ベイズ推定 (Bayesian Inference)

1 ベイズの定理

ベイズの定理は、

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

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 $\mathrm{P}(A_i)$ 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 $\mathrm{P}(\theta_1|x)$ は、

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

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 $\boldsymbol{x} = \{x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n\}$ を取り出した場合、その尤度は、

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

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

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

となるので、

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

したがって、θ の事後分布は、

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

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、

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

ところで、

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

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、

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

となるので、

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

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と、

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

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 カルマンフィルター (Kalman Filter)

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 t における観測値 $y(t)$ 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。

$$
\mathrm{P}\left(x(t)\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_a^2(t)}}\exp\left\{-\frac{\left(x(t)-\hat{x}(t)\right)^2}{2\sigma_a^2(t)}\right\} \tag{4}
$$

すなわち、

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

状態方程式を

$$
x(t)=Gx(t-1)+w(t) \tag{5}
$$

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、

$w(t) : N\left(0,\ \sigma_w(t)\right)$ に従うシステム雑音

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、

$$
\sigma_b^2(t)=G\sigma_a^2(t-1)+\sigma_w^2(t) \tag{6}
$$

と書こう。すると、

$$\mathrm{P}(x(t)|\hat{x}(t-1)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_b^2(t)}}\exp\left\{-\frac{\bigl(x(t)-G\hat{x}(t-1)\bigr)^2}{2\sigma_b^2(t)}\right\} \tag{7}$$

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

$$y(t) = F_t x(t) + v(t) \tag{8}$$

ここで、

$$v(t) \quad : \quad N\left(0,\ \sigma_v^2(t)\right) \text{ に従う観測雑音}$$

とする。
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、

$$\hat{x}^-(t) = G\hat{x}(t-1) \tag{9}$$

この式を用いると、時刻 t における観測量 $y(t)$ の平均は、雑音 $v(t)$ の平均は 0 だから、

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

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。

$$\begin{aligned} e(t) &= y(t) - \hat{y}^-(t) &(10)\\ &= F_t\left(x(t) - G\hat{x}(t-1)\right) + v(t) &(11)\end{aligned}$$

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

$$e'(t) = \frac{e(t)}{F_t} + G\hat{x}(t-1) \tag{12}$$

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、

$$\mathrm{P}\bigl(e'(t)|x(t)\bigr) = \sqrt{\frac{F_t^2}{2\pi\sigma_v^2(t)}}\exp\left\{-\frac{F_t^2}{2\sigma_v^2(t)}\bigl(e'(t)-x(t)\bigr)^2\right\} \tag{13}$$

となる。
以上により、(7) 式と (13) 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、

$$\begin{aligned} \mathrm{P}\bigl(x(t)|e'(t)\bigr) &\propto \exp\left\{-\frac{F_t^2}{2\sigma_v^2(t)}\bigl(e'(t)-x(t)\bigr)^2\right\}\cdot\exp\left\{-\frac{\bigl(x(t)-G\hat{x}(t-1)\bigr)^2}{2\sigma_b^2(t)}\right\} &(14)\\ &\propto \exp\left\{-\frac{\bigl((x(t)-\hat{x}(t)\bigr)^2}{2\sigma_a^2(t)}\right\} &(15)\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\frac{1}{\sigma_a^2(t)} = \frac{F_t^2}{\sigma_v^2(t)} + \frac{1}{\sigma_b^2(t)} \tag{16}$$

$$\frac{\hat{x}(t)}{\sigma_a^2(t)} = \frac{F_t^2 e'(t)}{\sigma_v^2(t)} + \frac{G\hat{x}(t-1)}{\sigma_b^2(t)} \tag{17}$$

である。

すなわち、(16) 式より、

$$\sigma_a^2(t) = \frac{\sigma_b^2(t)\sigma_v^2(t)}{F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v^2(t)} \tag{18}$$

また、(6) 式より、

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

である。

また、(17) 式 に (12) 式を代入し (16)，(18) 式を用いると、

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

を得る。

さらに、この状態推定値 $\hat{x}(t)$ を事前状態推定値 (9) 式およびイノベーション (10) 式を用いて表すと、

$$\hat{x}(t) = \hat{x}^-(t) + K(t)\big(y(t) - \hat{y}^-(t)\big) \tag{19}$$

となる。ここで、

$$K(t) = \frac{F_t\sigma_b^2(t)}{F_t^2\sigma_b^2(t) + \sigma_v^2(t)} \tag{20}$$

をカルマンゲイン (Kalman gain) という。