

「ベイズ統計の理論と方法」

8. 初等確率論の基礎

@tmiya_

June 7, 2017

8.1 確率分布と確率変数

- 関数 $q(x) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ が「確率分布/確率密度関数」 \Leftrightarrow

$$\forall x, q(x) \geq 0$$

$$\int q(x) dx = \int dx_1 \cdots \int dx_N q(x_1, \cdots, x_N) = 1$$

- 確率密度関数 $q(x)$ の元での集合 $A \subset \mathbb{R}^N$ の確率

$$Q(A) = \int_A q(x) dx$$

\mathbb{R}^N に値をとる確率変数 \Leftrightarrow

\mathbb{R}^N の上にランダムに値をとる変数 (あまり深く追求しない。See 注意 70.)

- $X \in A$ となる確率が $Q(A)$ \Leftrightarrow

「確率変数 X の確率分布は Q 」「確率変数 X は確率分布は $q(x)$ に従う」

例 30. 確率分布の例

- 平均 $a \in \mathbb{R}^N$, 分散共分散行列 Σ の正規分布

$$q(x) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2} \det(\Sigma)^{1/2}} \exp \left(-\frac{(x-a)^T \Sigma^{-1} (x-a)}{2} \right).$$

- $\delta(x-a)$: 確率 1 で $X = a$ となる確率変数の確率分布。デルタ関数。

$$\int \delta(x) f(x) dx = f(0).$$

但し、 $f(x)$ は無限回微分可能とする。

- X の確率分布が $q(x)$ 、 $Y = f(X)$ で定義される確率変数 Y に対して、 Y の確率分布 $p(y)$ は、

$$p(y) = \int \delta(y - f(x)) q(x) dx.$$

これは、 X から Y に変数変換するための公式、と考えると良さそう。

確認

$y = f(x_0)$ となる点 x_0 の周りで $f(x) \cong f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ と展開出来るとする。

$$\begin{aligned} p(y) &= \int \delta(y - f(x))q(x)dx \\ &= \int \delta(-f'(x_0)(x - x_0))q(x)dx \\ &= \frac{1}{|f'(x_0)|} \int \delta(x - x_0)q(x)dx \\ &= \frac{1}{|f'(x_0)|} q(x_0). \end{aligned}$$

一方で確率は表現で変わらないと考えと、

$$\begin{aligned} p(y)dy &= q(x)dx \\ \therefore p(y) &= q(x) \frac{dx}{dy} \\ &= \left. \frac{q(x)}{|f'(x)|} \right|_{x=x_0} \end{aligned}$$

8.2 平均と分散

- $q(x)$: \mathbb{R}^N 上の確率変数 X の確率分布、関数 $f(x) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ に対して、確率変数 $f(X)$ の平均は

$$\mathbb{E}[f(X)] = \int f(x)q(x)dx.$$

分散共分散を

$$\begin{aligned}\mathbb{V}[f(X)] &= \mathbb{E}[(f(X) - \mathbb{E}[f(X)])(f(X) - \mathbb{E}[f(X)])^T] \\ &= \mathbb{E}[f(X)f(X)^T] - \mathbb{E}[f(X)]\mathbb{E}[f(X)^T]\end{aligned}$$

平均あるいは分散共分散は、有限の場合のみ定義される。

- $\alpha \geq 1$ に対して、

$$\mathbb{E}[\|f(X)\|] \leq \mathbb{E}[\|f(X)\|^\alpha]^{1/\alpha}.$$

(ヘルダーの不等式)

ヘルダーの不等式

- 一般形 : (Ω, μ) を測度空間とし, $1 \leq p, q \leq \infty$ を $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ なる実数とする。 Ω 上の可測関数 f, g に関して、

$$\|fg\|_{L^1(\Omega, \mu)} \leq \|f\|_{L^p(\Omega, \mu)} \|g\|_{L^q(\Omega, \mu)}.$$

- 確率空間 (Ω, Σ, μ) 上の期待値を与える作用素を \mathbb{E} とし、確率変数 X, Y について、

$$\mathbb{E}[XY] \leq (\mathbb{E}[X^p])^{\frac{1}{p}} (\mathbb{E}[Y^q])^{\frac{1}{q}}.$$

$Y = 1_\Omega$ とすると前式が出る。

注意 71 凸集合

- \mathbb{R}^N の部分集合 A が凸集合 $\Leftrightarrow A$ 上の任意の 2 点を結ぶ直線が A に含まれる
- 集合 A が凸であれば、 A に値をとる確率変数の平均値は A に含まれる。
- 凸でなければ含まれるとは限らない。(ベイズ事後分布によるパラメータの平均は、真のパラメータの近くにあるとは限らない) \Rightarrow 先の内容をやってから振り返る予定。

8.3 同時分布と条件付き確率

- 2つの確率変数 X, Y があるとき、その組 (X, Y) を一つの確率変数と考える。 (X, Y) の確率分布が $p(x, y)$ であるときこれを同時確率分布という。周辺確率分布を

$$p(x) = \int p(x, y) dy, \quad p(y) = \int p(x, y) dx.$$

と定義すると X の確率分布は $p(x)$ 、 Y の確率分布は $p(y)$ となる。

- X が与えられたときの Y の条件付き確率分布を

$$p(y|x) = \frac{p(x, y)}{p(x)}$$

と定義する。これは x をパラメータとする y の確率分布と考えて良い。

- ベイズの定理

$$p(x, y) = p(y|x)p(x) = p(x|y)p(y)$$

- X, Y が独立 $\Leftrightarrow p(x, y) = p(x)p(y)$

8.3 同時分布と条件付き確率

- $X = x$ のときの Y の平均値を

$$\mathbb{E}[Y|x] = \int yp(y|x)dx$$

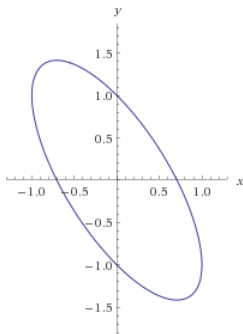
と書く (x から Y への回帰関数)。これは x の関数だが y の関数ではない。

- 一般に $\mathbb{E}[Y|x]$ と $\mathbb{E}[X|y]$ は逆関数ではない。

注意 72

$$p(x, y) \propto \exp(-2x^2 - 2xy - y^2).$$

教科書の計算間違ってる。



$$-2x^2 - 2xy - y^2 = -1 \text{ のグラフ}$$

x と y とは負の相関のはず

注意 72

$$\begin{aligned}
 p(x, y) &\propto \exp(-2x^2 - 2xy - y^2). \\
 p(x) &\propto \int \exp(-2x^2 - 2xy - y^2) dy \\
 &\propto \int \exp(-x^2) \exp(-x^2 - 2xy - y^2) dy, \quad x + y = u \\
 &\propto \exp(-x^2) \underbrace{\int \exp(-u^2) du}_{\text{const.}} \propto \exp(-x^2). \\
 p(y) &\propto \int \exp(-2x^2 - 2xy - y^2) dx \propto \exp(-y^2/2). \\
 p(y|x) &= p(x, y)/p(x) \\
 &\propto \exp(-x^2 - 2xy - y^2) = \exp\{-(x + y)^2\}. \\
 p(x|y) &= p(x, y)/p(y) \propto \exp\{-2(x + y/2)^2\}. \\
 E[Y|x] &= \int y p(y|x) dy \\
 r &\propto \int y \exp\{-(x + y)^2\} dy, \quad x + y = u \\
 &\propto \int (u - x) \exp(-u^2) du = -x \\
 E[X|y] &= \int x p(x|y) dx = -y/2
 \end{aligned}$$

正規化定数は積分して 1 になるように決まるので、平方完成だけ注意すれば上記のように計算できる。多変数正規分布でもほぼ同様に。

8.4 カルバック・ライブラ情報量

二つの確率分布 $q(x)$, $p(x)$ に対してカルバック・ライブラ情報量

$$D(q\|p) = \int q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} dx.$$

- 任意の $q(x)$, $p(x)$ に対して $D(q\|p) \geq 0$
- $D(q\|p) = 0 \Rightarrow q(x) = p(x)$
- $q(x) \approx p(x)$ のとき

$$D(q\|p) \cong \frac{1}{2} \int q(x) (\log q(x) - \log p(x))^2 dx$$

8.4 カルバック・ライブラ情報量

$F(t) = t + e^{-t} - 1$ とおくと、 $F(t) \geq 0$ ($F(t) = 0 \Leftrightarrow t = 0$) は明らか。 ($F'(t) = 1 - e^{-t}$)

$$\begin{aligned}\int q(x) F\left(\log \frac{q(x)}{p(x)}\right) &= \int \left(q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} + \underbrace{p(x)}_{\int=1} - \underbrace{q(x)}_{\int=1} \right) dx \\ &= D(q\|p)\end{aligned}$$

ゆえ、 $D(q\|p) \geq 0$ かつ等号成立は $q(x) = p(x)$.

$$\begin{aligned}F(t) &= t + e^{-t} - 1 \\ &= t + 1 - t + \frac{t^2}{2} + O(t^3) - 1 \cong \frac{t^2}{2}.\end{aligned}$$

よって $q(x) \approx p(x)$ で

$$\begin{aligned}D(q\|p) &= \int q(x) F\left(\log \frac{q(x)}{p(x)}\right) \\ &\cong \int q(x) (\log q(x) - \log p(x))^2 dx.\end{aligned}$$

- $q(x)$ が情報源、 $p(x)$ が情報受理装置。式が対象でなくても OK
- 統計的推測 = 与えられた $q(x)$ に対して $D(q\|p)$ を最小にする $p(x)$ をみつける

8.5.1 極限定理

- \mathbb{R}^N に値をとる確率変数の列 $\{X_n\}_{n=1}^{\infty}$ が定数 c に確率収束するとは、任意の $\epsilon < 0$ に対して、 $\|X_n - c\| < \epsilon$ となる確率が 1 に収束すること。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(\|X_n - c\| < \epsilon) = 1$$

- $\{X_n\}_{n=1}^{\infty}$ が確率変数 X に法則収束するとは、 X_n の確率分布が $q_n(x)$ で、 X の確率分布が $q(x)$ のとき、任意の有界かつ連続な関数に関して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int F(x) q_n(x) dx = \int F(x) q(x) dx$$

法則収束

- 法則収束の定義は本来は別らしい。

$$F_X(x) = \Pr(X \leq x) = \Pr(X_1 \leq x_1, \dots, X_N \leq x_n)$$

X_n が X に法則収束する : $X_n \xrightarrow{\mathcal{L}} X$

$\stackrel{\text{def}}{\implies} F_X$ の任意の連続点 x について $F_{X_n}(x) \rightarrow F_X(x)$.

- ヘリー・ブレイの定理 : 任意の有界かつ連続な関数 g に関して

$$X_n \xrightarrow{\mathcal{L}} X \iff \mathbb{E}[g(X_n)] \rightarrow \mathbb{E}[g(X)]$$

詳しくは「必携 統計的大標本論」p.16 参照。

- 参考 : 特性関数

$\varphi_X(t) = \mathbb{E}[it^T X] = \mathbb{E}[i(t_1 X_1 + \dots + t_N X_N)]$ に対して、

$$X_n \xrightarrow{\mathcal{L}} X \iff \varphi_{X_n}(t) \rightarrow \varphi_X(t)$$

\Leftarrow の証明は「必携 統計的大標本論」p.21 参照。大数の法則や中心極限定理を証明するときに特性関数を使う。

8.5.2 大数の法則と中心極限定理

\mathbb{R}^N に値をとる独立な確率変数 X_1, X_2, \dots, X_n が X と同じ分布を取る (i.i.d) とする。この時、

- X が有限な平均 $\mathbb{E}[X]$ を持つとき、 $(X_1 + X_2 + \dots + X_n)/n$ は $\mathbb{E}[X]$ に確率収束。(大数の法則。証明は $\mathbb{V}[X]$ が有限の場合はチェビシェフの不等式を使っても可能)
- X が有限な分散共分散 $\mathbb{V}[X] = \mathbb{E}[XX^T] - \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[X^T]$ を持つとする。このとき、

$$Y_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (X_i - \mathbb{E}[X])$$

は平均 0、分散共分散が $\mathbb{V}[X]$ の正規分布に法則収束する。(中心極限定理)

8.5.3 経験過程

\mathbb{R}^N に値をとる独立な確率変数 X_1, \dots, X_n が X と同じ分布に従うとする。パラメータの集合 $W \subset \mathbb{R}^d$ をコンパクトとする。

$f(x, w) : \mathbb{R}^N \times W \rightarrow \mathbb{R}$ とする。

- 条件 $\mathbb{E}_X[\sup_{w \in W} |f(X, w)|] < \infty$,
 $\mathbb{E}_X[\sup_{w \in W} |\nabla_w f(X, w)|] < \infty$ のとき、 $\forall \epsilon > 0$ について

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Pr \left(\sup_{w \in W} \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i, w) - \mathbb{E}_X[f(X, w)] \right| < \epsilon \right) = 1.$$

(関数空間上の大数の法則)

8.5.3 経験過程

- W 上の関数で確率的に変動するもの $\xi(w)$ が平均関数 $m(w)$ と相関関数 $\rho(w, w')$ を持つ正規確率過程 \Leftrightarrow
 $m(w) = \mathbb{E}_{\xi}[\xi(w)], \rho(w, w') = \mathbb{E}_{\xi}[\xi(w)\xi(w')].$
コンパクト集合上の正規確率過程は、平均関数と相関関数が決まればユニークに決まる。

8.5.3 経験過程

次に、

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_X[\sup_{w \in W} |f(X, w) - \mathbb{E}_X[f(X, w)]|^\alpha] &< \infty \\ \mathbb{E}_X[\sup_{w \in W} |\nabla_w(f(X, w) - \mathbb{E}_X[f(X, w)])|^\alpha] &< \infty\end{aligned}$$

が $\alpha = 2$ で成り立つとする。

$$Y_n(w) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (f(X_i, w) - \mathbb{E}_X[f(X, w)])$$

は、平均 0, 相関係数

$$\rho(w, w') = \mathbb{E}_X[f(X, w)f(X, w')] - \mathbb{E}_X[f(X, w)]\mathbb{E}_X[f(X, w')]$$

の正規確率過程 $Y(w)$ に法則収束する。(関数空間上の中心極限定理)
 $Y_n(w)$ を経験過程という。

8.5.3 経験過程

ただし、確率過程 $Y_n(w)$ が $Y(w)$ に法則収束する \Leftrightarrow
有界連続な汎関数 $F(\cdot)$ に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[F(Y_n)] = \mathbb{E}_Y[F(Y)]$$

汎関数 $F(\cdot)$ が連続 \Leftrightarrow

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{w \in W} |f_n(w) - f(w)| = 0 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} F(f_n) = F(f).$$

$$\mathbb{E}_X[\sup_{w \in W} |f(X, w) - \mathbb{E}_X[f(X, w)]|^\alpha] < \infty$$

が $\alpha = 2 + \delta$ ($\delta > 0$) で成り立てば、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[\sup_{w \in W} |Y_n(w)|^2] = \mathbb{E}_Y[\sup_{w \in W} |Y(w)|^2].$$

中心極限定理 $\Rightarrow Y_n(w)$ は各点毎に $Y(n)$ に法則収束。
 収束 $Y_n(w) \rightarrow Y(w)$ が一様かどうかはわからない。
 経験過程の定理は、ある条件下で一様に収束することを示している。