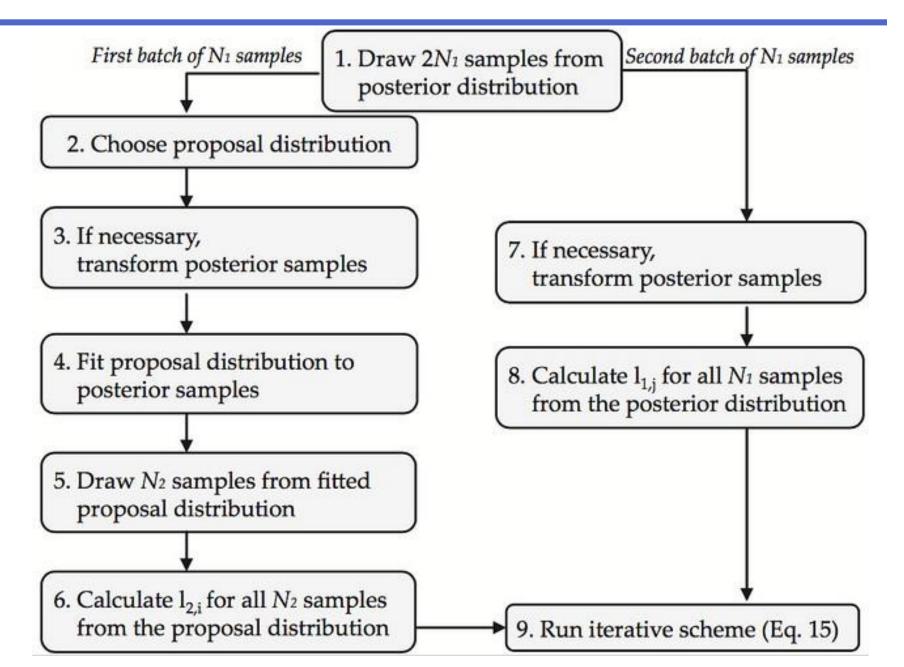
そして、整理した結果

$$s_1 = \frac{N_1}{N_2 + N_1}, s_2 = \frac{N_2}{N_2 + N_1} \quad l_{1,j} = \frac{p(y|\theta_j^*)p(\theta_j^*)}{g(\theta_i^*)} \ l_{2,i} = \frac{p(y|\tilde{\theta}_i)p(\tilde{\theta}_i)}{g(\tilde{\theta}_i)}$$

$$\hat{p}_{4}(y)^{t+1} = \frac{\frac{1}{N_{2}} \sum_{i=1}^{N_{2}} \frac{l_{2,i}}{s_{1} l_{2,i} + s_{2} \hat{p}_{4}(y)^{t}}}{\frac{1}{N_{1}} \sum_{i=1}^{N_{1}} \frac{1}{s_{1} l_{1,j} + s_{2} \hat{p}_{4}(y)^{t}}}$$
事後分布から 提案分布から のサンプル のサンプル のサンプル のサンプル のサンプル のサンプル のサンプル のサンプル

事後分布から 提案分布から のサンプル のサンプル のサンプル 
$$\theta_j^* \sim p(\theta|y)$$
  $\tilde{\theta}_i \sim g(\theta)$ 

## 計算の手順



## 手順

- 1. 推定した事後分布から2×N個のサンプルを抽出してくる。
  - ex) コインを投げた結果が12個あったなら24個サンプルを抽出
  - 半分(奇数番目)を $N_1$ 、半分(偶数番目)を $N_1$ に分けておく。
- 2. 提案分布を選ぶ
  - ex) (多変量)正規分布
- N₁サンプルを正規分布(提案分布)に合うように(今回は)プロビット変換する
- 4. 3.で変換した者を利用して正規分布のモーメント(平均・標準偏差)を推定する。
- 5. 4.の正規分布から $N_2$ サンプルを生成する。
- 6. そのサンプルから<sub>l2.i</sub>を計算する(R等で簡単にできる)。
- 7. 一番はじめに使っていない方の $N_1$ のサンプルを(今回は)プロビット変換する。
- 8. 事後分布を用いて、*l*<sub>1,*i*</sub>を計算する(6.と同様に)。
- 9. ブリッジサンプリングの更新を始める。

## Bridge Samplingの弱点

- 1. 推定した事後分布から2×N個のサンプルを抽出してくる。
  - ex) コインを投げた結果が12個あったなら24個サンプルを抽出
  - ・半分(奇数番目)を $N_1$ 、半分(偶数番目)を $N_1$ に分けておく。

#### 2. 提案分布を選ぶ

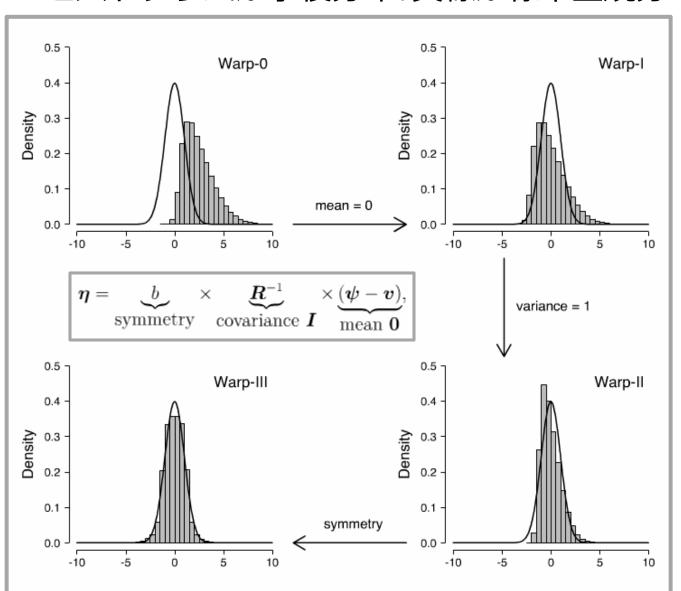
- ex) (多変量)正規分布
- 3.  $N_1$  サンプルを正規分布(提案分布)に合うように(今回は)プロビット変換する
- 4. 3.で変換した者を利用して正規分布のモーメント(平均・標準偏差)を推定する。
- 5. 4.の正規分布から $N_2$ サンプルを生成する。
- 6. そのサンプルから $l_{2,i}$ を計算する(R等で簡単にできる)。
- 7. 一番はじめに使っていない方の $N_1$ のサンプルを(今回は)プロビット変換する。
- 8. 事後分布を用いて、 $l_{1,i}$ を計算する(6.と同様に)。
- 9. ブリッジサンプリングの更新を始める。

## Bridge Samplingの弱点

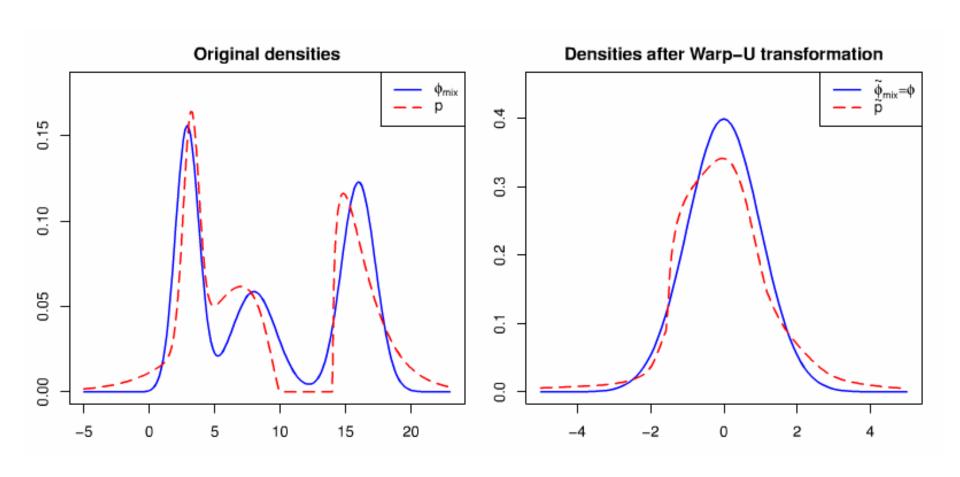
- 他の近似方法よりも仮定は緩いが、事後分布と提案分布が似ていて、オーバーラップしている必要がある。
- これがかなり大事で、ダメだと推定できなくなってしまう。
- どうしようか?
  - WARP-III Bridge Sampling
  - ⇒mean/scale/skewness(歪度)を調整する方法
  - WARP-U Bridge Sampling
  - ⇒混合分布のようなmulti-modal(多峰)な分布でも上記のよう な調整を行う方法

### WARP-III Gronau et al. (2017) Fig.2

・ヒストグラムが事後分布。実線が標準正規分布(提案分布)

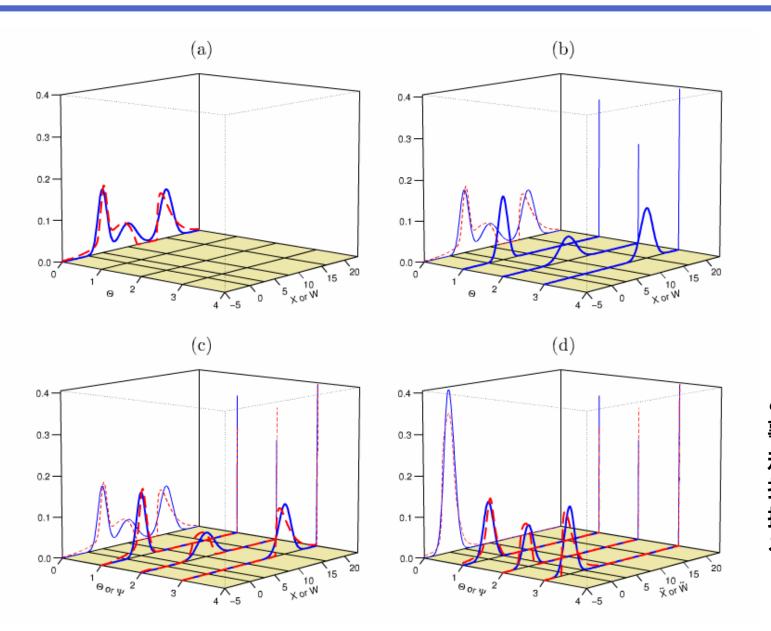


この方法で大事なことは 正規化定数を維持したま ま変換を行っている。



この方法で大事なことは正規化定数を維持したまま変換を行っている。

## **WARP-U Wang & Meng (2016) Fig.3-4**



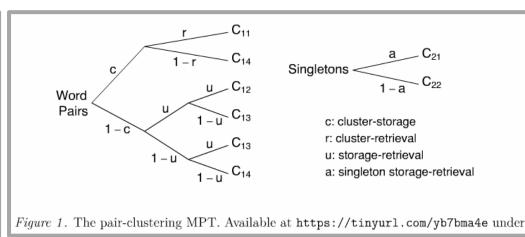
この方法で大 事なことは正 規化定数を維 持したまま変 換を行ってい る。

# Bridge Samplingを用いた実際の研究

## BridgeSamplingを用いた心理系論文

- IGT課題でのモデル比較 Gronau et al.(2017)
  - Importance Samplingで算出した対数周辺尤度とBridgeSamplingで算出した対数周辺尤度の一致率を示した研究
  - そして、BridgeSamplingを用いて、個人差を考慮した階層モデルにおける 周辺尤度を算出した。
- MPTモデルでのモデル比較 Gronau et al.(2017)
  - 人の認知過程をモデリングしたMPTモデルで、BridgeSamplingを用いて BFを算出した研究。
  - ・これまで不可能だった階層MPTモデルにおけるBFを算出し、異なるパラメータ制約のモデルを8つ作り、比較を行った。





#### ↑申し訳程度のIRTっぽい要素

## 今日のまとめ

- BridgeSamplingは昔からある方法だが、WARPという計算方法?によってオーバーラップ力を挙げて、BFの計算が正確にできるようになった。
- StanとJAGSでWARP-III Bridge Samplingを行うパッケージ"BridgeSampling"がこの前公開された(WARP-Uは搭載されていない模様)。
- ・今回は、資料作成が遅くなってしまい、実装方法がまとめられませんでしたが、興味がある方がいればご説明いたします。
- パッケージの開発者達の講演をこの前の国際学会で聞きましたが、 Stanコードが書ける人なら誰でもOKといっていたので、皆さんなら Bridge Samplingができないわけがない。
- BF出してみたいデータがある。なんかやり方よくわからねぇ...
- **⇒いつでも共同研究のご相談お待ちしています。**

# あなたの心に Bridge Sampling 私とあなたの Bayes Factor を求めよう

Bridgeサンプリングを用いたベイズモデルの評価 –専修大学大学院 文学研究科 M2 北條大樹

時間があれば、Rで実践します!!!!!