KYOTO UNIVERSITY

統計的モデリング基礎⑨
～マルコフモデル～

鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE
AND TECHNOLOGY

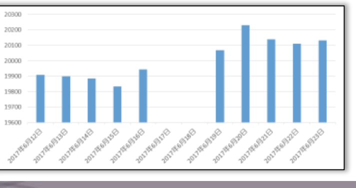
今回の話題：
系列の確率モデル

- マルコフモデル
  - マルコフモデルの最尤推定
  - 平滑化
  - マルコフモデルのMAP推定
- マルコフ決定過程
  - マルコフモデルに沿った期待値
  - 動的計画法による期待報酬和最大化

マルコフモデル

系列データ：互いに独立でないデータ

- これまで扱ってきたデータは主に独立性を仮定
- 系列データ：時間的・論理的な前後関係をもつデータ
  - 長さnの系列：$(x_1, x_2, \dots, x_n), x_i \in \mathcal{X}$　（$|\mathcal{X}| = k$種類）
  - 互いに独立でない
  - 行動系列：✊ ⇒ ✌ ⇒ ✋ ⇒ ✊ ⇒ ✌ ⇒ ✋
  - 自然言語文：「大親友の彼女の連れおいしいパスタ作ったお前」
  - 時系列：株価の系列



系列データの確率モデル：データの尤もらしさや予測・生成に利用できる

- 系列の確率モデルは系列データに確率を与える
  - 確率変数の列$X_1, X_2, \dots, X_n$に対して、その確率

$$\Pr[X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n]$$

- $\Pr[X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n]$がわかると
  - データ$(x_1, x_2, \dots, x_n)$の尤もらしさ（尤もらしくなさ）を評価できる
    - 異常検知
  - 予測：$X_1 = x_1, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}$が与えられたとき、$X_n$を予測

$$\Pr[X_n = x_n \mid X_1 = x_1, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}] = \frac{\Pr[X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n]}{\Pr[X_1 = x_1, \dots, X_{n-1} = x_n - 1]}$$

- $|\mathcal{X}|^n$個の要素に対して確率を直接与えるのは困難

マルコフモデル：シンボル系列の確率モデル

- シンボル集合（たとえば{✊, ✌, ✋}）の系列がどのような順番で出現するかを記述するモデル
- （1次の）マルコフモデルはある位置のシンボルX_tの出現確率がひとつ前の位置のシンボルX_{t-1}にのみ依存するようなモデル
  - 今 ✌ が観測されたときに次はどのシンボルがどのくらい現れやすいか
  - $\Pr(X_t = ✊ \mid X_{t-1} = ✌) = 0.5, \Pr(X_t = ✌ \mid X_{t-1} = ✌) = 0.3, \Pr(X_t = ✋ \mid X_{t-1} = ✌) = 0.2$

ある時刻のシンボルX_t

ひとつ前の時点のシンボルX_{t-1}

	✊	✌	✋
✊	0.3	0.3	0.4
✌	0.5	0.3	0.2
✋	0.1	0.8	0.1

高次のマルコフモデル：
さらに遠い過去まで考慮したモデル

- 次の時刻のシンボルの出現確率が、現在だけでなく、さらに前の時刻に出現したシンボルにも依存するようなモデルを考えることもできる

ある時刻のシンボル

ひとつ前の時刻,
ふたつ前の時刻

	✊	✌	✋
✊,✊	0.3	0.3	0.4
✊,✌	0.5	0.3	0.2
✊,✋	0.1	0.8	0.1
✌,✊	0.2	0.3	0.5
✌,✌	0.4	0.4	0.2
✌,✋	0.1	0.1	0.8
✋,✊	0.8	0.2	0.0
✋,✌	0.6	0.2	0.2
✋,✋	0.4	0.2	0.4

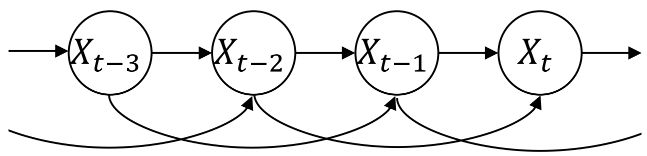
マルコフモデルの一般系：
k次のマルコフモデル

- k次のマルコフモデル：

$$\Pr(X_t = x_t \mid X_{t-1} = x_{t-1}, \dots, X_1 = x_1)$$
$$= \Pr(X_t = x_t \mid X_{t-1} = x_{t-1}, \dots, X_{t-k} = x_{t-k})$$
$$= p(x_t \mid x_{t-1}, \dots, x_{t-k})$$

- 2次のマルコフモデル：

$$\Pr(X_t = x_t \mid X_{t-1} = x_{t-1}, \dots, X_1 = x_1)$$
$$= \Pr(X_t = x_t \mid X_{t-1} = x_{t-1}, X_{t-2} = x_{t-2})$$
$$= p(x_t \mid x_{t-1}, x_{t-2})$$



マルコフモデルによる確率計算:
遷移確率の掛け算

- あるシンボル系列（たとえば ✊⇒ ✊ ⇒ ✋）が出現する確率は、それぞれの遷移確率の積でかける
- $\Pr(x_1 = \text{✊}, x_2 = \text{✊}, x_3 = \text{✋})$
  $= \Pr(x_1 = \text{✊}) \cdot \Pr(x_2 = \text{✊} \mid x_1 = \text{✊}) \cdot \Pr(x_3 = \text{✋} \mid x_2 = \text{✊})$
  $= 0.2 \times 0.3 \times 0.4 = 0.024$
  - $\Pr(x_1 = \text{✊})$は初期確率 （たとえば0.2としたとき）

ある時刻のシンボルX_t

ひとつ前の時点のシンボルX_{t-1}

	✊	✌	✋
✊	0.3	0.3	0.4
✌	0.5	0.3	0.2
✋	0.1	0.8	0.1

マルコフモデルを使った予測①：
次の出現シンボルの予測

- あるシンボル系列を観測したときに、つぎに出てくるシンボルが何かを予測する
  - ✊⇒ ✊ ⇒ ✌を観測したとすると、次は何が来るか？
  - 1次のマルコフモデルなら
    $p(\text{✊} \mid \text{✌}) = 0.5, p(\text{✌} \mid \text{✌}) = 0.3, p(\text{✋} \mid \text{✌}) = 0.2$
    - 最も現れやすいのは✊ （確率50%）
- あるシンボル系列を観測したときに、その出し主が男か女か？
  - ✊⇒ ✊ ⇒ ✌を観測したとすると、この人の性別は？

マルコフモデルを使った予測②:
シンボル列のベイズ判別

- あるシンボル系列を観測したときに、その発生源を判別する
  - ✊⇒ ✊ ⇒ ✌を観測したとすると、この人の性別は？
  - 男性ならば p(✊,✊,✋) = 0.02、女性ならp(✊, ✊, ✋)=0.01 であったとする
  - そもそもの男女比率はp (🚹)=0.4, p (🚺)=0.6
  - p(🚹)× p(✊,✊,✋)とp(🚺)× p(✊, ✊, ✋)の比較、この場合は男性が大

男性のモデル

	✊	✌	✋
✊	0.3	0.3	0.4
✌	0.5	0.3	0.2
✋	0.1	0.8	0.1

女性のモデル

	✊	✌	✋
✊	0.1	0.2	0.7
✌	0.6	0.3	0.1
✋	0.4	0.1	0.5

マルコフモデルの最尤推定:
尤度関数の定義

- 1次のマルコフモデルのもと、データ$(x_1, x_2, \dots, x_n)$の尤度は：

$$p(x_1, x_2, \dots, x_n) = p(x_n \mid x_{n-1}) \cdots p(x_2 \mid x_1) p(x_1) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i \mid x_{i-1})$$

  - $p(x_1) = p(x_1 \mid x_0 = \emptyset)$とする（$\emptyset$は特別なシンボル）
- シンボルa, bが隣り合って出現する回数$n_{\mathrm{a,b}}$を使って書き直すと：

$$p(x_1, x_2, \dots, x_n) = \prod_{\mathrm{a,b} \in \mathcal{X}} (p_{\mathrm{a,b}})^{n_{\mathrm{a,b}}}$$

指示関数
（引数が真のとき1）

  - $\forall \mathrm{a,b} \in \mathcal{X}, p_{\mathrm{a,b}} = p(\mathrm{b} \mid \mathrm{a}), n_{\mathrm{a,b}} = \sum_{i=1}^{n} I(x_{i-1} = \mathrm{a}, x_i = \mathrm{b})$

マルコフモデルの最尤推定: 対数尤度関数

- 対数尤度関数は：

$$L\left(\{p_{a,b}\}_{a,b}\right) = \sum_{a,b\in\mathcal{X}} n_{a,b} \log p_{a,b}$$

- 最尤推定の最適化問題：

$$\{\hat{p}_{a,b}\}_{a,b} = \mathrm{argmax}_{\{p_{a,b}\}_{a,b}} \sum_{a,b\in\mathcal{X}} n_{a,b} \log p_{a,b}$$

$$\mathrm{s.t.}\ \forall a \in \mathcal{X}, \sum_{b\in\mathcal{X}} p_{a,b} = 1, p_{a,b} \geq 0$$

  - 制約は$p_{a,b}$が確率であるためのもの

マルコフモデルの最尤推定: 出現回数を集計して割り算するだけ

- これは各$a \in \mathcal{X}$毎に別々の最適化問題を解けばよい：

$$\{\hat{p}_{a,b}\}_{b} = \mathrm{argmax}_{\{p_{a,b}\}_{b}} \sum_{b\in\mathcal{X}} n_{a,b} \log p_{a,b}$$

$$\mathrm{s.t.} \sum_{b\in\mathcal{X}} p_{a,b} = 1, p_{a,b} \geq 0$$

- 離散分布（サイコロ）の最尤推定と同じ：

$$\hat{p}_{a,b} = \frac{n_{a,b}}{\sum_{b\in\mathcal{X}} n_{a,b}}$$

マルコフモデルの最尤推定の例:
出現回数を集計して割り算するだけ

- ２つのシンボルが連続して出現した回数を数える

$n_{a,b}$	✊	✌	✋
✊	3	3	4
✌	1	6	4
✋	2	0	2
∅	3	4	5

- 出現回数の割合で推定：
  - $p_{✋,b}$の場合：

	✊	✌	✋
✋	2	0	2

    - $p_{✋,✊} = \frac{2}{2+2} = \frac{1}{2}$

データ数が少ない場合：
平滑化によって補う

- $p_{✋,✊}$の最尤推定値は$\hat{p}_{✋,✊} = \frac{1}{2}$

	✊	✌	✋
✋	2	0	2

  - たまたま出なかっただけかも？（たった4回の観測）
  - 予測時に✋のあとに✌が出る確率は常に0になってしまう
- 平滑化：観測数を底上げして確率が0になるのを避ける
  - 加算平滑化：$\hat{p}_{a,b} = \frac{n_{a,b}+\alpha}{\sum_{b\in\mathcal{X}}(n_{a,b}+\alpha)}$ （$\alpha = 1$：ラプラス平滑化）
  - 線形補間：異なる次数のマルコフモデルを混合する
    - 0次と1次の混合：$\hat{p}_{a,b} = \lambda\frac{n_{a,b}}{\sum_{b\in\mathcal{X}} n_{a,b}} + (1-\lambda)\frac{n_b}{\sum_{b\in\mathcal{X}} n_b}$

      bの出現数
  - 正則化・ベイズ推定の枠組みで解釈できる

ベイズ的統計モデリングの考え方：最尤推定の尤度の代わりに事後分布を考える

REVIEW

- ベイズ的なモデリングの考え方では、事後分布を考える：

$$P(\text{パラメータ} \mid \text{データ}) = P(\{p_{a,b}\}_{a,b} \mid x_1, x_2, \dots, x_n)$$

  - 事後分布ではパラメータを確率変数と考える
- 事後分布：

$$P(\text{パラメータ} \mid \text{データ}) \overset{\text{ベイズの定理}}{\propto} P(\text{データ} \mid \text{パラメータ})P(\text{パラメータ})$$

- 対数事後分布：

$$\log P(\text{パラメータ} \mid \text{データ}) = \underbrace{\log P(\text{データ} \mid \text{パラメータ})}_{\text{尤度}} + \underbrace{\log P(\text{パラメータ})}_{\text{事前分布}} + \text{const.}$$

事後確率最大化（MAP）推定：事後確率を最大化するパラメータを採用

REVIEW

- 事後確率最大化（Maximum a posteriori; MAP）推定
- 事後確率を最大化するパラメータを採用する：

$$\log P(\text{パラメータ} \mid \text{データ}) = \log P(\text{データ} \mid \text{パラメータ}) + \log P(\text{パラメータ}) + \text{const.}$$

- 事前分布$P(\text{パラメータ})$を与える必要がある
  - 線形回帰モデルの場合、正規分布やラプラス分布を事前分布として用いた

離散分布の事前分布：ディリクレ分布

- 1次のマルコフモデルは離散分布$\{p_{a,b}\}_{b\in\mathcal{X}}$として考えることができる
- （表記上の）簡単のため$p_1, p_2, \dots, p_k$（$k = |\mathcal{X}|$）のMAP推定を考える
- 事前分布$P(p_1, p_2, \dots, p_k)$は離散分布上の確率分布である必要がある
- ディリクレ分布：$P(p_1, p_2, \dots, p_k) = \frac{\Gamma(\alpha_1+\cdots+\alpha_k)}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_k)} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{\alpha_j - 1}$　ガンマ関数
  - $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_k), p_j \geq 0, \sum_{j=1}^{k} p_j = 1$ を生成する確率モデル
  - $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_k) \geq 0$は（ハイパー）パラメータ

マルコフモデルのMAP推定：ディリクレ事前分布は加算平滑化を導く

- 対数尤度：$\sum_{j=1}^{k} n_j \log p_j$（$n_j$：各シンボルの観測数）
- 対数事後分布：

$$\sum_{j=1}^{k} n_j \log p_j + \log \frac{\Gamma(\alpha_1+\cdots+\alpha_k)}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_k)} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{\alpha_j - 1} + \text{const.}$$

$$= \sum_{j=1}^{k} (n_j + \alpha_j - 1) \log p_j + \underbrace{\log \frac{\Gamma(\alpha_1+\cdots+\alpha_k)}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_k)}}_{\text{ハイパーパラメータの項}= \text{const.}} + \text{const.}$$

シンボル観測数n_jを$\alpha_j - 1$だけ嵩上げ

- MAP推定 ≈ 加算平滑化

マルコフ決定過程

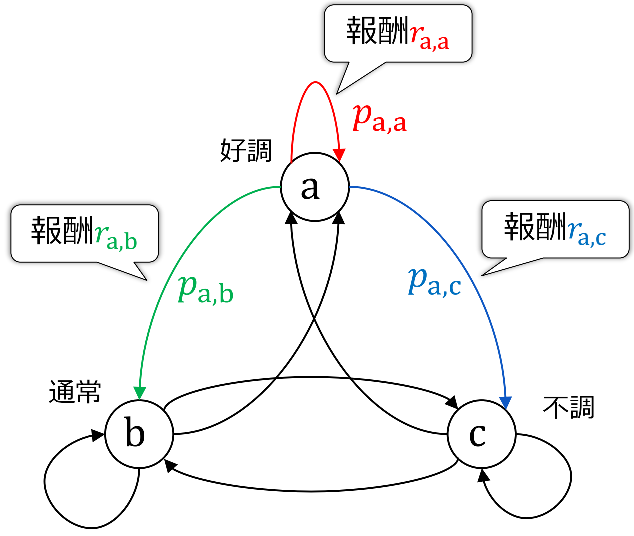
マルコフモデルに沿った期待値：状態遷移に報酬が伴うような例

- 状態集合$\mathcal{X}$：k個の状態をもつとする（会社の経営状況など）
- マルコフモデルに従った状態遷移：
  - 時点$t = 1$において、$p_{\emptyset,s_1}$, $s_1 \in \mathcal{X}$ に従って初期状態s_1が決まる
  - 各時点$t = 2,3,\ldots,n$でp_{s_{t-1},s_t}に従ってs_{t-1}からs_tへ状態遷移する
- 遷移に伴う報酬：s_{t-1}からs_tへの遷移に伴い報酬r_{s_{t-1},s_t}を受ける
- 時刻nにおける累積報酬の期待値

$$e_0(\emptyset) \equiv \sum_{s_1,s_2,\ldots,s_n} \underbrace{\left(\sum_{t=1}^{n} r_{s_{t-1},s_t}\right)}_{\text{遷移に伴う報酬和}} \underbrace{\prod_{t=1}^{n} p_{s_{t-1},s_t}}_{\text{遷移確率の積}}$$

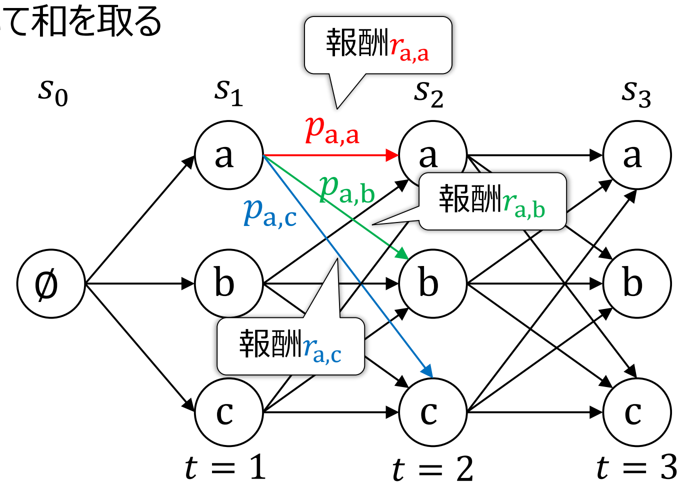
報酬をともなうマルコフモデルの例：状態遷移に報酬を伴う

- 会社の経営状況：
  - 期毎に変化
    - 好調（a）
    - 通常（b）
    - 不調（c）
  - 変化に収益を伴う



マルコフモデルに沿った期待値の計算：動的計画法で計算

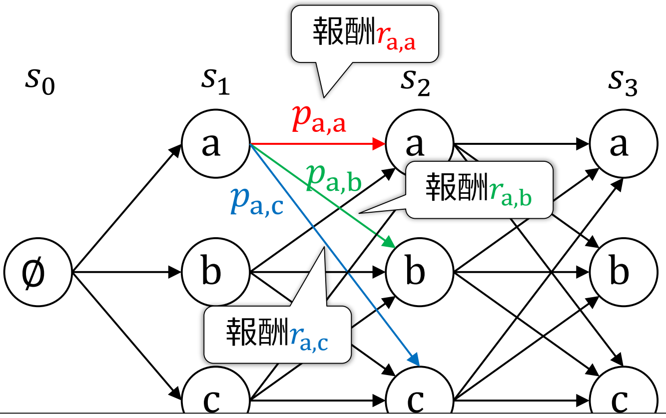
- 各経路の報酬和を経路の確率で重みづけたものを、全ての経路について和を取る



経営状況の例：
- 好調（a）
- 通常（b）
- 不調（c）

マルコフモデルに沿った期待値の計算：動的計画法で計算

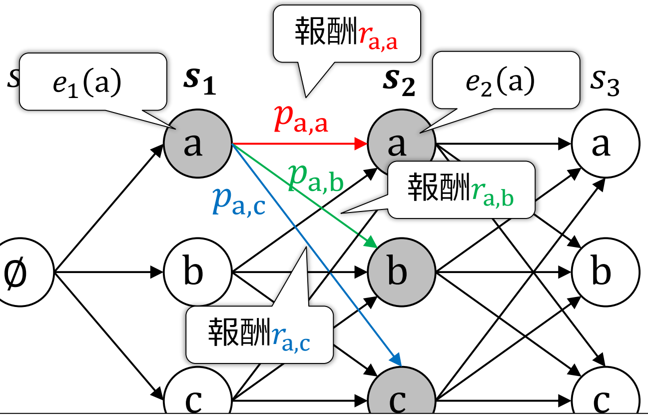
- 再帰式を利用して動的計画法で計算（$t=n$から0の向きに）



$$e_t(s_t)=\sum_{s_{t+1}} p_{s_t,s_{t+1}}\left(r_{s_t,s_{t+1}}+e_{t+1}(s_{t+1})\right)$$

マルコフモデルに沿った期待値の計算：動的計画法で計算

- $e_1(\mathrm{a})$は$e_2(\mathrm{a}), e_2(\mathrm{b}), e_2(\mathrm{c})$から計算できる



$$e_1(\mathrm{a})=\sum_{s_2\in\{\mathrm{a,b,c}\}} p_{\mathrm{a},s_2}\left(r_{\mathrm{a},s_2}+e_2(s_2)\right)$$

マルコフ決定過程：遷移確率と報酬が決定（行動）に依存する

- 各時点tで決定$c_t \in \mathcal{C}$を選択する
- 遷移確率と報酬が決定に依存：
  - 状態遷移：各時点tで$p_{s_{t-1},s_t}(c_t)$に従ってs_{t-1}からs_tへ遷移する
  - 報酬：s_{t-1}からs_tへの遷移に伴い報酬$r_{s_{t-1},s_t}(c_t)$を受ける
- 時刻nにおける累積報酬の期待値

$$e_0(\emptyset) \equiv \sum_{s_1,s_2,\ldots,s_n} \underbrace{\left(\sum_{t=1}^{n} r_{s_{t-1},s_t}(c_t)\right)}_{\text{遷移に伴う報酬和}} \underbrace{\prod_{t=1}^{n} p_{s_{t-1},s_t(c_t)}}_{\text{遷移確率の積}}$$

マルコフ決定過程における有限期間報酬和最大化：動的計画法によって最適な決定系列が求まる

- 累積報酬の期待値を最大化する$c_1, c_2, \ldots, c_n$を求める

$$\mathrm{argmax}_{c_1,c_2,\ldots,c_n} \sum_{s_1,s_2,\ldots,s_n} \left(\sum_{t=1}^{n} r_{s_{t-1},s_t}(c_t)\right) \prod_{t=1}^{n} p_{s_{t-1},s_t(c_t)}$$

- 動的計画法：

$$e_t^*(s_t) = \max_{c_{t+1}} \sum_{s_{t+1}} p_{s_t,s_{t+1}}(c_{t+1}) \left(r_{s_t,s_{t+1}}(c_{t+1}) + e_{t+1}(s_{t+1})\right)$$

- なお、無限期間の場合：
  - 報酬和が発散しないように将来の報酬を割り引く
  - 同様の再帰式が成り立つが、解法はやや複雑