

## 2. 確率とベリーフ(1)

植野真臣  
電気通信大学  
大学院情報システム学研究所

## 教科書正誤表

<http://www.ai.is.uec.ac.jp/lecture/>

## 1. 確率

定義1 ( $\sigma$  集合体)  
 $\Omega$  を標本空間 (sample space) とし,  $A$  が以下の条件を満たすならば  $\sigma$  集合体 ( $\sigma$ -field) と呼ぶ.

1.  $\Omega \in A$
2.  $A \in A \Rightarrow A^c \in A$  (ただし,  $A^c = \Omega \setminus A$ )
3.  $A_1, A_2, \dots \in A \Rightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in A$

つまり, たがいに素な事象の和集合により新しい事象を生み出すことができ, それらすべての事象を含んだ集合を  $\sigma$  集合体と呼ぶ.  
 $\sigma$  集合体上で確率 (probability) は以下のように定義される.

定義2 (確率測度)  
いま,  $\sigma$  集合体  $A$  で, つぎの条件を満たす測度 (measure)  $P$  を, 確率測度 (probability measure) と呼ぶ (Kolmogorov 1933).

1.  $A \in A$  について,  $0 \leq P(A) \leq 1$
2.  $P(\Omega) = 1$
3. たがいに素な事象列  $\{A_n\}_{n=1}^{\infty}$  に対して,  $P\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n)$

## 3. 頻度論による確率

頻度論

コインを何百回も投げて表が出た回数 (頻度) を数えて, その割合を求めることを考えよう. いま, 投げる回数を  $n$  とし, 表の出た回数  $n_1$  とすると,  $n \rightarrow \infty$  のとき,

$$\frac{n_1}{n} \rightarrow \frac{1}{2}$$

となることが予想される. このように, 何回も実験を繰り返して  $n$  回中,

事象  $A$  が  $n_1$  回出たとき,  $\frac{n_1}{n}$  を  $A$  の確率と解釈するのが頻度主義である.

しかし, この定義では真の確率は無限回実験をしなければならぬので得ることは不可能である. また, 科学的実験が可能な場合にのみ確率が定義され, 実際の人間が扱う不確かさに比べてきわめて限定的になってしまう.

## 4. 主観確率

例えば, 以下のような主観確率の例がある.

1. 第三次世界大戦が20XX年までに起こる確率が $\delta$ 0.01
2. 明日, 会社の株式の価格が上がる確率が $\delta$ 0.35
3. 来年の今日, 東京で雨が降る確率が $\delta$ 0.5

ベイズ統計では, これらの主観確率は個人の意思決定のための信念として定義され, ベリーフ (belief) と呼ばれる. 当然, 頻度論的確率を主観確率の一種とみなすことができるが, その逆は成り立たない.

本授業では, ベイズ統計の立場に立ち, 確率をベリーフの立場で解釈する.

## 条件付き確率

定義3 (条件付き確率)  
 $A \in A, B \in A$  について, 事象  $B$  が起こったという条件の下で, 事象  $A$  が起こる確率を条件付き確率 (conditional probability) と呼び,

$$P(A | B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

で示す. このとき  $P(A | B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$  より以下の乗法公式が成り立つ.  
定理5 (乗法公式)

$$P(A \cap B) = P(A | B)P(B)$$

このとき,  $P(A \cap B)$  を  $A$  と  $B$  の同時確率 (joint probability) と呼ぶ.

## 独立性

### 定義4 (独立)

ある事象の生起する確率が、他のある事象が生起する確率に依存しないとき、二つの事象は独立 (independent) であるという。すなわち事象  $A$  と事象  $B$  が独立とは  $P(A | B) = P(A)$  であり、

$$P(A \cap B) = P(A)P(B)$$

が成り立つことをいう。

## チェーンルール

さらに乗法公式を一般化すると以下のチェーンルールが導かれる。

$$P(A \cap B \cap C) = P(A | B \cap C)P(B | C)P(C)$$

3 個以上の事象にも拡張できるので、チェーンルール (chain rule) は

以下のように書ける。

### 定理6 チェーンルール

$N$  個の事象  $\{A_1, A_2, \dots, A_N\}$  について

$$P(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_N)$$

$$= P(A_1 | A_2 \cap A_3 \cap \dots \cap A_N)P(A_2 | A_3 \cap A_4 \cap \dots \cap A_N) \dots P(A_N)$$

が成り立つ。

## 5. 全確率の定理

### 定理7 (全確率の定理 (total probability theorem))

たがいに背反な事象  $A_1, A_2, \dots, A_n$  ( $A_i \in \mathcal{A}$ ) が全事象  $\Omega$  を分割しているとき、事象  $B \in \mathcal{A}$  について、

$$P(B) = \sum_{i=1}^n P(A_i)P(B|A_i) \text{ が成り立つ。}$$

## 6. ベイズの定理

### 定理8 (ベイズの定理 (Bayes' theorem))

たがいに背反な事象  $A_1, A_2, \dots, A_n$  が全事象  $\Omega$  を分割しているとする。

このとき、事象  $B \in \mathcal{A}$  について、

$$P(A_i | B) = \frac{P(A_i)P(B|A_i)}{\sum_{i=1}^n P(A_i)P(B|A_i)}$$

が成り立つ。

## 例題

例1 昔、ある村にうそつき少年がいた。少年はいつも「オオカミが来た！！」と大声で叫んでいたが、いままで本当だったことがない。

「オオカミが来た」という事象を  $A$

少年が「オオカミが来た！！」と叫ぶ事象を  $B$

とし、 $P(B | A) = 1.0$ ,  $P(B | A^c) = 0.5$ ,  $P(A) = 0.005$  とする。少年が「オオカミが来た！！」と叫んだとき実際にオオカミが来ている確率を求めてみよう。

## 例題

例1 昔、ある村にうそつき少年がいた。少年はいつも「オオカミが来た！！」と大声で叫んでいたが、いままで本当だったことがない。

「オオカミが来た」という事象を  $A$

少年が「オオカミが来た！！」と叫ぶ事象を  $B$

とし、 $P(B | A) = 1.0$ ,  $P(B | A^c) = 0.5$ ,  $P(A) = 0.005$  とする。少年が「オオカミが来た！！」と叫んだとき実際にオオカミが来ている確率を求めてみよう。

## 例題

例2 あるコピー機はトレーの紙の置き方が悪い(Aと書く)と故障する(Bと書く)ことが多い。

今,  $P(B|A) = 0.8$ ,  $P(B|A^c) = 0.1$ ,  $P(A) = 0.1$  とする。

コピー機が故障したときの, 原因が紙の置き方である確率を求めてみよう。

## 7. ビリーフ

ベイズ統計では, より広い確率の解釈として「ビリーフ」(belief)を用いることは先に述べた。ここでは考え方のみについてふれよう。意思決定問題から個人的な主観確率であるビリーフが以下のように求められる。

例えば, つぎの二つの賭けを考えよう。

- もしオオカミが来ていれば1万円もらえる。
- 赤玉 $n$ 個, 白玉 $100-n$ 個が入っている合計100個の玉が入っている壺の中から一つ玉を抜き出し, それが赤玉なら1万円もらえる。

どちらの賭けを選ぶかといわれれば, 2番目の賭けで赤玉が100個ならば, 誰もが迷わず2番目の賭けを選ぶだろうし, 逆に $n=0$ ならば, 1番目の賭けを選ぶだろう。この二つの賭けがちょうど同等になるように $n$ を設定することができれば,  $\frac{n}{100}$ があなたの「オオカミが来る」ビリーフになる。このように, ベイズ統計における確率の解釈「ビリーフ」は頻度主義の確率で扱える対象を拡張でき, 個人的な信念やそれに基づく意思決定をも合理的に扱えるツールとなる。

ビリーフを用いてもう一度例を振り返ろう。例1では, もともののオオカミが来る確率 $P(A) = 0.005$ が, (うそかどうか分からない)少年の報告により

$P(A|B) = 0.00995$ と約2倍にビリーフが更新されていることがわかる。すなわち, うそをつく少年の証言によって事前のビリーフが事後のビリーフに更新されたのである。このとき, ベイズ統計では,

少年の証言を「エビデンス」(evidence)と呼び, 事前のビリーフを「事前確率」(prior probability), 事後のビリーフを「事後確率」(posterior probability)

と呼ぶ

## 例題

例3 (3囚人問題)

ある監獄にアラン, バーナード, チャールズという3人の囚人がいて, それぞれ独房に入れられている。3人は近く処刑される予定になっていたが, 恩赦が出て3人のうち1人だけ釈放されることになったという。

誰が恩赦になるかは明かされておらず, それぞれの囚人が「私は釈放されるのか?」と聞いても看守は答えない。

囚人アランは一計を案じ, 看守に向かって「私以外の2人のうち少なくとも1人は死刑になるはずだ。その者の名前が知りたい。私のことじゃないんだから教えてくれてもいいだろう?」と頼んだ。

すると看守は「バーナードは死刑になる」と教えてくれた。それを聞いたアランは「これで釈放される確率が $1/3$ から $1/2$ に上がった」とひそかに喜んだ。果たしてアランが喜んだのは正しいのか?

## ヒント

アランが釈放されることをA, バーナードが釈放されることをB, チャールズが釈放されることをCと書く。今, 誰が釈放されるかはわからないので,

$P(A) = \frac{1}{3}$ ,  $P(B) = \frac{1}{3}$ ,  $P(C) = \frac{1}{3}$ . 看守の証言をEとする。

$P(E|A) = ?$ ,  $P(E|B) = ?$ ,  $P(E|C) = ?$

$$P(A|E) = \frac{P(A)P(E|A)}{P(A)P(E|A) + P(B)P(E|B) + P(C)P(E|C)}$$

を求めよ。

## 例題4

三つの壺A, B, Cにそれぞれ赤玉, 白玉がある割合で入っている。Aには赤玉の数:白玉の数は1:1でBには2:1, Cでは1:2の割合で入っている。今, 三つの壺A, B, Cのうち, 一つが用いられており, 4回, 壺の中の玉を引いたところ, 赤, 白, 赤と玉を引いた。三つの壺のうち, どの壺を使っているのだろうか?

### 尤度

それぞれの壺でデータパターン $D=(赤玉、白玉、赤玉)$ が出る確率 $P(D|A), P(D|B), P(D|C)$ を求めた。

これらを「尤度」と呼ぶ。事前確率を考えず、尤度だけを考えるフィッシャーたちの学派を尤度派と呼ぶ。

### レポート課題

あなたの研究分野において、ベイズの定理を用いた推論の良い例を考え、レポートせよ。

提出締め切り 5月12日

Samuraiに提出

同グループのすべての学生のレポートを読み、コメントと点数をつけよ。

評価の締め切り 5月19日

## 8. 確率変数

定義5

頻度論

これから試行する実験の結果、実験結果として取り得る値

主観確率

確率法則に従う不確かな変数。

## 8. 同時確率分布

定義6

いま、 $m$ 個の確率変数をもつ確率分布 $p(x_1, x_2, \dots, x_m)$ を変数 $x_1, x_2, \dots, x_m$ の**同時確率分布**(joint probability distribution)と呼ぶ。

## 9. 周辺確率分布

定義7

$x_i$  のみに興味がある場合、同時確率分布から $x_i$  の確率分布は、離散型の場合、

$$p(x_i) = \sum_{x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_m} p(x_1, x_2, \dots, x_m)$$

連続型の場合、

$$p(x_i) = \int p(x_1, x_2, \dots, x_m) dx_1, \dots, dx_{i-1}, dx_{i+1}, \dots, dx_m$$

で求められ、 $p(x_i)$  を離散型の場合、**周辺確率分布**(marginal probability distribution)、連続型の場合、**周辺密度関数**(marginal probability density function)と呼ぶ。

## 10. 確率分布とパラメータ

定義8 (パラメータ空間と確率分布)

$k$ 次元パラメータ集合を $\Theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k\}$ と書くとき、確率分布は以下のような関数で示される。

$$f(x|\Theta)$$

すなわち、確率分布 $f(x|\Theta)$ の形状はパラメータ $\Theta$ のみによって決定され、パラメータ $\Theta$ のみが確率分布 $f(x|\Theta)$ を決定する情報である。

例3 コインを $n$ 回投げたとき、表が出る回数を確率変数 $x$ とした確率分布は以下の二項分布に従う。

$$f(x|\theta, n) = \binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

ここで、 $\theta$ は、コインの表が出る確率のパラメータを示す。

## 11. 尤度原理(フィッシャー)

定義9 (尤度)  $X = (X_1, \dots, X_i, \dots, X_n)$  が確率分布  $f(X_i|\theta)$  に従う  $n$  個の確率変数とする。  
 $n$  個の確率変数に対応したデータ  $x = (x_1, \dots, x_n)$  が得られたとき、

$$L(\theta|x) = \prod_{i=1}^n f(x_i|\theta)$$

を尤度関数 (likelihood function) と定義する (Fisher, 1925).

## 尤度の例

例4 コインを  $n$  回投げたとき、表が出た回数が  $x$  回であったときのコインの表が出るパラメータ  $\theta$  の尤度は

$$L(\theta|n, x) \propto \binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

もしくは、

$$L(\theta|n, x) \propto \binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

でもよい。

尤度は、データパターンが観測される確率に比例する、パラメータ  $\theta$  の関数である。尤度は確率の定義を満たす保証がないために確率とは呼べないが、これを厳密に確率分布として扱うアプローチが後述するベイズアプローチである。

尤度を最大にするパラメータ  $\theta$  を求めることは、データを生じさせる確率を最大にするパラメータ  $\theta$  を求めることになり、その方法を**最尤推定法** (maximum likelihood estimation, MLE) と呼ぶ。

## 最尤推定値

定義10 (最尤推定量)

データ  $x$  を所与として、以下の尤度最大となるパラメータを求めるとき、

$$L(\theta|x) = \max\{L(\theta|x): \theta \in C\}$$

$\hat{\theta}$  を最尤推定量 (maximum likelihood estimator) と呼ぶ (Fisher 1925).

ただし、 $C$  はコンパクト集合を示す。

## 例題

例5 (二項分布の最尤推定)

コインを投げて  $n$  回中  $x$  回表が出たときの確率  $\theta$  の最尤推定値を求めよ。

## 例題

例6 (正規分布)

$$f(x_i|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left\{-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

について、データ  $(x_1, \dots, x_n)$  を得たときの平均値パラメータ  $\mu$ 、および分散パラメータ  $\sigma^2$  の最尤推定値を求めよ。

## 強一貫性

定義11 (強一貫性)

推定値  $\hat{\theta}$  が真のパラメータ  $\theta^*$  に概収束するとき、 $\hat{\theta}$  は強一致推定値 (strongly consistent estimator) であるという。

$$P(\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\theta} = \theta^*) = 1.0$$

つまり、データ数が大きくなると推定値が必ず真の値に近づいていくとき、その推定量を強一致推定値と呼ぶ。

### 最尤推定値の一致性

定理9 (最尤推定値の一致性)

最尤推定値 $\hat{\theta}$ は真のパラメータ $\theta^*$ の強一致推定値である(Wald,1949).

### 最尤推定値の漸近正規性

定義12

$\theta^*$ の推定値 $\hat{\theta}$ が漸近正規推定量(asymptotically normal estimator)であるとは、 $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta^*)$ の分布が正規分布に分布収束することをいう。すなわち、任意の $\theta^* \in \Theta^*$ と任意の実数に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\frac{\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta^*)}{\sigma(\theta^*)} \leq x\right) = \Phi(x)$$

このことを、 $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta^*) \xrightarrow{as} N(0, \sigma^2(\theta^*))$ と書く。 $\sigma^2(\theta^*)$ を漸近分散(asymptotic variance)という。

### 最尤推定値の漸近正規性

定理10

確率密度関数が正則条件(regular condition)の下で、微分可能のとき、

最尤推定量は漸近分散 $I(\theta^*)^{-1}$ をもつ漸近正規推定量である。

$$I(\theta^*) = E_{\theta} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \ln L(\theta | \mathbf{x}) \right)^2 \right]$$

をフィッシャー(Fischer)の情報量と呼ぶ。

### 演習

母集団の確率分布がポアソン分布

$$p(x) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} \quad (\lambda > 0, x = 0, 1, \dots)$$

について $n$ 回の観測を行ったところ

データ  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$

を得た。 $\lambda$ を最尤推定せよ。

### より複雑なモデル

$$y_i = w_0 + w_1 x_{i1} + w_2 x_{i2}^2 + \varepsilon_i,$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

入力  $(x_1, x_2, y)(i=1, \dots, n)$ データファイル の読み込み

パラメータ $w_0, w_1, w_2, \sigma^2$ を最尤推定せよ。

### 尤度は

$$L = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^n \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{2\sigma^2}\right)$$

対数尤度は

$$l = n \log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right) - \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{2\sigma^2}$$

非線形モデルは解析的に解くのが難しい

### 数値計算法

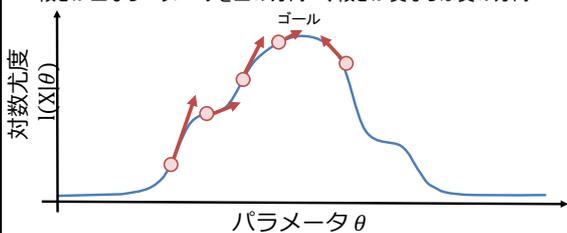
パラメータ推定値が解析的に求まらない場合には数値計算によって求める

#### 代表的な手法

- 勾配上昇法
- ニュートン・ラフソン法

### 勾配上昇法(最急上昇法)

適当な初期値から、勾配方向にパラメータを更新することで極値(勾配0)を求める  
傾きが正ならパラメータを正の方向へ、傾きが負ならば負の方向へ



最小値を求める問題の場合は 勾配降下法(最急降下法)と呼ばれる

### 勾配上昇法のアルゴリズム

パラメータ集合  $\theta = \{\theta_1 \dots \theta_N\}$ , 対数尤度関数  $l(X|\theta)$

#### アルゴリズム

1. 各パラメータ  $\{\theta_1 \dots \theta_N\}$  に適当な初期値を付与
2. 対数尤度関数の偏微分方向に微分値の  $\eta$  倍更新  

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \eta \frac{\partial l(X|\theta)}{\partial \theta_n} : \forall n$$
3. 以下の収束条件を満たす(全てのパラメータ更新量が十分小さくなる  $= \epsilon$  以下になる)まで2.を反復

$$\eta \frac{\partial l(X|\theta)}{\partial \theta_n} \leq \epsilon : \forall n$$

### 一階偏微分

$$l = n \log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right) - \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{2\sigma^2}$$

$$\frac{\partial l}{\partial w_0} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)}{\sigma^2}$$

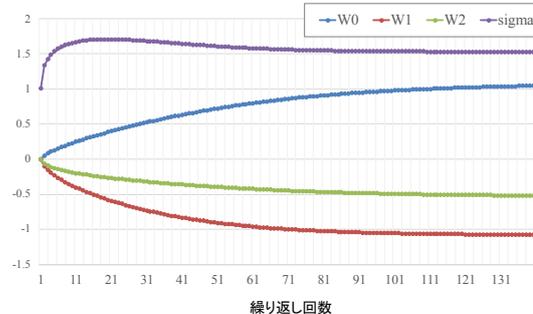
$$\frac{\partial l}{\partial w_1} = \sum_{i=1}^n \frac{x_{i1}(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)}{\sigma^2}$$

$$\frac{\partial l}{\partial w_2} = \sum_{i=1}^n \frac{x_{i2}^2(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)}{\sigma^2}$$

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma} = -\frac{n}{\sigma} + \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{\sigma^3}$$

### 推定例

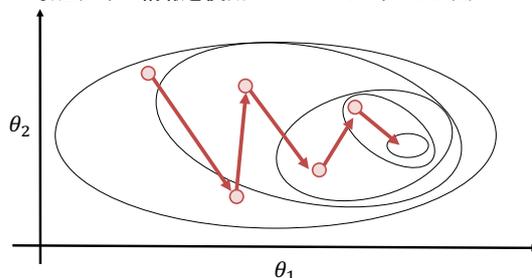
$\eta = 0.0001, \epsilon = 0.001$  サンプルサイズ1000  
真値:  $w_0 = 1.0, w_1 = -1.0, w_2 = -0.5, \sigma = 1.5,$



プログラムは授業ホームページ上に掲載しています。

### 勾配上昇法の問題

勾配情報のみで更新方向を決定するため効率が悪い  
勾配以外の情報を使用 ⇨ ニュートン・ラフソン法



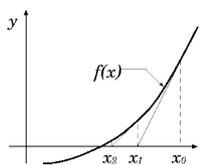
### ニュートンラフソン法

方程式  $f(x) = 0$  を解く手法。  
最大値問題の場合は、偏微分  $f'(x) = 0$  となる  $x$  を求める方程式を解けばよい。

### ニュートンラフソン法

方程式  $f(x) = 0$  を解く手法。  
最大値問題の場合は、偏微分  $f'(x) = 0$  となる  $x$  を求める方程式を解けばよい。

### ニュートン ラフソン法



$f(x) = 0$  を解く。  
図のように適当な初期値  $x_0$  において  $f(x)$  に接線を引けば、接線の方程式は  
 $y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$

X軸との交点は

$$x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$$

次に  $x_1$  での  $f(x)$  への接点と X 軸との交点を求める。これを繰り返す。

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}$$

### ニュートン法はテーラー近似

非線形関数の方程式  $f(x_n) = 0$  を解きたい。  
 $f(x_n)$  を  $x_{n-1}$  のまわりでテーラー展開すると  
 $f(x_n) = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) + O((x_n - x_{n-1})^2)$

$f(x_n) = 0$  より

$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) = 0$$

これより、

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}$$

### ニュートン法はテーラー近似

非線形関数の方程式  $f(x_n) = 0$  を解きたい。  
 $f(x_n)$  を  $x_{n-1}$  のまわりでテーラー展開すると  
 $f(x_n) = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) + O((x_n - x_{n-1})^2)$

$f(x_n) = 0$  より  
 $f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) = 0$   
 これより、

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}$$

### 例

$f(x) = x^2 - 2 = 0$  を解け。  
 $f'(x) = 2x$

より

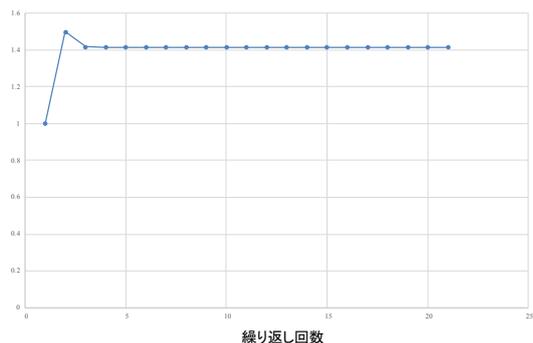
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x^2 - 2}{2x_n} = \frac{1}{2} \left( x_n + \frac{2}{x_n} \right)$$

初期値 1.0とする

### 数値例

推定値の遷移



### 最尤法でのニュートン・ラフソン法 ( $\theta$ が多次元の場合)

勾配(1階微分)に加えて、曲率(2階微分)を利用

パラメータ集合  $\theta = \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$ , 対数尤度関数  $l(X|\theta)$  とするとき、対数尤度関数の勾配行列  $g(\theta)$  と2階微分行列:ヘッセ行列  $H(\theta)$  をそれぞれ以下で表す

$$g(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial l(X|\theta)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial l(X|\theta)}{\partial \theta_n} \end{bmatrix}, \quad H(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 l(X|\theta)}{\partial \theta_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 l(X|\theta)}{\partial \theta_1 \partial \theta_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 l(X|\theta)}{\partial \theta_n \partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial^2 l(X|\theta)}{\partial \theta_n^2} \end{bmatrix}$$

### ニュートン・ラフソン法のアルゴリズム

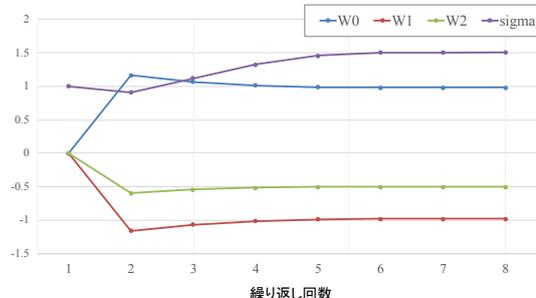
パラメータ集合  $\theta = \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$ , 対数尤度関数  $l(X|\theta)$

#### アルゴリズム

1. 各パラメータ  $\{\theta_1, \dots, \theta_N\}$  に適当な初期値を付与
2. 対数尤度関数の偏微分方向に微分値の  $\eta$  倍更新  
 $\theta = \theta - \eta H(\theta)^{-1} g(\theta)$
3. 収束条件を満たす(全てのパラメータ更新量が十分小さくなる  $= \epsilon$  以下になる)まで2.を反復

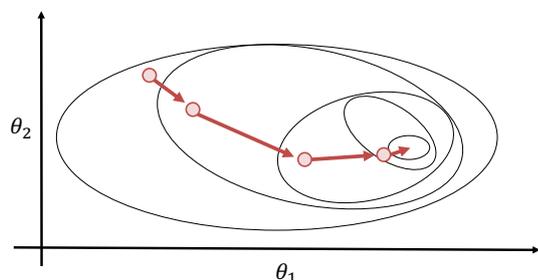
### 推定例

$\eta = 1.0, \epsilon = 0.001$  サンプルサイズ1000  
 真値:  $w_0 = 1.0, w_1 = -1.0, w_2 = -0.5, \sigma = 1.5,$



## ニュートン・ラフソン法のイメージ

曲率(勾配の変動)が大きい場所では更新幅を小さくし、曲率が小さい場所では大きく更新



## 数値計算法の注意点

### 初期値依存

- 初期値によって推定値が発散することがある
- 発散したと判断される場合にはランダムに初期値を振り直して再スタートするなどの工夫が必要

### 学習率 $\eta$ の設定

- 小さすぎると1ステップあたりの更新幅が小さくなり、収束に時間がかかる
- 大きすぎると極値を飛び越えてしまい収束しにくくなる。また、発散の可能性も高まる
- 適切な値を経験的に設定する必要がある

### 収束判定閾値 $\epsilon$ の設定

- 十分に小さく取るべき(例えば、0.001)だが、小さくするほど収束に時間がかかる

## レポート:ロジスティック回帰のプログラムソースを開発せよ。(C,C++,JAVAなど)

$$y_i = \frac{1}{1 + \exp(-ax_i - b)} + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

入力  $(x_i, y_i)(i=1, \dots, n)$  データファイル の読み込み  
パラメータ  $a, b$  の推定値

勾配上昇法とニュートン ラフソン法のプログラムをひとつづつ作成せよ。  
提出物  
プログラムの ソース  
次ページのレポート

Samuraiに提出 締め切り 5月19日

同グループのすべての学生のレポートを読み、コメントと点数をつけよ。  
評価の締め切り 5月26日

## 乱数データ発生プログラムと解析結果

$x_i \sim N(0, 1^2)$   
でデータ数 20, 50, 100個 それぞれ発生する。  
それぞれのデータ  $x_i$  について  $a = 0.8, b = -0.3$  と設定する。

$$y_i = \frac{1}{1 + \exp(-ax_i - b)} + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, 0.1^2)$$

により、データ数 20, 50, 100個 それぞれ発生する。  
結果、 $(x, y)$  の組み合わせが20個、50個、100個の3種類のデータがそろろう。  
20個、50個、100個の3種類のデータに対して  
ニュートンラフソン法のプログラム、勾配上昇法のプログラムで  
 $(a, b)$  の推定値と真値の誤差、フィッシャー情報量を用いた漸近誤差、推定平均時間、を求め、レポートで解析せよ。ただし、尤度、数値計算で必要な偏微分式も書け。