2. ビリーフとベイズの定理

植野真臣 電気通信大学 情報理工学研究科 情報数理工学プログラム

スケジュール

4月12日 ベイズ的人工知能への招待 4月19日 ベイズの定理

4月26日 ベイズの定理

5月10日 ベイズはコンピュータ、人工知能の父である!! 5月17日 アランチューリングとベイズ

5月24日 ベイズから機械学習へ

5月31日

6月7日 尤度推定と機械学習

6月14日 尤度推定と機械学習2 6月21日 ベイズ推定と機械学習 ベイズ推定と機械学習

6月28日 確率的グラフィカルモデルベイジアンネットワーク

7月5日 ベイジアンネットワークの推論 7月12日 ベイジアンネットワークと他の機械学習モデルとの関係

7月19日 ベイズ分類機

8月16日 テストと総括

1. 頻度論による確率

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 ϵ_n とし、表の出た回数 n_1 とすると、 $n\to\infty$ のとき、 $\frac{n_1}{n}\to\frac{1}{2}$

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, $\frac{n_1}{2}$ δA 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 をしなければならないので得ることは不可能で ある.

2. 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
- 2. 明日, 会社の株式の価格が上がる確率が0.35
- 3. 来年の今日. 東京で雨が降る確率が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、ビリーフ (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、その逆は成り立せない。

3. 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 probablity)と呼び,

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

で示す.

4. 同時確率

 $P(A \mid B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$ より以下の乗法公式が 成り立つ.

定理5(乗法公式)

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

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

5. 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 $P(A \mid B) = P(A)$ であり、

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

が成り立つことをいう.

6. 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.

 $P(A \cap B \cap C) = P(A \mid B \cap C)P(B \mid C)P(C)$ 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.

6. チェーンルール

定理6 チェーンルール N 個の事象 $\{A_1, A_2, \cdots, A_N\}$ について $P(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_N)$ $= P(A_1/A_2 \cap A_3 \cap \cdots \cap A_N)P(A_2/A_3 \cap A_4 \cap \cdots \cap A_N)$

7. 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 , · · · , A_n ($A_i \in A$) が全事象 Ω を分割しているとき, 事象 $B \in A$ について.

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

8. 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, \cdots, A_n が全事 象 Ω を分割しているとする. このとき、事象 $B \in A$ 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1

キリストの弟子たちはキリストの復活を望んでいました。あまりに臨みが強すぎて少し似ているだけの人でもキリストに見えてしまうことがあります。弟子がキリストの復活を見たと証言する事象をA、実際にキリストが復活したという事象をBとする. P(A|B) = 1.0, $P(A|\neg B) = 0.5$, P(B) = 0.000001 とする. ある弟子がキリストの復活を見たと証言したとき、本当にキリストが復活した確率を求めてみよう.

回答

$$P(A|B) = 1.0, P(A|\neg B) = 0.5,$$

$$P(B) = 0.000001$$

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

$$= \frac{0.000001 \times 1.0}{0.000001 \times 1.0 + (1 - 0.000001) \times 0.5}$$

⇒ 0.000002 約2倍になった!!

例題1-2

この後、30人の弟子が独立にキリストの 復活を見たと証言した。本当にキリスト が復活した確率を求めてみよう.

 $P(A|B) = 1.0, P(A|\neg B) = 0.5, P(B) = 0.0000002$ とする.

回答

$$P(A|B) = 1.0, P(A|\neg B) = 0.5,$$

$$P(B) = 0.000002 \text{ Ly}$$

$$P(B|A) = \frac{P(B)P(A|B)^{30}}{P(B)P(A|B)^{30} + P(\neg B)P(A|\neg B)^{30}}$$

$$= \frac{0.000002 \times 1.0^{30}}{0.000002 \times 1.0^{30} + (1 - 0.000002) \times 0.5^{30}}$$

$$= 0.99953$$

例題1-3

実際は11人の弟子がキリストの復活を見たと証言した。本当にキリストが復活した確率を求めてみよう.

P(A|B) = 1.0, P(A|¬B) = 0.5, P(B) = 0.000001とする.

回答

$$P(A|B) = 1.0, P(A|\neg B) = 0.5,$$

$$P(B) = 0.000001 \text{ Ly}$$

$$P(B|A) = \frac{P(B)P(A|B)^{11}}{P(B)P(A|B)^{11} + P(\neg B)P(A|\neg B)^{11}}$$

$$= \frac{0.000001 \times 1.0^{11}}{0.000001 \times 1.0^{11} + (1 - 0.0000001) \times 0.5^{11}}$$

$$= 0.002044$$

9. ビリーフ(信念)

つぎの二つの賭けを考えよう.

1. もしキリストが復活していれば1 万円もらえる.

2. 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「キリストが復活した」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。

例1 では、もともとのキリストが復活する確率 P(B) が、弟子の報告により $P(B \mid A)$ にビリーフが更新されていることがわかる。 すなわち、弟子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、

弟子の証言を「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2

被害者Xはある日狙撃された。この事象をEとしよう。

命中率8割のスナイパーAと2割のスナイパーBのどちらかが犯人であることが分かっている。今、どちらが犯人かは全くわからない。

それぞれが犯人である確率を求めよ。

回答

AかBかわからないので

$$P(A) = P(B) = \frac{1}{2}$$

$$P(A|E) = \frac{\frac{1}{2} \cdot 0.8}{\frac{1}{2} \cdot 0.8 + \frac{1}{2} \cdot 0.2} = \frac{0.4}{0.5} = 0.8$$

$$P(B|E) = \frac{\frac{1}{2} \cdot 0.2}{\frac{1}{2} \cdot 0.8 + \frac{1}{2} \cdot 0.2} = \frac{0.1}{0.5} = 0.2$$

例題つづき

そのあとさらに2発Xに銃弾が打たれたが2発とも外れた。この事象をEとしてそれぞれが犯人である確率を求めよ。

回答

$$\begin{split} P(A) &= 0.8, P(B) = 0.2 \\ P(A|E) &= \frac{0.8 \cdot (1 - 0.8) \cdot (1 - 0.8)}{0.8 \cdot (1 - 0.8) \cdot (1 - 0.8) + 0.2 \cdot (1 - 0.2) \cdot (1 - 0.2)} \\ &= \frac{0.032}{0.032 + 0.128} = 0.2 \\ P(B|E) &= \frac{0.2 \cdot (1 - 0.2) \cdot (1 - 0.2)}{0.8 \cdot (1 - 0.8) \cdot (1 - 0.8) + 0.2 \cdot (1 - 0.2) \cdot (1 - 0.2)} \end{split}$$

 $=\frac{0.032+0.128}{0.032+0.128}=0.8$

例題つづき

新たな容疑者としてスナイパーCが浮上してきた。Cの命中率は4割である。A,B,Cの誰が犯人かわからない。最初に命中、そのあと2回外れたデータより、それぞれが犯人である確率を求めよ。

尤度

スナイパーA,B,Cのデータパターン E=(命中、外れ、外れ)が出る確率 P(E|A),P(E|B),P(E|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。

例題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よいだろう?」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。

回答

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

$$P(E|A) = \frac{1}{2}$$
, $P(E|B) = 0$, $P(E|C) = 1$

$$P(A|E) = \frac{P(A)P(E|A)}{P(A)P(E|A) + P(B)P(E|B) + P(C)P(E|C)} = \frac{1}{2}$$

事前分布を変えてみよう

アランのそれぞれの事前確率は

$$P(A) = \frac{3}{5}, P(B) = \frac{1}{5}, P(C) = \frac{1}{5}$$

であった。この時、 $P(A|E)$ を求めよ。

回答

$$P(A) = \frac{3}{5}, P(B) = \frac{1}{5}, P(C) = \frac{1}{5}$$

$$P(E|A) = \frac{1}{2}$$
, $P(E|B) = 0$, $P(E|C) = 1$

$$P(A|E) = \frac{P(A)P(E|A)}{P(A)P(E|A) + P(B)P(E|B) + P(C)P(E|C)}$$
$$= \frac{\frac{3}{5} * \frac{1}{2}}{\frac{3}{5} * \frac{1}{2} + \frac{1}{5} * 0 + \frac{1}{5} * 1} = \frac{3}{5}$$

$$P(C|E) = \frac{2}{5}$$

10. 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すべて。

11. 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 $p(x_1, x_2, \cdot \cdot \cdot, x_m)$ を変数 $x_1, x_2, \cdot \cdot \cdot, x_m$ の同時確率分布(joint probability distribution)と呼ぶ.

12. 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,

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

12. 周辺確率分布

定義7

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(xi)* 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

数(marginal probability density function)と呼ぶ.

13. 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⊕ = {θ₁, θ₂,・・・・, θ_k} と書くとき, 確率分布は以下のような関数で示される.

 $f(x|\mathbf{\Theta})$

すなわち,確率分布ƒ(x|Θ) の形状はパラメータΘ のみによって決定され,パラメータΘ のみが確率分布ƒ(x|Θ) を決定する情報である.

ベイズ統計

- 1. 頻度論の統計学では パラメータは確率変数でない
- 2. ベイズ統計学では パラメータ も確率変数

14. 確率分布とパラメータ 例 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.

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

ここで, θ は, コインの表が出る確率 のパラメータを示す.

15. 尤度原理(フィッシャー)

定義9 (尤度) $X = (X_1, \cdots, X_i, \cdots, X_n)$ 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 $x = (x_1, \cdots, x_n)$ 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 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 θ の尤度は

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

もしくは、

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

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θ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.

最尤推定法

尤度を最大にするパラメータ θ 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 θ を求めることになり、その方法を**最尤推定法** (maxmimum likelihood estimation, **MLE**)と呼ぶ.

最尤推定值

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、

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

ө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.

対数尤度とスコア関数

$$l = \ln L(\theta|x)$$

実際には 対数尤度を最大化する 以下の θ についてlを偏微分したスコア 関数=0となる θ を求める.

$$\frac{\partial}{\partial \theta} l = \frac{\partial}{\partial \theta} \ln L(\theta | x) = \frac{1}{L(\theta | x)} \frac{\partial L(\theta | x)}{\partial \theta}$$

例題4 スコア関数の期待値

$$\mathsf{E}\!\left(\frac{\partial}{\partial\theta}l\right)$$

を求めよ。

例題4 回答

$$\begin{split} & \mathsf{E}\left(\frac{\partial}{\partial \theta} l\right) = \mathsf{E}\left(\frac{1}{L(\theta|x)} \frac{\partial L(\theta|x)}{\partial \theta}\right) \\ & = \int_x \frac{1}{L(\theta|x)} \frac{\partial L(\theta|x)}{\partial \theta} L(\theta|x) \partial x = \frac{\partial}{\partial \theta} \int_x L(\theta|x) \partial x \\ & = \mathsf{E}_x \cdot \int_x L(\theta|x) \partial x = 1 \\ & \mathsf{E}_y \cdot \int_x L(\theta|x) \partial x = 0 \end{split}$$

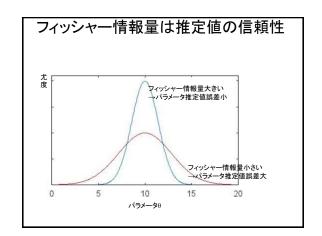
例題5 スコア関数の分散を求めよ

$$\operatorname{Var}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}l\right)$$

例題5 回答

$$\begin{aligned} \operatorname{Var}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}l\right) &= \operatorname{E}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}l - \operatorname{E}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}l\right)\right)^2 = \operatorname{E}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}l - 0\right)^2 \\ &= \operatorname{E}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}l\right)^2 = \operatorname{E}\left(\frac{1}{L(\theta|x)}\frac{\partial L(\theta|x)}{\partial \theta}\right)^2 \end{aligned}$$

これをフィッシャー情報量と呼ぶ.



例題6

例6 (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 θ の最尤推定値を求めよ.

例題6 解答
$$L(\theta|n,x) = \binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x} \propto \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

$$l = x \log \theta + (n-x) \log(1-\theta)$$

$$\frac{\partial l}{\partial \theta} = \frac{x}{\theta} - \frac{n-x}{1-\theta} = \frac{n-x\theta - (n\theta - x\theta)}{\theta(1-\theta)}$$

$$= \frac{x-n\theta}{\theta(1-\theta)}$$

$$\theta \neq 0,1$$

$$\frac{\partial l}{\partial \theta} = 0$$
となるのは $\hat{\theta} = \frac{x}{n}$

例題7(正規分布)

 $f(x_i|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\{-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\}$ について、データ (x_1, \cdots, x_n) を得たときの平均値パラメータ μ 、および分散パラメータ σ^2 の最尤推定値を求めよ。

データ
$$(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$
を得たときの尤度は
$$L = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^n \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$l = n \log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right) - \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}$$

$$\frac{\partial l}{\partial \mu} = 0, \frac{\partial l}{\partial \sigma} = 0$$
のとき、 l は最大となるので
$$\frac{\partial l}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i - \mu}{\sigma^2} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i - n\mu}{\sigma^2} = 0$$

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma} = -\frac{n}{\sigma} + \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^3} = 0$$

$$-n + \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^2} = 0$$

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}{\sigma^2}$$

例題8

母集団の確率分布がポアソン分布

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

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。 λ を最尤推定せよ。

回答
対数尤度は
$$l = log\left[\prod_{i=1}^n e^{-\lambda} \frac{\lambda^{x_i}}{x_i!}\right]$$

$$= log\left[e^{-n\lambda} \frac{\lambda^{\sum_{i=1}^n x_i}}{\prod_{i=1}^n (x_i!)}\right]$$

$$= -n\lambda + (\sum_{i=1}^n x_i) log \lambda - log(\prod_{i=1}^n (x_i!))$$

$$\frac{dl}{d\lambda} = -n + \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{\lambda} = 0$$
より
$$\hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

強一致性

定義11(強一致性)

推定値 $\hat{\theta}$ が真のパラメータ θ *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.

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

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∂は真のパラメータ0*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

θ^* 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

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

このことを, $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta^*) \stackrel{as}{\to} N(0, \sigma^2(\theta^*))$ 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.

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_{i1}, x_{i2}, y_i) (i=1, ...n) データファイル の読み込み パラメータ w_0, w_1, w_2, σ^2 を最尤推定せよ。

尤度は

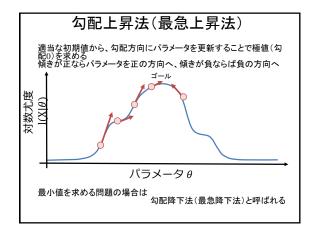
非線形モデルは解析的に解けない

数值計算法

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



勾配上昇法のアルゴリズム

パラメータ θ , 対数尤度関数 $l(X|\theta)$

アルゴリズム

- 1. パラメータの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 η 倍更新 $heta_{n+1}= heta_n+\eta$ $\dfrac{\partial l(X| heta)}{\partial heta}$: orall 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 = ϵ 以下になる)まで2.を反復

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

$$- 階偏微分$$

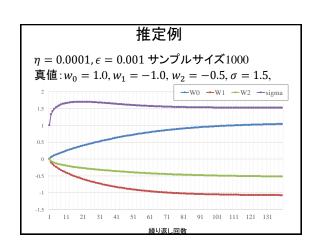
$$l = n \log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right) - \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{2\sigma^2}$$

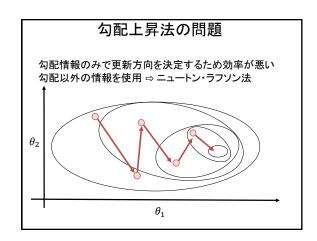
$$\frac{\partial l}{\partial w_0} = \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)}{\sigma^2}$$

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

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

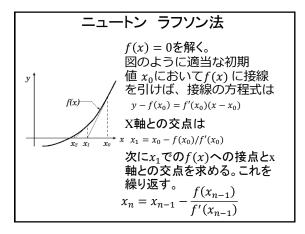
$$\frac{\partial l}{\partial \sigma} = -\frac{n}{\sigma} + \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - w_0 - w_1 x_{i1} - w_2 x_{i2}^2)^2}{\sigma^3}$$





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。 $f(x_n) & \epsilon x_{n-1}$ 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、 $x_n & = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}$

仴

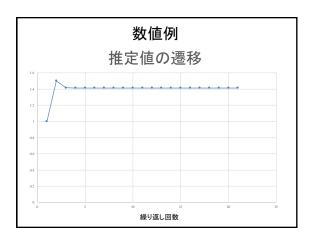
 $f(x) = x^2 - 2 = 0$ を解け(初期値 1.0とする) ニュートンラフソン法を用いて 横軸に繰り返し数、 縦軸にxの推定値を書け.

例
$$f(x) = x^2 - 2 = 0 \quad を解け(初期値 1.0とする)$$

$$f'^{(x)} = 2x$$
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



最尤法でのニュートン・ラフソン法 (θ 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 $heta=\{ heta_1\cdots heta_N\}$ 、対数尤度関数 $l(X|m{ heta})$ とするとき、対数尤度関数の勾配行列 $g(m{ heta})$ と2階微分行列:ヘッセ行列 $H(m{ heta})$ をそれぞれ以下で表す

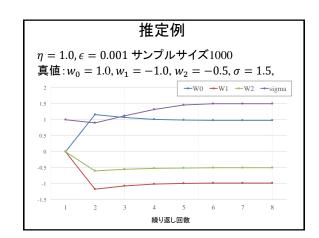
$$g(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial l(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial l(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_n} \end{bmatrix}, \quad H(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial l(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{\theta})^2}{\partial^2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

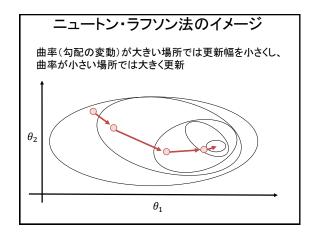
ニュートン・ラフソン法のアルゴリズム

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

アルゴリズム

- 1. 各パラメータ $\{\theta_1 \cdots \theta_N\}$ 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 η 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 = ϵ 以下になる)まで2.を反復





数値計算法の注意点

<u>初期値依存</u>

- 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 η の設定

- 小さすぎるとI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 ε 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: 勾配上昇法とニュートンラフソン法による ロジスティック回帰のパラメータ推定プログラム

 $x_i{\sim}N(0,1^2)$ でデータ数 20,50,100個をそれぞれ発生させる。 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。

$$y_i = \frac{1}{1 + \exp(-ax_i - b)} + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, 0.01)$$

により、データ数 20,50,100個をそれぞれ発生させる。 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 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、勾配上昇法で (a,b)を最尤推定するプログラムをそれぞれ 作成せよ. また、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。

注意事項

- 注**取る 9.9** ・ 提出物: プログラムソースと解析レポート ・提出先: <u>sugahara@ai.lab.uec.ac.jp</u>宛にメールで提出. (件名には学籍番号と氏名を明記
- ・締め切り: 7月12日