

正規モデルのベイズ推定・事後予測分布

樋口さぶろお <https://hig3.net>

龍谷大学大学院 先端理工学部研究科 数理・情報科学コース

計算科学特論 L06(2024-10-30 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2024-10-30 Wed 08:51 JST hig"

今日の目標

- 正規モデルと、その共役分布を説明できる
- 事後予測分布を説明できる



L05-Q2

Quiz 解答: 正規分布の確率

$$f(x) = C' e^{-\frac{(x-3)^2}{2(1/4)^2}}$$

とかけるので, $X \sim N(3, (\frac{1}{4})^2)$ であり,

- ① $E[X] = 3$.
- ② $V[X] = (\frac{1}{4})^2$.
- ③ $x = 3$ を真ん中に幅 $\frac{1}{4}$ くらいの正規分布の確率密度関数のグラフ.
標準正規分布を, 横に $1/4$ 倍, 縦に 4 倍, 右に 3 平行移動.

ここまで来たよ

5 ポアソンモデルのベイズ推定

6 正規モデルのベイズ推定・事後予測分布

- 正規モデル（母分散固定）
- ベイズ推定再論
- 正規モデル（母平均値，母分散パラメタ）

正規分布の再生性

確率変数 $X \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$, $Y \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$ が独立のとき,
和の確率変数 $S = X + Y \sim N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$.

モーメント母関数を使うと楽に、使わなくてもローテクな直接計算で証明できる.

L06-Q1

Quiz(正規分布の和の分布)

連続型確率変数 X_1, X_2 は, 独立同分布 $N(0, 1^2)$ にしたがう.

- ① 連続型確率変数 $S = X_1 + X_2$ のしたがう分布を答えよう.
- ② 連続型確率変数 $D = 2X_1$ のしたがう分布を答えよう.

正規モデル

Hoff ベイズ §5

ドーナツ製造機は、母平均値 μ g, 母分散 σ^2 g² の正規分布にしたがう質量 y g のドーナツを作り出す. $Y \sim N(\mu, \sigma^2)$

$$f(y|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

当面, σ^2 は固定して定数と思う.

共役分布は、各測定値の同時分布を「 μ の分布としてみたもの」…また正規分布じゃん.

事前分布を, $N(\mu_0, \tau_0^2)$ としてみる.

$$f(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0^2}} e^{-\frac{(\mu-\mu_0)^2}{2\tau_0^2}}$$

標本 $y_1, \dots, y_N$.
事後分布は

$$f(\theta|y_1, \dots, y_N) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i (y_i - \mu)^2} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0^2}} e^{-\frac{(\mu - \mu_0)^2}{2\tau_0^2}}$$

計算 μ のどんな分布？

$$\mu \sim N\left(\frac{\tau_0^{-2}\mu_0 + N\sigma^{-2}\frac{1}{N}\sum_i y_i}{\tau_0^{-2} + N\sigma^{-2}}, (\tau_0^{-2} + N\sigma^{-2})^{-1}\right)$$

情報の統合

$$E[\mu] = \frac{\tau_0^{-2}}{\tau_0^{-2} + N\sigma^{-2}}\mu_0 + \frac{N\sigma^{-2}}{\tau_0^{-2} + N\sigma^{-2}} \frac{1}{N} \sum_i y_i.$$

$$V[\mu]^{-1} = \tau_0^{-2} + N\sigma^{-2}.$$

$\tilde{\sigma}^2 := \sigma^{-2} = 1/\text{分散}$ を**精度** (precision) とでも呼んだ方が簡単.

L06-Q2

Quiz(正規分布の母平均値のベイズ推定)

確率変数 Y は, 正規分布にしたがう. すなわち,

$$f(y|\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

事前分布を

$$f(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0^2}} e^{-\frac{(\mu-\mu_0)^2}{2\tau_0^2}}$$

として, 母平均値 μ のベイズ推定を考える.

- ① Y のサイズ 1 の標本として, y_1 が得られたとき, μ の事後分布を求めよう. μ の母平均値, 母分散を求めよう.
- ② 上の場合の予測分布 $f(\tilde{y}|y_1)$ を求めよう.
- ③ Y のサイズ 2 の標本として, y_1, y_2 が得られたとき, μ の事後分布を求めよう. μ の母平均値, 母分散を求めよう.

ここまで来たよ

5 ポアソンモデルのベイズ推定

6 正規モデルのベイズ推定・事後予測分布

- 正規モデル（母分散固定）
- **ベイズ推定再論**
- 正規モデル（母平均値，母分散パラメタ）

事後分布からの点推定

尤度からの推定

確率モデルの $L(\theta) = \prod_i f_{Y|\theta}(y_i|\theta)$ を, θ の関数としてみたとき, 尤度 (ゆうど, likelihood) という. 事前分布によらない.

- 最尤推定 MLE Maximum Likelihood Estimation $\operatorname{argmax}_{\theta} f_{Y|\theta}(y|\theta)$.

事後分布からの点推定

θ の事後分布 $f_{\theta|Y}(\theta|y)$. もし, 事前分布が一様なら, 尤度と一致.

- ベイズ MAP 推定 Maximum a posteriori $\operatorname{argmax}_{\theta} f_{\theta|Y}(\theta|y)$
- ベイズ EAP 推定 Expected a posteriori $E[\Theta|y] = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta f_{\theta|Y}(\theta|y) d\theta$.
- ベイズ MED 推定 median=事後分布における中央値=($1 - \alpha = 0.00$ ベイズ信用区間)

事後分布からの広がりを持った推定 (既出)

L06-Q3

Quiz(ベイズ推定)

あるパラメタ θ の事後分布 $f(\theta|y)$ が, $\text{beta}(2, 3)$ にしたかう.

- θ のベイズ MAP 推定を求めよう.
- θ のベイズ EAP 推定を求めよう.
- θ のベイズ MED 推定を求めよう. Python を使って数値的でもよい.

Hint. 3 回目の課題.

事後予測分布

予測分布とは、確率モデル $f(y|\theta)$, 標本 $y_1, \dots, y_N$ を元にした, 次の観測値 $\tilde{y}$ のしたがう分布のこと.

頻度論例えば, $Y \sim N(\mu, \sigma^2)$ のとき,

μ の点推定 $\hat{\mu} = \bar{y} = \frac{1}{N}(y_1 + \dots + y_N)$. $\tilde{Y} \sim N(\hat{\mu}, \sigma^2)$.

ベイズ的一般論で,

θ の事後分布 $f_{\theta|Y}(\theta|y)$ で, 確率モデル $f(y|\theta)$ を重み付けして加えたものを**事後予測分布**という.

$$f_{Y|Y}(\tilde{y}|y_1, \dots, y_N) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{Y|\theta}(\tilde{y}|\theta) \times f_{\theta|Y}(\theta|y_1, \dots, y_N) d\theta.$$

事後予測分布（二項モデル）

Hoff ベイズ p.45

事前分布 $\Theta \sim \text{beta}(a, b)$, 観測値 $y_1, \dots, y_N$ のもとでの.

$$\begin{aligned} & P(\tilde{Y} = 1 | Y_1 = y_1, \dots) \\ &= \int_0^{+\infty} P(\tilde{Y} = 1, \Theta = \theta | Y_1 = y_1, \dots) d\theta \\ &= \int_0^{+\infty} P(\tilde{Y} = 1 | \Theta = \theta, Y_1 = y_1, \dots) f(\theta | y_1, \dots, y_N) d\theta \\ &= \int_0^{+\infty} P(\tilde{Y} = 1 | \Theta = \theta) \times f(\theta | y_1, \dots, y_N) d\theta \\ &= \int_0^{+\infty} \theta \times f(\theta | y_1, \dots, y_N) d\theta \\ &= E[\Theta | y_1, \dots] = \frac{a + \sum_i y_i}{a + b + N} \end{aligned}$$

事後予測分布 (ポアソンモデル)

Hoff ベイズ p.54

事前分布 $\Theta \sim \text{gamma}(a, b)$, 観測値 $y_1, \dots, y_N$ のもとでの.

$$\begin{aligned}
 f_{Y|Y:}(\tilde{y}|y_1, \dots, y_N) &= \int_0^{+\infty} f_{Y, \theta|Y:}(\tilde{y}, \theta|y_1, \dots, y_N) d\theta \\
 &= \int_0^{+\infty} f_{Y|\theta, Y:}(\tilde{y}|\theta, y_1, \dots, y_N) f(\theta|y_1, \dots, y_N) d\theta \\
 &= \int_0^{+\infty} f(\tilde{y}|\theta) \times f(\theta|y_1, \dots, y_N) d\theta \\
 &= \int_0^{+\infty} \frac{1}{\tilde{y}!} \theta^{\tilde{y}} e^{-\theta} \times \frac{(b+N)^{a+\sum_i y_i}}{\Gamma(a+\sum_i y_i)} \theta^{a+\sum_i y_i-1} e^{-(b+N)\theta} d\theta \\
 &= \dots = \text{'パラメタ } a + \sum_i y_i, b+N \text{ の負の二項分布'}
 \end{aligned}$$

事後予測分布（正規モデル（分散固定））

事前分布 $\mu \sim \text{gamma}(\mu_0, \tau_0^2)$, 観測値 $y_1, \dots, y_N$ のもとでの.

$$\begin{aligned} f_{Y|Y:}(\tilde{y}|y_1, \dots, y_N) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_{Y, \mu|Y:}(\tilde{y}, \mu|y_1, \dots, y_N) d\mu \\ &= \int_0^{+\infty} f_{Y|\mu, Y:}(\tilde{y}|\mu, y_1, \dots, y_N) f(\mu|y_1, \dots, y_N) d\theta \\ &= \int_0^{+\infty} f(\tilde{y}|\theta) \times f(\theta|y_1, \dots, y_N) d\theta \end{aligned}$$

正規分布にしたがう独立な確率変数 $X_1 \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$, $X_2 \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$ に対して, 和 $S = X_1 + X_2 \sim N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$ であることから,

$$\tilde{Y} \sim N\left(\frac{\tau_0^{-2}\mu_0 + N\sigma^{-2}\frac{1}{N}\sum_i y_i}{\tau_0^{-2} + N\sigma^{-2}}, (\tau_0^{-2} + N\sigma^{-2})^{-1} + \sigma^2\right).$$

ここまで来たよ

5 ポアソンモデルのベイズ推定

6 正規モデルのベイズ推定・事後予測分布

- 正規モデル（母分散固定）
- ベイズ推定再論
- 正規モデル（母平均値，母分散パラメタ）

正規モデル (母平均値, 母分散パラメタ)

Hoff ベイズ §5.3

ドーナツ製造機は, 母平均値 μ g, 母分散 σ^2 g² の正規分布にしたがう質量 y g のドーナツを作り出す.

ここまでの μ が (μ, σ^2) になると思えばよい.

$$f(y|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

2 変数の事後分布

$$\begin{aligned} f(\mu, \sigma^2) &= C f(y_1, \dots, y_N | \mu, \sigma^2) f(\mu, \sigma^2) \\ &= C f(y_1, \dots, y_N) f(\mu | \sigma^2) f(\sigma^2) \end{aligned}$$

共役分布を探そう. μ については正規分布. $\sigma^2 > 0$ については知ってる分布でないが, $\tilde{\sigma}^2 = 1/\sigma^2 > 0$ を変数と見直すと, ガンマ分布が共役分布になりそう.

$$f(y|\mu, \sigma^2) = \frac{(\tilde{\sigma}^2)^{1/2}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\sigma}^2(y-\mu)^2}$$
$$f(\theta|a, b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} \theta^{a-1} e^{-b\theta} \quad (\theta > 0)$$

$\tilde{\sigma}^2 \sim \text{gamma}(a, b)$ のとき, 逆数 $\sigma^2 = 1/\tilde{\sigma}^2$ のしたがう分布を, **逆ガンマ分布** (inverse gammadistribution) という.
 $\sigma^2 = 1/\tilde{\sigma}^2 \sim \text{inverse-gamma}(a, b)$.

L06-Q4

Quiz(確率変数の変数変換)

一様分布にしたがう確率変数 $X = U(1, 2)$ に対して, $Y = 1/X$ を考える. Y の確率密度関数を求めよう.

事前分布

$$\tilde{\sigma}^2 = 1/\sigma^2 \sim \text{gamma}(a, b)$$

$$\mu|\sigma \sim N(\mu_0, \tau_0^2)$$

$$Y_1, \dots, Y_n | \Theta, \sigma^2 \sim N(\mu, \sigma^2)$$

さらに, τ_0^2 が σ^2 に正比例するように修正する: $\tau_0^2 = \sigma^2 / \kappa_0$.

a, b は, あとで解釈しやすくなるように, $a = \frac{1}{2}\nu_0, b = \frac{1}{2}\nu_0\sigma_0^2$ とおく (パラメトライズする).

$\kappa_0, \nu_0, \sigma_0$ が確率分布を持たない本当の定数.

事後分布

μ の事後分布は正規分布に戻る. $\mu|y_1, \dots, y_N, \sigma^2 \sim N(\frac{\kappa_0\mu_0 + N\bar{y}}{\kappa_0 + N}, \frac{\sigma^2}{\kappa_0 + N})$.

σ^2 の事後分布はガンマ分布に戻る.

$$\tilde{\sigma}^2|y_1, \dots, y_N \sim \text{gamma}(\frac{\nu_0 + N}{2}, \frac{\nu_0 + N}{2} \sigma_N^2),$$

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{\nu_0 + N} [\nu_0 \sigma_0^2 + \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 + \frac{\kappa_0 N}{\kappa_0 + N} (\bar{y} - \mu_0)^2].$$

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_i y_i.$$

情報の統合 略

事後予測分布 略