

復習 1

$$p(\boldsymbol{w}, \mathcal{D}) = p(\mathcal{D})p(\boldsymbol{w}|\mathcal{D}) = p(\boldsymbol{w})p(\mathcal{D}|\boldsymbol{w})$$
(1)

$$p(\boldsymbol{w}, \mathcal{D}) = p(\mathcal{D})p(\boldsymbol{w}|\mathcal{D}) = p(\boldsymbol{w})p(\mathcal{D}|\boldsymbol{w})$$

$$p(\boldsymbol{w}|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\boldsymbol{w})p(\boldsymbol{w})}{p(\mathcal{D})}$$
(2)

1.2.6 ベイズ曲線フィッティング 2

$$p(\boldsymbol{w}|\mathbf{x}, \mathbf{t}, \alpha, \beta) = \frac{p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \boldsymbol{w}, \beta)p(\boldsymbol{w}|\alpha)}{p(\mathbf{x}, \mathbf{t}, \alpha, \beta)}$$
(3)

$$p(\boldsymbol{w}|\mathbf{x}, \mathbf{t}, \alpha, \beta) \propto p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \boldsymbol{w}, \beta)p(\boldsymbol{w}|\alpha)$$
 (1.66)

上記は、最大事後確率 (MAP; maximum a posteriori) となるが、最大となる w の点を推定しているだけ。完

全なベイズというには ${\bf w}$ のすべての値で積分する必要がある。(すなわち、いろいろな ${\bf w}$ がそれぞれの事後確率で出力され、それぞれの ${\bf w}$ にて ${\bf x}$ から ${\bf t}$ を予想する)。問題としては、 ${\bf x}$ から ${\bf t}$ を予測する問題で、訓練例として ${\bf x}$, ${\bf t}$ が与えられるので次のようになる。

$$p(t|x, \mathbf{x}, \mathbf{t}) = \int p(t|x, \mathbf{w}) p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \mathbf{t}) d\mathbf{w}$$
 (1.68)

ここで式 (1.60) から、

$$p(t|x, \mathbf{t}, \beta) = \mathcal{N}(t|y(x, \boldsymbol{w}), \beta^{-1})$$
 (1.60)
$$p(t|x, \mathbf{t}) = \mathcal{N}(t|y(x, \boldsymbol{w}))$$
 (1.60')

式 (1.66) から、事後分布

$$p(\boldsymbol{w}|\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \frac{p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \boldsymbol{w}, \beta)p(\boldsymbol{w}|\alpha)}{\sum p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \boldsymbol{w}, \beta)p(\boldsymbol{w}|\alpha)}$$

となり、これらから、式 (1.68) は解析的に解くことができ、

$$p(t|x, \mathbf{x}, \mathbf{t}) = \mathcal{N}(t|m(x), s^2(x))$$
 (1.69)

ここで、平均と分散は、

$$m(x) = \beta \phi(x)^{\mathrm{T}} \mathbf{S} \sum_{n=1}^{N} \phi(x_n) t_n \qquad (1.70)$$
$$s^2(x) = \beta^{-1} + \phi(x)^{\mathrm{T}} \mathbf{S} \phi(x) \qquad (1.71)$$

となり行列 Sは、

$$S^{-1} = \alpha \mathbf{I} + \beta \sum_{n=1}^{N} \phi(x_n) \phi(x_n)^{\mathrm{T}}$$

で与えられる。ここで \mathbf{I} は単位行列で、 $\phi_i(x)=x^i(i=0,...,M)$

3 1.3 モデル選択

最小二乗法の例にて、最適な次数があった。次数のようなモデルの複雑さを、最小二乗法では正則化係数 λ により制御するし、他の学習手法もそのようなパラメータがある。これらは未知の事例に対する予測が最も良いものを選ぶ。

過学習があるので、訓練データとは別に、確認用集合 (検証用集合; validation set) を用意しておき、これらのパラメータを調整し、最後に、テスト用集合 (test set) にて性能の最終評価を行う。

