

ベイズ推定 (Bayesian Inference)

1 ベイズの定理

ベイズの定理は、

$$P(A_i|B) = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{\sum_{k=1}^n P(B|A_k)P(A_k)}$$

と書ける。

この公式を確率関数に含まれるパラメータ θ_i の決定に用いる。すなわち、事象 A_i の確率 $P(A_i)$ の代わりに θ_i の確率 $\pi(\theta_i)$ を考える。パラメータが値 θ_i を取るときに事象 x が起こる確率を $f(x|\theta_i)$ で表す。すると、事象 x が起こったことが分かったときのパラメータ θ_i の確率 $P(\theta_i|x)$ は、

$$\pi(\theta_i|x) = \frac{f(x|\theta_i)\pi(\theta_i)}{\sum_{k=1}^n f(x|\theta_k)\pi(\theta_k)}$$

で与えられる。 θ が連続の場合には、

$$\pi(\theta|x) = \frac{f(x|\theta)\pi(\theta)}{\int f(x|\theta)\pi(\theta)d\theta}$$

となる。 $f(x|\theta)$ を尤度関数と呼ぶ。

2 二項分布またはベータ分布における p の推定

例として、硬貨投げ (coin flipping) を考えよう。硬貨を放り投げたときに、表 (Heads - H) が出る確率 p の取る値を θ とすると、裏 (Tails - T) の出る確率は $1 - \theta$ である。すなわち、1 回目に表または裏が出る確率は、各々、

$$\begin{aligned} f(H_1|\theta) &= \theta \\ f(T_1|\theta) &= 1 - \theta \end{aligned}$$

となる。硬貨を投げる前は、 θ は、0 から 1 のどの値も同様に確からしいとする。

$$\pi(\theta) = 1$$

すると、表または裏が出たと分かった時の θ の確率分布は、

$$\pi(\theta|H_1) = \frac{\theta \times 1}{\int_0^1 \theta \times 1 d\theta} = 2\theta \tag{1}$$

$$\pi(\theta|T_1) = \frac{(1 - \theta) \times 1}{\int_0^1 (1 - \theta) \times 1 d\theta} = 2(1 - \theta) \tag{2}$$

1 回目にコインの表 (H) が出た場合には、 $\pi(\theta|H) = 2\theta$ を新たな事前確率分布として 2 回目のコイン投げを行う。すると、

$$\begin{aligned}\pi(\theta|H_2H_1) &= \frac{\theta \times 2\theta}{\int_0^1 \theta \times 2\theta d\theta} = 3\theta^2 \\ \pi(\theta|T_2H_1) &= \frac{(1-\theta) \times 2\theta}{\int_0^1 (1-\theta) \times 2\theta d\theta} = 6\theta(1-\theta)\end{aligned}$$

1 回目にコインの裏 (T) が出た場合には、 $\pi(\theta|T) = 2(1-\theta)$ を新たな事前確率分布として 2 回目のコイン投げを行うと、

$$\begin{aligned}\pi(\theta|H_2T_1) &= \frac{\theta \times 2(1-\theta)}{\int_0^1 \theta \times 2(1-\theta) d\theta} = 6\theta(1-\theta) \\ \pi(\theta|T_2T_1) &= \frac{(1-\theta) \times 2(1-\theta)}{\int_0^1 (1-\theta) \times 2(1-\theta) d\theta} = 3(1-\theta)^2\end{aligned}$$

3 度目のコイン投げ

$$\begin{aligned}\pi(\theta|H_3H_2H_1) &= \frac{\theta \times 3\theta^2}{\int_0^1 \theta \times 3\theta^2 d\theta} = 4\theta^3 \\ \pi(\theta|T_3H_2H_1) &= \frac{(1-\theta) \times 3\theta^2}{\int_0^1 (1-\theta) \times 3\theta^2 d\theta} = 12\theta^2(1-\theta) \\ \pi(\theta|H_3T_2H_1) &= \frac{\theta \times 6\theta(1-\theta)}{\int_0^1 \theta \times 6\theta(1-\theta) d\theta} = 12\theta^2(1-\theta) \\ \pi(\theta|T_3T_2H_1) &= \frac{(1-\theta) \times 6\theta(1-\theta)}{\int_0^1 (1-\theta) \times 6\theta(1-\theta) d\theta} = 12\theta(1-\theta)^2 \\ \pi(\theta|H_3H_2T_1) &= \frac{\theta \times 6\theta(1-\theta)}{\int_0^1 \theta \times 6\theta(1-\theta) d\theta} = 12\theta^2(1-\theta) \\ \pi(\theta|T_3H_2T_1) &= \frac{(1-\theta) \times 6\theta(1-\theta)}{\int_0^1 (1-\theta) \times 6\theta(1-\theta) d\theta} = 12\theta(1-\theta)^2 \\ \pi(\theta|H_3T_2T_1) &= \frac{\theta \times 3(1-\theta)^2}{\int_0^1 \theta \times 3(1-\theta)^2 d\theta} = 12\theta(1-\theta)^2 \\ \pi(\theta|T_3T_2T_1) &= \frac{(1-\theta) \times 3(1-\theta)^2}{\int_0^1 (1-\theta) \times 3(1-\theta)^2 d\theta} = 4(1-\theta)^3\end{aligned}$$

一般に、コインを n 回投げた場合、順序は問わずに表が α 回、裏が β 回出たとすると、一回の試行で表が出る確率 p の値の確率分布は、ベータ分布

$$f(x; m, n) = \frac{\Gamma(m+n)}{\Gamma(m)\Gamma(n)} x^{m-1} (1-x)^{n-1}$$

を用いて、

$$\begin{aligned}\pi(\theta | \text{表の出た回数} = \alpha, \text{裏の出た回数} = \beta) &= f(\theta; \alpha+1, \beta+1) \\ &= \frac{(\alpha+\beta+1)!}{\alpha! \beta!} \theta^\alpha (1-\theta)^\beta\end{aligned}$$

と表されることが分かる。

θ の平均値

$$\begin{aligned} E(\theta) &= \int_0^1 \theta f(\theta; \alpha + 1, \beta + 1) d\theta \\ &= \frac{(\alpha + \beta + 1)!}{\alpha! \beta!} \int_0^1 \theta^{\alpha+1} (1 - \theta)^\beta d\theta \end{aligned}$$

を計算すれば良い。積分は部分積分法を用いる。

$$\begin{aligned} \int_0^1 \theta^{\alpha+1} (1 - \theta)^\beta d\theta &= \frac{1}{\alpha + 2} \int_0^1 \left(\frac{d}{d\theta} \theta^{\alpha+2} \right) (1 - \theta)^\beta d\theta \\ &= \frac{1}{\alpha + 2} \left\{ \theta^{\alpha+2} (1 - \theta)^\beta \Big|_0^1 + \beta \int_0^1 \theta^{\alpha+2} (1 - \theta)^{\beta-1} d\theta \right\} \\ &= \frac{\beta}{\alpha + 2} \int_0^1 \theta^{\alpha+2} (1 - \theta)^{\beta-1} d\theta \\ &= \frac{\beta(\beta - 1) \cdots 1}{(\alpha + 2)(\alpha + 3) \cdots (\alpha + \beta + 1)} \int_0^1 \theta^{\alpha+\beta+1} d\theta \\ &= \frac{\beta(\beta - 1) \cdots 1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2) \cdots (\alpha + \beta + 1)(\alpha + \beta + 2)} \\ &= \frac{(\alpha + 1)! \beta!}{(\alpha + \beta + 2)!} \end{aligned}$$

となるので、

$$E(\theta) = \frac{\alpha + 1}{\alpha + \beta + 2}$$

を得る。

θ の最尤推定

$$\frac{d}{d\theta} \left\{ \frac{(\alpha + \beta + 1)!}{\alpha! \beta!} \theta^\alpha (1 - \theta)^\beta \right\} = 0 \text{ より、 } \theta = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$$

3 正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ における平均 μ の推定

正規母集団 $N(\mu, \sigma^2)$ から n コのデータ $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ を取り出した場合、その尤度は、

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}|\theta) &= f(x_n|\theta) f(x_{n-1}|\theta) \cdots f(x_1|\theta) \\ &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left\{ -\frac{(x_i - \theta)^2}{2\sigma^2} \right\} \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma^2})^n} \exp \left\{ -\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \theta)^2}{2\sigma^2} \right\} \end{aligned}$$

ここで、 $\bar{x}_n = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$ を導入すると、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (x_i - \theta)^2 &= \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}_n) - (\bar{x}_n - \theta)]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}_n)^2 - 2(\bar{x}_n - \theta)(x_i - \bar{x}_n) + (\bar{x}_n - \theta)^2] \\ &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2 + n(\bar{x}_n - \theta)^2 \end{aligned}$$

となるので、

$$f(\mathbf{x}|\theta) \propto \exp \left\{ -\frac{(\bar{x}_n - \theta)^2}{2\sigma^2/n} \right\}$$

したがって、 θ の事後分布は、

$$\pi(\theta|\mathbf{x}) \propto \exp \left\{ -\frac{(\theta - \bar{x}_n)^2}{2\sigma^2/n} \right\} \pi(\theta)$$

となる。

ここで、 θ の事前分布 $\pi(\theta)$ を、平均 θ_0 、分散 σ^2 の正規分布

$$\pi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \exp \left\{ -\frac{(\theta - \theta_0)^2}{2\sigma_0^2} \right\}$$

に選ぶと、

$$\pi(\theta|\mathbf{x}) \propto \exp \left\{ -\frac{(\theta - \bar{x}_n)^2}{2\sigma^2/n} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{(\theta - \theta_0)^2}{2\sigma_0^2} \right\}$$

ところで、

$$\begin{aligned} \frac{(\theta - \bar{x}_n)^2}{\sigma^2/n} + \frac{(\theta - \theta_0)^2}{\sigma_0^2} &= \frac{n}{\sigma^2} (\theta^2 - 2\bar{x}_n\theta + \bar{x}_n^2) + \frac{1}{\sigma_0^2} (\theta^2 - 2\theta_0\theta + \theta_0^2) \\ &= \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) \theta^2 - 2 \left(\frac{n\bar{x}_n}{\sigma^2} + \frac{\theta_0}{\sigma_0^2} \right) \theta + \left(\frac{n\bar{x}_n^2}{\sigma^2} + \frac{\theta_0^2}{\sigma_0^2} \right) \end{aligned}$$

なので、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma_n^2} &= \frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_0^2} \\ \frac{\theta_n}{\sigma_n^2} &= \frac{n\bar{x}_n}{\sigma^2} + \frac{\theta_0}{\sigma_0^2} \end{aligned}$$

とおくと、

$$\begin{aligned} \frac{(\theta - \bar{x})^2}{\sigma^2/n} + \frac{(\theta - \theta_0)^2}{\sigma_0^2} &= \frac{1}{\sigma_n^2} \theta^2 - 2 \frac{\theta_n}{\sigma_n^2} \theta + \dots \\ &= \frac{(\theta - \theta_n)^2}{\sigma_n^2} + \dots \end{aligned}$$

となるので、

$$\pi(\theta|\mathbf{x}) \propto \exp \left\{ -\frac{(\theta - \theta_n)^2}{2\sigma_n^2} \right\} \tag{3}$$

である。

さらに新しいデータ x_{n+1} が得られたとすると、今度は (3) 式を事前分布として θ の事後分布を求める、

$$\begin{aligned}\pi(\theta|x_{n+1}) &\propto \exp\left\{-\frac{(x_{n+1}-\theta)^2}{2\sigma^2}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(\theta-\theta_n)^2}{2\sigma_n^2}\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{(\theta-\theta_{n+1})^2}{2\sigma_{n+1}^2}\right\}\end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sigma_{n+1}^2} &= \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_n^2} \\ \frac{\theta_{n+1}}{\sigma_{n+1}^2} &= \frac{x_{n+1}}{\sigma^2} + \frac{\theta_n}{\sigma_n^2}\end{aligned}$$

または、

$$\theta_{n+1} = \frac{\sigma_n^2 x_{n+1} + \sigma^2 \theta_n}{\sigma_n^2 + \sigma^2}$$

を得る。

4 カルマンフィルタ (Kalman Filter)

4.1 導出-その 1

時刻 t における状態を $x(t)$ 、観測値を $y(t)$ と置く。ここでは、簡単のために $x(t)$ と $y(t)$ はスカラーとする。また、時刻 1 における観測値 $y(1)$ から時刻 t における観測値 $y(t)$ までを用いた後の状態 $x(t)$ の推定値を $\hat{x}(t)$ と書く。状態 $x(t)$ は推定値 $\hat{x}(t)$ を中心とする分散 $\sigma_a(t)^2$ の正規分布に従うとする。ここで、サフィックス a は、観測値 $y(t)$ が求まった後 (after) であることを表す。

$$P(x(t)|y(1), \dots, y(t)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_a^2(t)}} \exp\left\{-\frac{(x(t) - \hat{x}(t))^2}{2\sigma_a^2(t)}\right\} \quad (4)$$

すなわち、

$$y(t) \text{ を用いて推定した } x(t) : N(\hat{x}(t), \sigma_a(t)) \text{ に従う}$$

状態方程式を

$$x(t) = Gx(t-1) + w(t) \quad (5)$$

とする。簡単のため G は時間に依存しない定数とする。 $w(t)$ は、平均 0、分散 $\sigma_w^2(t)$ の正規分布に従うとする。すなわち、

$$w(t) : N(0, \sigma_w(t)) \text{ に従うシステム雑音} \quad (6)$$

時刻 t における観測値 $y(t)$ が求まる前においては、 $x(t)$ は平均 $G\hat{x}(t-1)$ 、分散 $G\sigma_a^2(t-1) + \sigma_w^2(t)$ の正規分布に従う。簡単のために、

$$\sigma_b^2(t) = G\sigma_a^2(t-1) + \sigma_w^2(t) \quad (7)$$

と書こう。

状態 $x(t-1)$ の値が、観測値 $y(t-1)$ を用いて $\hat{x}(t-1)$ と推定された場合、雑音の平均は 0 だから、状態方程式から $x(t)$ の平均 $\hat{x}^-(t)$ を求めると、

$$\hat{x}^-(t) = G\hat{x}(t-1) \quad (8)$$

となるので、

$$P(x(t)|\hat{x}(t-1), y(1), \dots, y(t-1)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_b^2(t)}} \exp \left\{ -\frac{(x(t) - \hat{x}^-(t))^2}{2\sigma_b^2(t)} \right\} \quad (9)$$

ここで、時刻 t における観測 $y(t)$ はまだ行われていない (before) ので、分散にサフィックス b が付くことに注意しよう。

観測方程式を

$$y(t) = F_t x(t) + v(t) \quad (10)$$

ここで、

$$v(t) : N(0, \sigma_v^2(t)) \quad (11)$$

とする。

(10) 式の左辺に $\hat{y}^-(t)$ を代入すると、雑音 $v(t)$ は 0 だから、

$$\hat{y}^-(t) = F_t \hat{x}^-(t) = F_t G \hat{x}(t-1) \quad (12)$$

を得る。実際の観測量 $y(t)$ から $\hat{y}^-(t)$ を引いた量 e_t を定義する。

$$e(t) = y(t) - \hat{y}^-(t) \quad (13)$$

$$= F_t (x(t) - \hat{x}^-(t)) + v(t) \quad (14)$$

これをイノベーションという。これは、平均が $F_t (x(t) - G\hat{x}(t-1))$ 、分散が $\sigma_v^2(t)$ の正規分布にしたがう。

ここで、

$$e'(t) = \frac{e(t)}{F_t} + \hat{x}^-(t) \quad (15)$$

とおくと、

$$e'(t) = x(t) + \frac{v(t)}{F_t}$$

となる。これは、平均が $x(t)$ 、分散が $\sigma_v^2(t)/F_t^2$ に従う。すなわち、

$$P(e'(t)|x(t)) = \sqrt{\frac{F_t^2}{2\pi\sigma_v^2(t)}} \exp \left\{ -\frac{F_t^2}{2\sigma_v^2(t)} (e'(t) - x(t))^2 \right\} \quad (16)$$

となる。

以上により、(9) 式と (16) 式より、状態 $x(t)$ の確率分布が与えられたときの、 $e'(t)$ の事後分布は、

$$P(x(t)|e'(t)) \propto \exp \left\{ -\frac{F_t^2}{2\sigma_v^2(t)} (e'(t) - x(t))^2 \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{(x(t) - \hat{x}^-(t))^2}{2\sigma_b^2(t)} \right\} \quad (17)$$

$$\propto \exp \left\{ -\frac{((x(t) - \hat{x}(t))^2)}{2\sigma_a^2(t)} \right\} \quad (18)$$

となる。ここで、

$$\frac{1}{\sigma_a^2(t)} = \frac{F_t^2}{\sigma_v^2(t)} + \frac{1}{\sigma_b^2(t)} \quad (19)$$

$$\frac{\hat{x}(t)}{\sigma_a^2(t)} = \frac{F_t^2 e'(t)}{\sigma_v^2(t)} + \frac{\hat{x}^-(t)}{\sigma_b^2(t)} \quad (20)$$

である。

すなわち、(19) 式より、

$$\sigma_a^2(t) = \frac{\sigma_b^2(t)\sigma_v^2(t)}{F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v^2(t)} \quad (21)$$

また、(7) 式より、

$$\sigma_b^2(t) = G\sigma_a^2(t-1) + \sigma_w^2(t)$$

である。

また、(20) 式に (15) 式を代入し (19), (21) 式を用いると、

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \sigma_a^2(t) \left\{ \frac{F_t^2}{\sigma_v^2(t)} \left(\frac{e(t)}{F_t} + \hat{x}^-(t) \right) + \frac{G\hat{x}(t-1)}{\sigma_b^2(t)} \right\} \\ &= \sigma_a^2(t) \left\{ \frac{F_t^2}{\sigma_v^2(t)} + \frac{1}{\sigma_b^2(t)} \right\} \hat{x}^-(t) + \frac{F_t\sigma_a^2(t)}{\sigma_v^2(t)} e(t) \\ &= \hat{x}^-(t) + \frac{F_t\sigma_b^2(t)}{F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v^2(t)} e(t) \end{aligned}$$

を得る。

さらに、この状態推定値 $\hat{x}(t)$ をイノベーションの (13) 式を用いて書き改めると、

$$\hat{x}(t) = \hat{x}^-(t) + K(t)(y(t) - \hat{y}^-(t)) \quad (22)$$

となる。ここで、

$$K(t) = \frac{F_t\sigma_b^2(t)}{F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v^2(t)} \quad (23)$$

をカルマンゲイン (Kalman gain) という。

4.2 導出-その2

時刻 t における状態の推定値 $\hat{x}(t)$ は、(22) 式のように書けると考えるのは自然である。そこで、(22) 式から出発して、(4) 式で定義した

$$\sigma_a^2(t) = E[(x(t) - \hat{x}(t))^2] \quad (24)$$

を最小にするという条件から $K(t)$ を決定しよう。

$x(t) - \hat{x}(t)$ を (10), (12) 式を用いて書き直すと、

$$x(t) - \hat{x}(t) = x(t) - \left(\hat{x}^-(t) + K(t)(y(t) - \hat{y}^-(t)) \right) \quad (25)$$

$$= (x(t) - \hat{x}^-(t)) - K(t)(F_t x(t) + v(t) - F_t G \hat{x}(t-1)) \quad (26)$$

$$= (1 - K(t)F_t)(x(t) - \hat{x}^-(t)) - K(t)v(t) \quad (27)$$

となるので、

$$\begin{aligned}\sigma_a^2(t) &= E\left[(x(t) - \hat{x}(t))^2\right] \\ &= (1 - K(t)F_t)^2 E\left[(x(t) - \hat{x}^-(t))^2\right] + K^2(t)E\left[v^2(t)\right]\end{aligned}\tag{28}$$

を得る。(9) 式および (11) より、

$$\begin{aligned}E\left[(x(t) - \hat{x}^-(t))^2\right] &= \sigma_b^2(t) \\ E\left[v^2(t)\right] &= \sigma_v^2(t)\end{aligned}$$

なので、(28) 式は、

$$\sigma_a^2 = (1 - K(t)F_t)^2 \sigma_b^2 + K^2(t)\sigma_v^2(t)\tag{29}$$

となる。

この式を $K(t)$ で微分すると、

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_a^2}{dK(t)} &= -2F_t(1 - K(t)F_t)\sigma_b^2(t) + 2K(t)\sigma_v^2(t) \\ &= -2F_t\sigma_b^2(t) + 2K(t)(F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v(t))\end{aligned}$$

この式を 0 とおくと、

$$K(t) = \frac{F_t\sigma_b^2(t)}{F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v^2(t)}$$

を得る。