4.5 ベイズロジスティック回帰

cf. 4.3.2 ロジスティック回帰

$$p(C_1|\phi) = \sigma(w^T\phi)$$

4.5.1 Laplace近似

目的

事後分布をGauss分布で表す

→ 事前分布はGauss分布が自然

モデルパラメータ

ハイパーパラメータ

$$p(w) = \mathcal{N}(w|m_0, S_0) \quad (4.140)$$

このとき、事後確率 $p(w|t)$ は…

$$p(w|t) \propto p(w)p(t|w) \quad (4.141)$$

$t = \begin{pmatrix} t_1 \\ \vdots \\ t_N \end{pmatrix}$：目標変数

↓ 対数

$$\log p(w|t) = \underbrace{\log p(w)}_{(4.140)} + \underbrace{\log p(t|w)}_{(4.89)} + \text{Const}$$

正確には規格化因子

~~$\sum p(t)$~~

~~$\int dw$~~

$\sum_j p(w_j)p(t|w_j)$

$$\cdot \log p(w) \overset{(4.140)}{=} \log \mathcal{N}(w|m_0, S_0)$$

$$= -\frac{1}{2}(w-m_0)^T S_0^{-1}(w-m_0) + \text{Const}$$

$\text{Const} = \log\left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{M}{2}}}\frac{1}{\sqrt{|S_0|}}\right)$

$$\cdot \log p(t|w) \overset{(4.90)}{=} -E(w)$$ ロジスティック回帰における尤度関数

$$\overset{(4.89)}{=} \log\left(\prod_{n=1}^{N} y_n^{t_n}(1-y_n)^{1-t_n}\right)$$

$$= \sum_{n=1}^{N}\left(t_n \log y_n + (1-t_n)\log(1-y_n)\right)$$

$y_n = \sigma(w^T\phi_n)$

$\phi_n = \phi(x_n)$

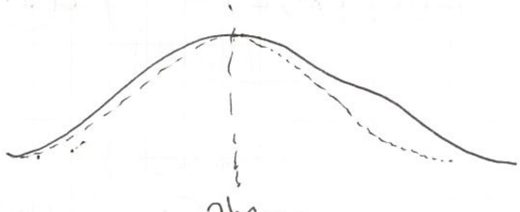
つまり

$$\log p(w|t) = -\frac{1}{2}(w-m_0)^T S_0^{-1}(w-m_0) + \sum_{n=1}^{N}\left(t_n \log y_n + (1-t_n)\log(1-y_n)\right) + \text{Const.} \quad (4.142)$$

事後分布 $p(w|t)$ をGauss分布で近似する

⟺ $p(w|t)$ のモード w_{MAP} (or MAP解 ~~事後確率~~ 最大) を求める. (Laplace近似)

→ $p(w|t)$ が $w = w_{MAP}$ でMax.



w_{MAP}

~~$w = w_{MAP}$ で~~

$$\nabla \log p(w|t)\Big|_{w=w_{MAP}} = 0$$

$$\nabla\nabla \log(w|t)\Big|_{w=w_{MAP}} < 0$$ となる w が MAP解

w_{MAP} が求まった.

① 共分散行列

たぶん (4.132) から

~~$\nabla\nabla \log p(w|t) = -S$~~

$$S_N^{-1} \overset{?}{=} -\nabla\nabla \log p(w|t)\Big|_{w=w_{MAP}}$$

$$= \underbrace{-\nabla\nabla \log \mathcal{N}(w_{MAP}|m_0, S_0)\Big|_{w=w_{MAP}}}_{(4.140)} + \underbrace{\nabla\nabla E(w)}_{(4.90)}$$

$$= S_0^{-1} + \underbrace{\sum_{n=1}^{N} y_n(1-y_n)\phi_n\phi_n^T}_{(4.97)} \quad (4.143)$$

○ 事後分布のGauss分布による近似

$$q(w) = \mathcal{N}(w | w_{MAP}, S_N) \quad (4.144)$$

4.5.2 予測分布

やること ~~特徴~~

$\boxed{\text{特徴ベクトル } \phi(x) \text{ が与えられたとき 予測分布 } p(C_1|\phi, t) \text{ を求める}}$

○予測分布

変数を1つ消す(周辺化)

or 加法定理 ex.(1.68)

$$p(C_1|\phi, t) \underset{(\text{周辺化})}{=} \int d\boldsymbol{w}\, \underbrace{p(C_1|\phi, \boldsymbol{w})}_{(4.87)}\, \underbrace{p(\boldsymbol{w}|t)}_{(4.144)}$$

$$\overset{(\text{Gaussian近似})}{\simeq} \int d\boldsymbol{w}\, \sigma(\boldsymbol{w}^T\phi)\, q(\boldsymbol{w}) \qquad (4.145)$$

σに注目.

デルタ関数による積分表示

$$\sigma(\boldsymbol{w}^T\phi) = \int da\, \delta(a - \boldsymbol{w}^T\phi)\, \sigma(a) \qquad (4.146)$$

↓ (4.145)右辺

$$\int d\boldsymbol{w}\, \sigma(\boldsymbol{w}^T\phi)\, q(\boldsymbol{w})$$

$$= \int d\boldsymbol{w} \int da\, \delta(a - \boldsymbol{w}^T\phi)\, \sigma(a)\, q(\boldsymbol{w})$$

積分の交換

$$= \int da\, \sigma(a) \underbrace{\int d\boldsymbol{w}\, \delta(a - \boldsymbol{w}^T\phi)\, q(\boldsymbol{w})}_{= p(a)\ (4.148)}$$

$$= \int da\, \sigma(a)\, p(a) \qquad (4.147)$$

2.3.2

$q(w)$ が Gaussian $\Longrightarrow$ 周辺分布は Gaussian

・周辺分布の平均

$p(a) = \mathcal{N}(a|\mu_a, \sigma_a^2)$

とかける.

$$\mu_a = \mathbb{E}[a]$$
$$\overset{?}{=} \int da\, p(a)\, a$$
$$= \int da \int dw\, \delta(a - w^T\phi) q(w)\, a$$
$$= \int dw\, q(w) \int da\, \delta(a - w^T\phi)\, a$$
$$= \int dw\, q(w)\, w^T\phi \qquad q(w) = \mathcal{N}(w|w_{MAP}, S_N) \quad (4.144)$$
$$= w^T_{MAP}\phi \qquad (4.149)$$

・周辺分布の共分散

$$\sigma_a^2 = \mathrm{var}[a]$$
$$= \int da\, p(a)\left(a^2 - \mathbb{E}[a]^2\right)$$
$$= \int dw\, q(w)\left((w^T\phi)^2 - (m_N^T\phi)^2\right)$$
$$= \phi^T S_N \phi \qquad (4.150)$$

cf. (3.59) 予測分布の分散
$$\sigma_N^2(x) = \frac{1}{\beta} + \phi(x)\cdot S_N \phi(x)$$

○予測分布の変分近似

$$p(C_1|t) = \int da\, \sigma(a)\mathcal{N}(a|\mu_a, \sigma_a^2) \qquad (4.151)$$

ロジスティックシグモイド関数での Gaussian の畳み込み積分.

○ (4.151) のプロビット逆関数近似

~~周~~予測分布

$$p(C_1|\underset{\phi}{\uparrow}) = \int da\, \sigma(a)\, \mathcal{N}(a|\mu_a, \sigma_a^2) \quad (4.151)$$

$$\left(\sigma(a) \simeq \Phi\left(\sqrt{\frac{\pi}{8}}a\right) \quad (\text{演習}4.25) \right.$$

シグモイドをプロビット逆関数で近似.

$$\simeq \int da\, \Phi\left(\sqrt{\frac{\pi}{8}}a\right) \mathcal{N}(a|\mu_a, \sigma_a^2)$$

(演習4.26)

$$\left(\int da\, \Phi(\lambda a) \mathcal{N}(a|\mu, \sigma^2) = \Phi\left(\frac{\mu}{\sqrt{\lambda^{-2}+\sigma^2}}\right) \quad (4.152) \right)$$

$$\| $$

$$\Phi\left(\frac{\mu\lambda}{\sqrt{1+\lambda^2\sigma^2}}\right)$$

$$= \Phi\left(\sqrt{\frac{\pi}{8}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1+\frac{\pi}{8}\sigma_a^2}}}_{\kappa(\sigma^2)\ (4.154)} \mu_a\right)$$

$$= \Phi\left(\sqrt{\frac{\pi}{8}}\left(\kappa(\sigma_a^2)\mu_a\right)\right)$$

(演習4.25)

$$\left(\sigma(a) \simeq \Phi\left(\sqrt{\frac{\pi}{8}}a\right) \right) \quad (4.155)$$

$$\simeq \sigma(\kappa(\sigma_a^2)\mu_a)$$