五月祭じゃんけん bot

概要

人 i には固有の手の出し方があるが，これが状態(前のターンでの手，勝敗など)で条件づけたときの確率分布で特徴づけられると考える． これを予想するモデルを考えたい． すなわち，各状態 s，手 c に対して $P(c \mid s)$ (大きな行列)を推定したい．

これは結構難しい(と思う)．なぜなら，こちらが観測できるのは手を出した数であり，上の行列を直接観測することはおろか，観測するデータは一人当たり数十回程度であって，一つの成分を推定することすらほとんど不可能だからである．

よって，手の出し方について特徴量を見出し，その事前分布を(推定し)活用することが必要だと考える．

モデル

まず次のような設定を考える．

- 観測データ: $\left(C_t^{(i)}, S_t^{(i)}\right)$: 人 i の t 番目のターンで選んだ手と状態 $i = 1, ..., n,\ t = 1, ..., m$
- データの生成モデル:
  1. 人 i に固有のパラメータ $\theta^{(i)}$ が混合正規分布から生成される: $\theta^{(i)} \sim \mathrm{GMM}\left(\{(\pi_k, \mu_k, \Sigma_k)\}_{k=1}^{K}\right)$
  2. ある三階のテンソル T が存在して，人 i の手の出し方 $P^{(i)}(c \mid s)$ は $\mathrm{softmax}\left(T\theta^{(i)}\right)$ の (c, s) 成分，で書けるとする

2.についてちゃんと書くと，$\theta^{(i,x)}$ を $\theta^{(i)}$ の x 成分として，

$$P^{(i)}(c \mid s) = \frac{1}{Z_s} \exp\left(\sum_x T_{c,s,x} \theta^{(i,x)}\right) \text{, where } \ Z_s := \sum_c \exp\left(\sum_x T_{c,s,x} \theta^{(i,x)}\right)$$

である．

このような定式化の下で，次が(本来)考えるべき最尤推定問題である．ここで $Q := \{(\pi_k, \mu_k, \Sigma_k)\}_k$ であり，φ_Q は Q でパラメータづけられた θ の確率密度関数である．

$$\max_T \max_Q \sum_i \log\left[\int \phi_Q(\theta) \prod_t [\mathrm{softmax}\ T\theta]_{C_t^{(i)}, S_t^{(i)}} \,\mathrm{d}\theta\right]$$

一人あたりのターン数 m が十分に大きいとき，ラプラス法の観点から

$$\max_T \max_Q \sum_i \log\left[\phi_Q\left(\hat{\theta}^{(i)}\right) \prod_t \left[\mathrm{softmax}\ T\hat{\theta}^{(i)}\right]_{C_t^{(i)}, S_t^{(i)}}\right]$$

となると期待される．ここで，$\hat{\theta}^{(i)} \in \arg\max_\theta \sum_t \log\left[\mathrm{softmax}\ T\theta\right]_{C_t^{(i)}, S_t^{(i)}}$ である．つまり，最尤推定量である．しかし，ラプラス法:

$$\int g(x) e^{mf(x)} \,\mathrm{d}x \sim g(x_0) e^{mf(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{m|f''(x_0)|}}$$

の対数をとった式で $\frac{1}{2}\log(f''(x_0))$ の項も落としており[1]，m について関数値(ラプラス法で言う $e^{mf(x)}$ の $f(x)$ のこと)が一定でないので恐らく本当は正しくない．例えば ϕ_Q を活用するなどして，m が小さいときにより精度の良い収束先を考える必要があると感じている．

[1] これは対数をとったら無視できるかもしれません

また，実戦においては，相手のデータ $\{C_t, S_t\}_t$ を用いて θ を MAP 推定し:

$$\hat{\theta} \in \arg\max_{\theta} \log \phi_Q(\theta) + \sum_t \log\left[\mathrm{softmax}\ T\theta\right]_{C_t, S_t}$$

これを用いて，手の出し方を $P^{(i)}(c \mid s) = [\mathrm{softmax}\ T\theta]_{c,s}$ で推定するものとする．

上の最尤推定の解き方

EM アルゴリズムみたいなことをする．次の 1,2 を繰り返す．

1. T を固定して Q を推定
2. Q を固定して T を推定

T を固定して $Q = \{(\pi_k, \mu_k, \Sigma_k)\}_{k=1}^K$ を推定

$\theta^{(i)}$ を最尤推定した後に

$$\max_Q \sum_i \log\left[\phi_Q\left(\hat{\theta}^{(i)}\right) \prod_t \left[\mathrm{softmax}\ T\hat{\theta}^{(i)}\right]_{C_t^{(i)}, S_t^{(i)}}\right]$$

を解けばよい．これは $\prod$ から後ろの部分は関係ないので，

$$\max_Q \sum_i \log\left[\phi_Q\left(\hat{\theta}^{(i)}\right)\right]$$

という問題になる．

また，T が正しく，ターンが十分に多いとき，$\hat{\theta}^{(i)} \sim \mathrm{GMM}\left(\{(\pi_k, \mu_k, \Sigma_k)\}_{k=1}^K\right)$ が期待できるので， これは単に混合正規分布のパラメータ $\{(\pi_k, \mu_k, \Sigma_k)\}_{k=1}^K$ を推定する問題と等価である．混合正規分布に対する EM アルゴリズムを回すことにより，これは可能である．

Q を固定して T を推定

$\theta^{(i)}$ を最尤推定した後に

$$\max_T \sum_i \log\left[\phi_Q\left(\hat{\theta}^{(i)}\right) \prod_t \left[\mathrm{softmax}\ T\hat{\theta}^{(i)}\right]_{C_t^{(i)}, S_t^{(i)}}\right]$$

を解けばよい．$\hat{\theta}^{(i)}$ は T に依存していることに注意する．ここも，T と $\hat{\theta}^{(i)}$ を交互に求めることにする． あるいは T と $\hat{\theta}^{(i)}$ 両方について最適化して $\hat{\theta}^{(i)} = \arg\max \ldots$ の曲面に射影する方がよいかもしれない．どちらが良いかは尤度の形に依存するため，さらなる考察が必要である． とりあえず，ここでは前者のやり方を採用するものとする．このとき，$\hat{\theta}^{(i)}$ を固定した上での T の最大化は，

$$\max_T \sum_i \sum_t \log\left(\left[\mathrm{softmax}\ T\hat{\theta}^{(i)}\right]_{C_t^{(i)}, S_t^{(i)}}\right)$$

という問題と等価であることがわかる．これくらいの問題なら最適化のライブラリで解くことができる(し，手でもう少し簡単な問題にできるかもしれない)．

その他の微小な工夫

- T, θ の最適化時には安定化のため，$P^{(i)}(c \mid s) = [\mathrm{softmax}\ T\theta]_{c,s}$ についてエントロピー正則化を行う
- また θ のスケールに不定性があるので，θ 推定時には，$\|\theta\|_2^2$ による正則化を行う

余談

問題設定としては，パラメータの事前分布を適当に制限した一般のマルコフ連鎖における確率遷移行列の推定と同じである($P(c \mid s)$ を確率遷移行列に置き換える)