作成日：2019 年 10 月 26 日
慶應義塾大学理工学部物理学科
岡崎健人

卒研ゼミ「深層学習」

5 機械学習の基礎

5.6 ベイズ統計

データ $D_m := \left\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\right\}$ が与えられたとき、データによって決まるパラメータが $\boldsymbol{\theta}$ という値をとりうる確率はベイズの定理より

$$p(\boldsymbol{\theta} \mid D_m) = \frac{p(D_m \mid \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})}{p(D_m)} \propto p(D_m \mid \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}) \tag{1}$$

となる。中辺の分母は

$$p(D_m) = \int p(D_m \mid \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})\, \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}$$

で計算でき、これは $\boldsymbol{\theta}$ によらず、また $D_m = \left\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\right\}$ の値は既知のものであるから、定数として扱ってよい。式 (1) の $p(\boldsymbol{\theta})$ を事前確率（分布）、$p(\boldsymbol{\theta} \mid D_m)$ を事後確率（分布）、$p(D_m \mid \boldsymbol{\theta})$ を尤度という。事前確率はデータを手に入れる前に想定していた確率であるのに対して、事後確率はデータを得たあとに事前確率を修正（ベイズ修正）したものである。式 (1) からわかるように、ベイズ修正とは事前確率に尤度をかけて規格化を行うことである。

例：ベイズ線形回帰

m 個の訓練データ $\left(X^{(\mathrm{train})}, \boldsymbol{y}^{(\mathrm{train})}\right) = (X, \boldsymbol{y})$ が与えられたとする（右肩の (train) は省略する）。ここに $\boldsymbol{y} = [y_1, \ldots, y_m]^\top$ であり、基底関数を $\phi_k(x),\ k = 0, \ldots, n$ とすれば計画行列は $(X)_{ij} = [\phi_j(x_i)]$ である（推定関数を n 次多項式としたときは $\phi_k(x) = x^k$ であった）。$\boldsymbol{x} = [\phi_0(x), \ldots, \phi_n(x)]^\top,\ \boldsymbol{w} = [w_0, w_1, \ldots, w_n]^\top$ とすれば、訓練データによる y の推定は $\hat{y} = \displaystyle\sum_{k=0}^{n} w_k \phi_k(x) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}$ と表現できる。また各訓練データ $x_i\ (i = 1, \ldots, m)$ に対する y の推定を計算した $\hat{y}_i = \displaystyle\sum_{k=0}^{n} w_k \phi_k(x_i)$ を並べたベクトルを $\hat{\boldsymbol{y}} = \left[\hat{y}_1, \ldots, \hat{y}_m\right]^\top$ と書けば、$\hat{\boldsymbol{y}} = X\boldsymbol{w}$ である。

さて $X,\ \boldsymbol{y}$ が得られたもとで係数のパラメータが $\boldsymbol{w}$ となる条件付き確率 $p(\boldsymbol{w} \mid X, \boldsymbol{y})$ を求めたい。

$$p(\boldsymbol{w} \mid X, \boldsymbol{y}) = \frac{p(y \mid X, \boldsymbol{w})p(X \mid \boldsymbol{w})p(\boldsymbol{w})}{p(X, \boldsymbol{y})} \propto p(y \mid X, \boldsymbol{w})p(\boldsymbol{w})$$

参考文献

[1] 中谷秀洋. 「第 12 回　ベイズ線形回帰［前編］」. gihyo.jp. https://gihyo.jp/dev/serial/01/machine-learning/0012. 最終閲覧 2019 年 10 月 26 日.