KYOTO UNIVERSITY

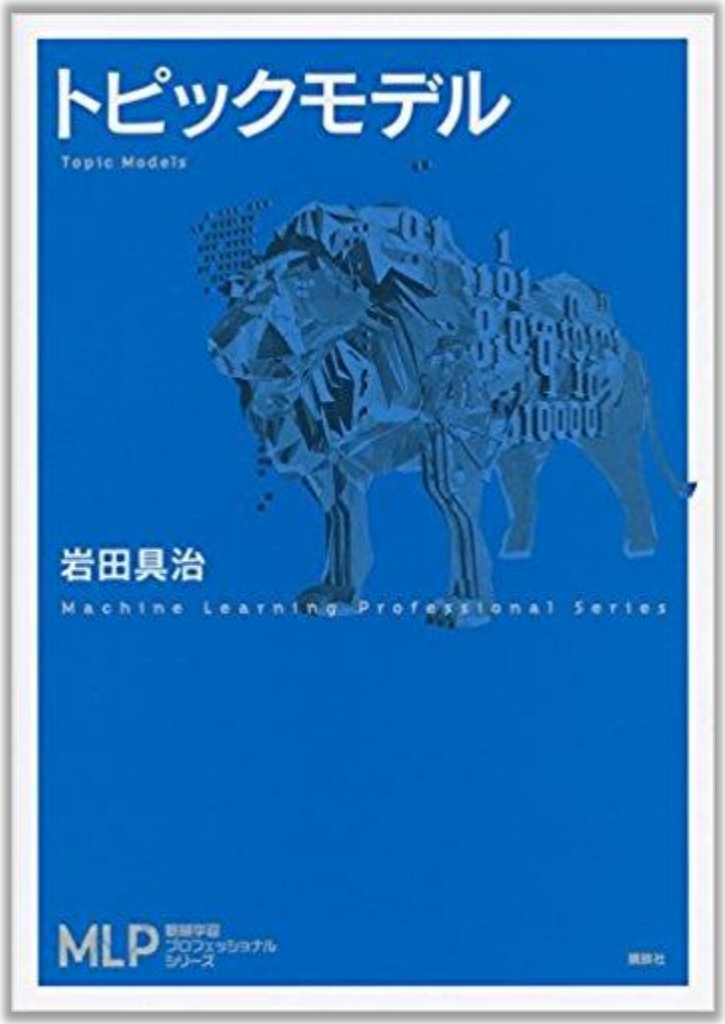
統計的モデリング基礎⑩
～ベイズモデリング～

鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE AND TECHNOLOGY

目次：
ベイズモデリング

- ベイズ統計の基礎
  - ベイズの公式、事前分布、事後分布
  - 事後分布による意思決定
  - ナイーブベイズ予測
- ベイズモデリング
  - 離散分布のベイズ推定
  - 階層ベイズモデリング
  - 経験ベイズ法



ベイズ統計：
ベイズの公式によって事前知識と証拠を組み合わせて推論

- 事前知識と観測された証拠から確率を更新する
  - 事前知識：事前分布によって表される、自分が予めもっている、ある事象がどの程度起こりそうかという信念
- 新たな証拠が得られたとき、信念の更新はベイズの公式に基づいて行われる

ベイズ統計で中心的役割を果たすベイズの公式：条件付確率の条件部と帰結部を入れ替える

- 条件付確率$P(\text{rain} \mid \text{cat})$：猫が顔を洗うのを目撃したときに、次の日に雨が降る確率
  - $P(\text{rain} \mid \text{cat}) = \dfrac{P(\text{rain}, \text{cat})}{P(\text{cat})}$
- ベイズの公式：条件付確率の条件部分と帰結部分を入れ替える公式

雨の日の前日に猫が顔を洗っている確率

猫がどうとか関係なく、そもそも雨が降る確率（事前分布）

$$P(\text{rain} \mid \text{cat}) = \frac{P(\text{cat} \mid \text{rain})P(\text{rain})}{P(\text{cat})}$$

雨がどうとか関係なく、そもそも猫が顔を洗う確率

例：
ベイズの公式に基づく事後確率計算

- 事前確率：これまでの経験から雨が降る確率は20%
- 雨がふる日の前日に猫が顔を洗っている確率は80%
- $P(\text{rain} \mid \text{cat}) = \frac{P(\text{cat}|\text{rain})P(\text{rain})}{P(\text{cat})} = \frac{0.8 \times 0.2}{P(\text{cat})} = \frac{0.16}{P(\text{cat})}$ がわかる
- 一方、これまでの経験から雨が降らない確率は80%であることと、雨が降らない日の前日に猫が顔を洗っている確率は50%とする
- $P(\neg\text{rain} \mid \text{cat}) = \frac{P(\text{cat}|\neg\text{rain})P(\neg\text{rain})}{P(\text{cat})} = \frac{0.5 \times 0.8}{P(\text{cat})} = \frac{0.40}{P(\text{cat})}$
- 両者より $P(\text{rain} \mid \text{cat}) = \frac{0.16}{0.16+0.40} = 0.29$ （29%）となる

9ポイント増えたよ！

ベイズ決定：
事後分布をもちいた意思決定

- 予測×効用（結果のうれしさ度合い）によって意思決定

	効用	ビールの仕入れ量	
		多め	少な目
実際の天候	☀晴れ	+50	0
	☂雨	-100	-10

- 猫が顔を洗った場合の期待効用 U

0.29

  - $U(\text{多めに仕入れ}) = -100 \times P(\text{rain} \mid \text{cat}) + 50 \times P(\neg\text{rain} \mid \text{cat}) = -100 \times 0.29 + 50 \times 0.71 = 6.5$
  - $U(\text{少な目に仕入れ}) = -10 \times P(\text{rain} \mid \text{cat}) + 0 \times P(\neg\text{rain} \mid \text{cat}) = -10 \times 0.29 + 0 \times 0.71 = -2.9$
  - 多めに仕入れたほうが期待効用が高い

ナイーブベイズ予測：テキスト分類の初等的手法

- ある文書が特定のカテゴリに属する確率
  - Webページをみて、そのトピックが経済なのか、スポーツなのか、政治なのか、芸能なのか、…を判別する
  - つまり、事後確率$P(\text{topic} \mid \text{text})$を知りたい
- ベイズの公式により、事後確率は：

$$P(\text{topic} \mid \text{text}) = \frac{P(\text{text} \mid \text{topic})P(\text{topic})}{P(\text{text})}$$

  - $P(\text{topic})$：そのトピックが観測される確率
  - $P(\text{text} \mid \text{topic})$：あるトピックが決まった時に、そのWebページのテキストがつくられる確率

ナイーブベイズ予測：予測にはテキストの生成確率の計算が必要

- テキストが与えられたときのトピックの事後確率は：

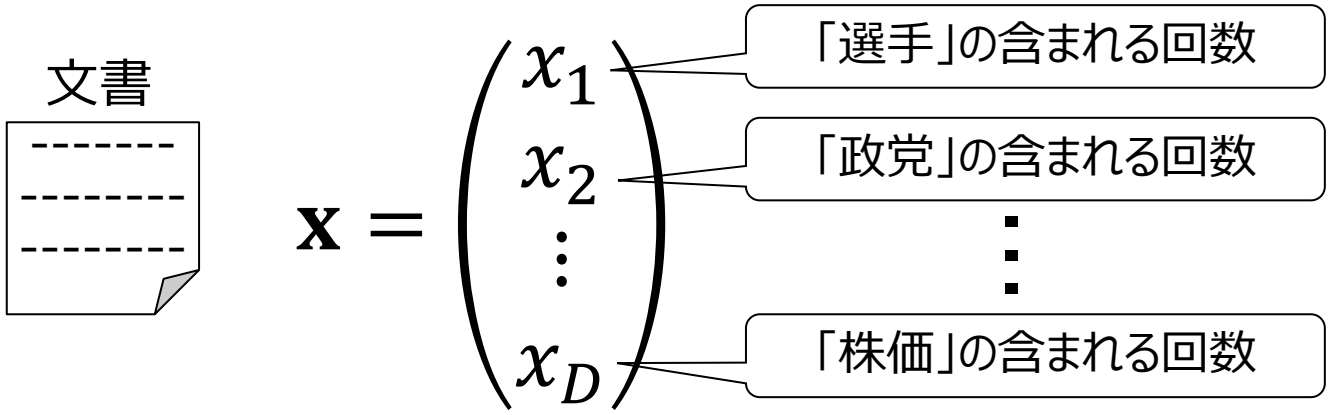
$$P(\text{topic} \mid \text{text}) = \frac{P(\text{text} \mid \text{topic})P(\text{topic})}{\sum_{\text{topic}'} P(\text{text} \mid \text{topic}')P(\text{topic}')}$$

分母= $P(\text{text})$

- $P(\text{topic}) = \dfrac{\text{そのトピックの文書数}}{\text{全文書数}}$ で計算できる（最尤推定）
- 一方、$P(\text{text} \mid \text{topic})$ をどのように考えるかは自明ではない
  - トピックが決まった時の文書生成モデルが必要
  - 例えば、マルコフモデル？隠れマルコフ？RNN？
  - もうちょっと簡単な場合を考えてみる…

テキストの発生確率モデル：単語袋(bag-of-words)モデル

- 文書 $\mathbf{x}$ を、出現する単語によって表現



bag-of-words 表現

- 単純化のための仮定：各単語の発生は独立とする

$$P(\text{text} \mid \text{topic}) = P(w_1 \mid \text{topic})^{n_1} P(w_2 \mid \text{topic})^{n_2} \cdots P(w_D \mid \text{topic})^{n_D}$$

辞書に含まれるある単語

ナイーブベイズ予測：単語袋モデルに基づくテキストの発生確率の計算

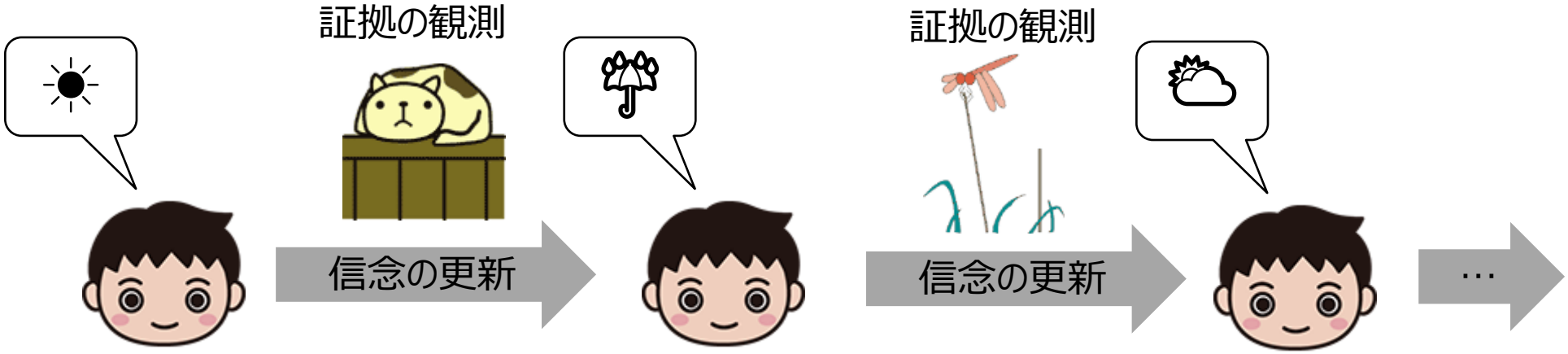
- 計算したいのは $P(\text{topic} \mid \text{text}) \propto P(\text{text} \mid \text{topic})P(\text{topic})$
- $P(\text{topic}) = \dfrac{\text{そのトピックの文書数}}{\text{全文書数}}$ で推定できる（最尤推定）
- $P(\text{text} \mid \text{topic}) = P(w_1 \mid \text{topic})^{n_1} P(w_2 \mid \text{topic})^{n_2} \cdots P(w_D \mid \text{topic})^{n_D}$
  - $P(w_1 \mid \text{topic}) = \dfrac{\text{そのトピックの文書中で}w_1\text{が現れた回数}}{\text{そのトピックの文書中の総単語出現数}}$ と推定（最尤推定）
- すべてのtopicについてを計算し正規化する

信念の逐次更新：
証拠が得られるごとに信念が更新される

- ベイズの定理は証拠をもとに信念を更新する
- 証拠が新しく得られるたびに信念が更新される：

$$P(\text{rain}) \rightarrow P(\text{rain} \mid \text{cat}) \rightarrow P(\text{rain} \mid \text{cat}, \text{dragonfly}) \rightarrow \cdots$$

  - 証拠間が条件付き独立であるなら証拠の観測順序は関係ない
  - 他の例：テキスト分類で、一単語観測されるごとに予測を更新



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

- ベイズ統計では事後分布$P(\text{パラメータ} \mid \text{データ})$を考える
  - 事後分布ではパラメータを確率変数と考える
- 事後分布：

$$P(\text{パラメータ} \mid \text{データ}) = \frac{P(\text{データ} \mid \text{パラメータ})P(\text{パラメータ})}{P(\text{データ})}$$

ベイズの定理

- 対数事後分布：

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

離散分布のベイズ推定：ディリクレ分布を事前分布とする

- 離散分布 $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_k), \sum_{i=1}^{k} p_i = 1, p_i \geq 0$ を考える
- データ：$\mathbf{n} = (n_1, n_2, \ldots, n_k)$
  - n_j：各シンボル$j \in \{1,2, \ldots, k\}$の観測数
- パラメータの事後分布 $P(\mathbf{p} \mid \mathbf{n}) = \frac{P(\mathbf{n}|\mathbf{p})P(\mathbf{p})}{P(\mathbf{n})} = \frac{P(\mathbf{n}|\mathbf{p})P(\mathbf{p})}{\int_{\mathbf{p}} P(\mathbf{n}|\mathbf{p})P(\mathbf{p})\mathrm{d}\mathbf{p}}$
- 事前分布$P(\mathbf{p})$はディリクレ分布とする
  - ディリクレ分布は離散分布の共役事前分布
  - 共役事前分布：事後分布と事前分布の形が同じになるような事前分布

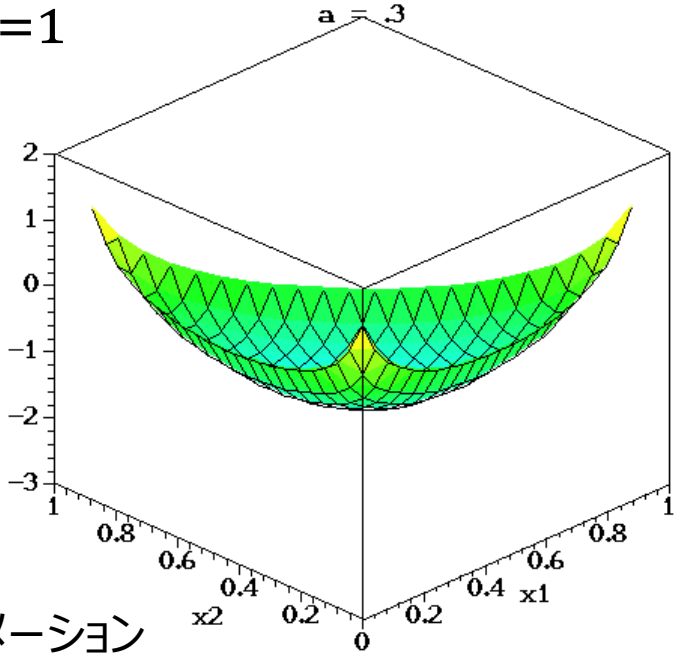
ディリクレ分布：離散分布の（共役）事前分布

- ディリクレ分布：離散分布$\mathbf{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_k), p_j \geq 0, \sum_{j=1}^{k} p_j = 1$を生成する確率モデル

ガンマ関数

$$P(p_1, p_2, \ldots, p_k) = \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_k\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(\alpha_j)} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{\alpha_j - 1}$$

  - $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_k) \geq 0$は（超）パラメータ
  - $\int_{\mathbf{p}} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{\alpha_j - 1} \, \mathrm{d}\mathbf{p} = \frac{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(\alpha_j)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_k\right)}$



$0.3 \leq \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 \leq 2.0$のアニメーション

https://en.wikipedia.org/wiki/Dirichlet_distribution#/media/File:LogDirichletDensity-alpha_0.3_to_alpha_2.0.gif

事後分布の計算：
事前分布と事後分布がともにディリクレ分布になる

- 事後分布：$P(\mathbf{p} \mid \mathbf{n}) = \dfrac{P(\mathbf{n}|\mathbf{p})P(\mathbf{p})}{P(\mathbf{n})} = \dfrac{P(\mathbf{n}|\mathbf{p})P(\mathbf{p})}{\int_{\mathbf{p}} P(\mathbf{n}|\mathbf{p})P(\mathbf{p})\mathrm{d}\mathbf{p}}$

- $P(\mathbf{n} \mid \mathbf{p})P(\mathbf{p}) = \prod_{j=1}^{k}(p_j)^{n_j} \dfrac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k}\alpha_k\right)}{\prod_{j=1}^{k}\Gamma(\alpha_j)} \prod_{j=1}^{k}(p_j)^{\alpha_j - 1}$

事前分布がディリクレ分布

- 以上を用いて $P(\mathbf{p} \mid \mathbf{n}) = \dfrac{\prod_{j=1}^{k}(p_j)^{n_j+\alpha_j-1}}{\int_{\mathbf{p}} \prod_{j=1}^{k}(p_j)^{n_j+\alpha_j-1}\mathrm{d}\mathbf{p}}$

$$= \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j\right)}{\prod_{j=1}^{k}\Gamma(n_j + \alpha_j)} \prod_{j=1}^{k}(p_j)^{n_j+\alpha_j-1}$$

事後分布もディリクレ分布

ベイズ予測分布：推定のばらつきを考慮した予測

- MAP推定では事後分布が最大となるパラメータを**点**推定する

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathrm{argmax}_{\mathbf{p}} P(\mathbf{p} \mid \mathbf{n})$$

  - 得られたパラメータを次のシンボルxの予測に用いる

$$P(x \mid \hat{\mathbf{p}}) = \hat{p}_x, x \in \{1,2,\ldots,k\}$$

- ベイズ予測では「事後分布そのもの」を用いて予測する

$$P(x \mid \mathbf{n}) = \int_{\mathbf{p}} P(x \mid \mathbf{p}) P(\mathbf{p} \mid \mathbf{n}) \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$

  - あらゆるパラメータのモデルの予測を事後確率で重みづけて予測

- パラメータを点推定するのでなく**事後分布ごっそり**使う

離散分布のベイズ予測分布：MAP推定同様に加算平滑化が導かれる

$$\int_{\mathbf{p}} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{\alpha_j - 1} \, \mathrm{d}\mathbf{p} = \frac{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(\alpha_j)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_k\right)}$$

$$P(x \mid \mathbf{n}) = \int_{\mathbf{p}} P(x \mid \mathbf{p}) P(\mathbf{p} \mid \mathbf{n}) \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$

$$= \int_{\mathbf{p}} p_x \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(n_j + \alpha_j)} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{n_j + \alpha_j - 1} \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$

$$= \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(n_j + \alpha_j)} \int_{\mathbf{p}} (p_x)^{n_x + 1 + \alpha_x - 1} \prod_{j \neq x} (p_j)^{n_j + \alpha_j - 1} \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$

$$= \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(n_j + \alpha_j)} \frac{\Gamma(n_x + 1 + \alpha_x) \prod_{j \neq x} \Gamma(n_j + \alpha_j)}{\Gamma\left(1 + \sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j\right)}$$

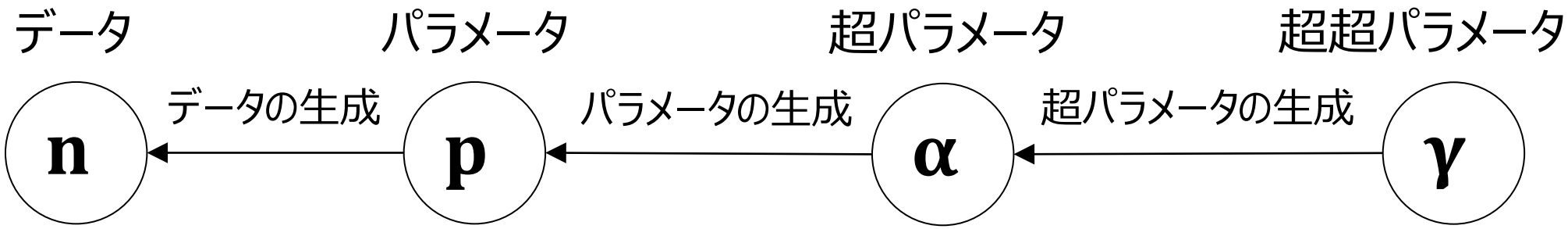
$$= \frac{n_x + \alpha_x}{\sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j}$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$$

階層ベイズモデル：
事前分布の事前分布（の事前分布の・・・）を考える

- 事前分布$P(\mathbf{p} \mid \boldsymbol{\alpha})$も（超）パラメータ$\boldsymbol{\alpha}$をもつ
  → どのように決めたらよいか
- 超パラメータの事前分布$P(\boldsymbol{\alpha})$を考える
  - あるいは、データにあわせてチューニングする（後述）
- 事前分布のパラメータもまた事前分布をもつとするとモデルが階層化される

この辺になるとなんかもうどうでもよくなってくる



経験ベイズ推定：
周辺尤度の最大化による超パラメータの推定

- 超パラメータを推定したい
- 周辺尤度：$P(\mathbf{n} \mid \boldsymbol{\alpha}) = \int_{\mathbf{p}} P(\mathbf{n} \mid \mathbf{p}) P(\mathbf{p} \mid \boldsymbol{\alpha}) \, \mathrm{d}\mathbf{p}$ を考える
  - パラメータ$\mathbf{p}$が積分消去（周辺化）されていることに注意
- 経験ベイズ法：
  周辺尤度を最大化する超パラメータ$\boldsymbol{\alpha}$を推定値とする

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \mathrm{argmax}_{\boldsymbol{\alpha}} P(\mathbf{n} \mid \boldsymbol{\alpha})$$

- MAP推定では超パラメータは推定できないことに注意する

離散分布の経験ベイズ推定：対数周辺尤度を勾配法によって最大化する

- 周辺尤度：$P(\mathbf{n} \mid \boldsymbol{\alpha}) = \int_{\mathbf{p}} P(\mathbf{n} \mid \mathbf{p}) P(\mathbf{p} \mid \boldsymbol{\alpha}) \, \mathrm{d}\mathbf{p}$
- 離散分布の周辺尤度（数値的に最大化する）：

$$P(\mathbf{n} \mid \boldsymbol{\alpha}) = \int_{\mathbf{p}} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{n_j} \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_k\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(\alpha_j)} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{\alpha_j - 1} \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$

$$= \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_k\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(\alpha_j)} \int_{\mathbf{p}} \prod_{j=1}^{k} (p_j)^{n_j + \alpha_j - 1} \, \mathrm{d}\mathbf{p} = \frac{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_k\right)}{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(\alpha_j)} \frac{\prod_{j=1}^{k} \Gamma(n_j + \alpha_j)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^{k} n_j + \alpha_j\right)}$$

- 勾配法による$\boldsymbol{\alpha}$の最適化：

$$\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{NEW}} = \boldsymbol{\alpha} + \eta \nabla_{\boldsymbol{\alpha}} \log P(\mathbf{n} \mid \boldsymbol{\alpha})$$

  - ディガンマ関数（対数ガンマ関数の微分）が必要でやや面倒

まとめ：
ベイズモデリング

- ベイズ統計の基礎
  - ベイズ統計ではパラメータの事後分布を考える
    - ベイズの公式、事前分布、事後分布
  - 事後分布による意思決定：証拠（データ）をもとに信念を更新
    - ナイーブベイズ予測
- ベイズモデリング
  - ディリクレ分布を共役事前分布とした離散分布のベイズ推定
  - 階層ベイズモデリングによるモデルの抽象化
  - 経験ベイズ法による超パラメータの推定