学習理論の練習　６

いつも何度でも復習

復習： カルバック･ライブラ情報量

定義. $\mathbf{R}^N$ 上の確率密度関数 q(x), p(x) >0 が与えられたとき

$D(q||p) = \int q(x) \log (q(x)/p(x))\, dx$ を q(x) と p(x) のカルバック･ライブラ情報量(KL情報量）という。

定理. 連続な確率密度 q(x), p(x) について、次が成り立つ。
(1) 任意の q(x), p(x)>0 について $D(q||p) \geqq 0$.
(2) $D(q||p)=0 \Leftrightarrow q(x)=p(x)\ (\forall x)$

$$D(q||p) = \int q(x) \log (q(x)/p(x))\, dx$$
$$= -\int q(x) \log p(x)\, dx - \{ -\int q(x) \log q(x)\, dx \}$$
$$= G(p) - S$$

KL情報量 ＝ 汎化損失 ― エントロピー―

復習： ベイズ推定

1. 未知の $q(x)$ からデータ X^n が発生

2. 解析者が $\varphi(w)$ と $p(x|w)$ をテキトーに（人間力で）準備

3. w の事後分布 $p(w|X^n) = (1/Z)\, \varphi(w) \prod_i p(X_i|w)$

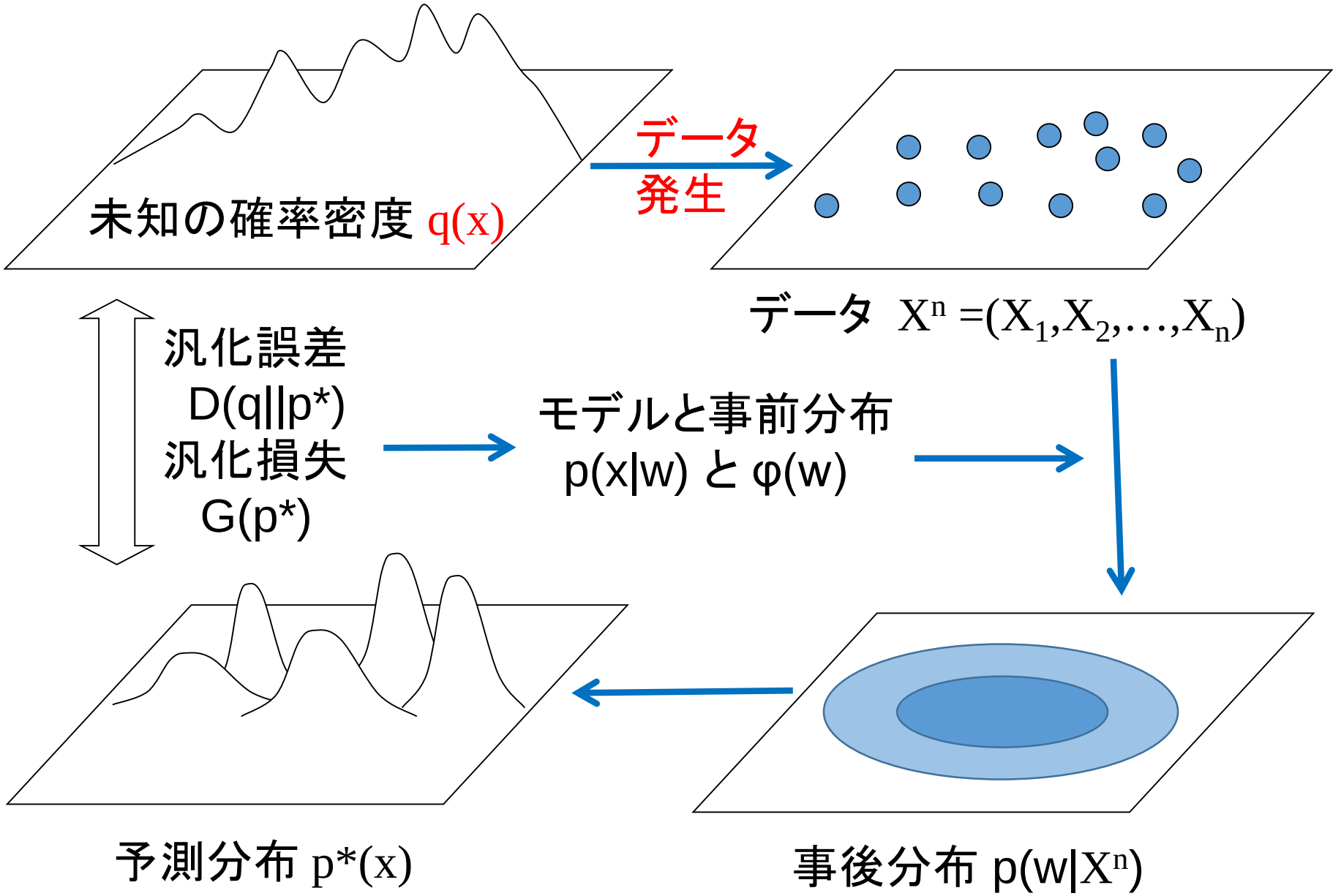
   ここで $Z = \int \varphi(w) \prod_i p(X_i|w)\, dw$

4. 予測分布 $p^*(x) = \int p(x|w)\, p(w|X^n)\, dw$

5. 汎化損失 $G(p^*) = -\int q(x) \log p^*(x)\, dx$

6. $G(p^*)$ が小さくなるように $\varphi(w)$ と $p(x|w)$ を改良

ベイズ推測の手順


未知の確率密度 q(x)
データ
発生
データ $X^n=(X_1,X_2,\ldots,X_n)$
汎化誤差
D(q||p*)
汎化損失
G(p*)
モデルと事前分布
p(x|w) と φ(w)
予測分布 p*(x)
事後分布 p(w|X^n)

汎化損失と学習損失

何が未知で　何が既知なのか

真の分布 q(x) はわからない。

予測分布 p*(x) がどのくらい正しいかはわからない。

汎化損失　$G(p^*) = -\int q(x) \log p^*(x)\, dx$

が小さいほど良い予測であるが、G(p*) は q(x) が

わからなければ計算できない。

モデルと事前分布は人間がテキトーに決めたものである。

もしも G(p*) が求められれば、モデルと事前分布を

G(p*) が小さくなるように改良できるが・・・。

いろいろな平均があるので表記に慣れよう

学習データ $X^n=(X_1,X_2,\ldots,X_n)$ についての平均

$$E[\, f(X_1,X_2,\ldots,X_n)\,] = \iint\cdots\int f(x_1,x_2,\ldots,x_n)\,q(x_1)q(x_2)\cdots q(x_n)\,dx_1\,dx_2\cdots dx_n$$

テストデータ X についての平均　$E_x[\, f(X)\,] = \int f(x)\,q(x)\,dx$

事後分布による平均

$$E_w[\, f(w)\,] = \frac{\int f(w)\prod_{i=1}^{n} p(X_i|w)\,\varphi(w)\,dw}{\int \prod_{i=1}^{n} p(X_i|w)\,\varphi(w)\,dw}$$

損失と平均

予測分布　$p^*(x) = E_w[\, p(x|w)\,] = p(x|X^n)$

汎化損失　$G_n = -E_x[\, \log\ p(X|X^n)\ ]$

学習損失　$T_n = -(1/n) \sum_{i=1}^{n} \log p(X_i|X^n)$

（注意）
一般に関数 f(x) について $E[\, (1/n)\Sigma_{i=1}^{n} f(X_i)\,] = E_x[f(X)]$ が成り立つ。しかし学習損失は条件部分と推測部分の両方に学習データがあるので $E[T_n] \neq E[G_n]$ である。学習損失で汎化損失を推測することはできない。

交差検証

ひとつぬき交差損失(LOOCV)

ひとつぬき交差損失の定義

集合の引き算

$$LOOCV = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \log p(X_i \mid X^n - X_i)$$

定理. X^n が独立なら $E[LOOCV] = E[G_{n-1}]$（平均の存在は仮定）

（証明）

$$E[LOOCV] = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} E[\log p(X_i \mid X^n - X_i)]$$

$$= E[\log p(X_n \mid X^n - X_n)] = E[\log p(X_n \mid X^{n-1})]$$

$$= E\, E_x[\log p(X \mid X^{n-1})] = E[G_{n-1}]$$

交差損失の計算法

LOOCV を計算するには事後分布を n 回作らなくてはならないので計算量が多大になります。ベイズ法では次の式を用いると1個の事後分布で計算できます。

$$C_n = (1/n) \sum_{i=1}^{n} \log E_w[1/p(X_i|w)]$$

定理. LOOCV = C_n

（証明）

$$p(X_k \mid X^n - X_k) = \frac{\int p(X_k|w) \prod_{i=1}^{k\text{ 以外}} p(X_i|w)\, \varphi(w)\, dw}{\int \prod_{i=1}^{k\text{ 以外}} p(X_i|w)\, \varphi(w)\, dw}$$

$$= \frac{\int \prod_{i=1}^{n} p(X_i|w)\, \varphi(w)\, dw}{\int 1/p(X_k|w) \prod_{i=1}^{n} p(X_i|w)\, \varphi(w)\, dw} = \frac{1}{E_w[1/p(X_k|w)]}$$

学習損失は交差損失より小さい

定理.　$T_n \leqq C_n$. 等号成立は $p(x|w)$ が w の定数関数

（証明）　学習損失　$T_n = -(1/n) \sum_{i=1}^{n} \log E_w[\, p(X_i|w) \,]$

交差損失　$C_n = (1/n) \sum_{i=1}^{n} \log E_w[\, 1/p(X_i|w) \,]$

$$C_n - T_n = (1/n) \sum_{i=1}^{n} \log \{ E_w[1/p(X_i|w)]\, E_w[\, p(X_i|w) \,] \}$$

コーシーシュワルツの不等式を使う。$f(w)>0$ なら

$$1=E_w[\, (1/f(w))\, f(w) \,] \leqq E_w[1/f(w)^2\,]^{1/2}\, E_w[\, f(w)^2 \,]^{1/2}$$

「等号成立⇔$f(w)$=定数」より定理が得られる。

実験例

$N(0,1/s)$ を平均 0, 分散 1/s の正規分布を表すものとする。

$f_m(x,a)$: (m-1)次多項式 a:パラメータ（m個）

回帰モデル $Y= f_m(x,a) + N(0,1/s)$ を表す確率密度関数は

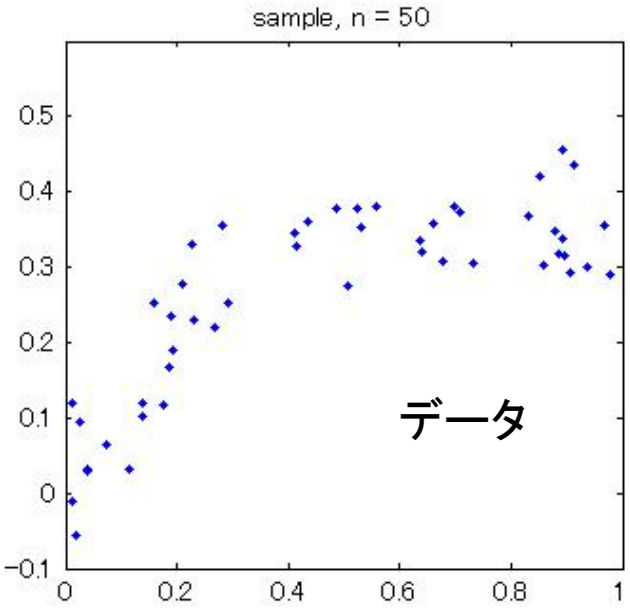
$$p(y|x,a,s) = (s / 2\pi)^{1/2} \exp(-s(y - f_m(x,a))^2/2).$$

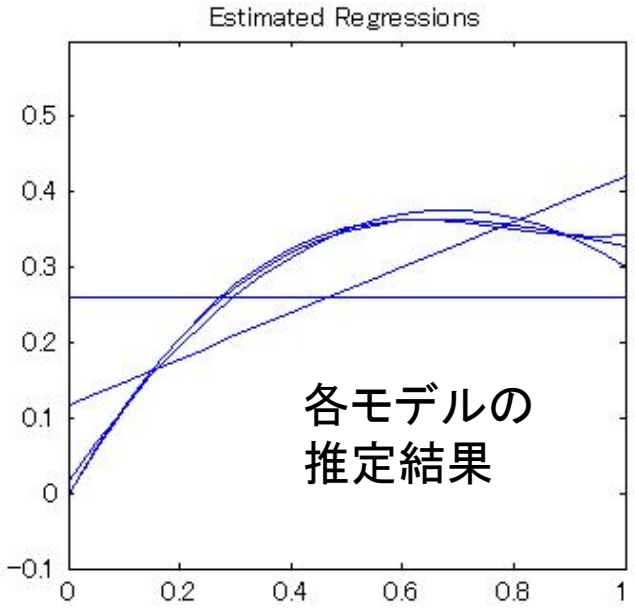
事前分布として次のものを用いる。

$$\varphi(a,s) \propto \exp(- \tau s(r+||a||^2)/2)$$

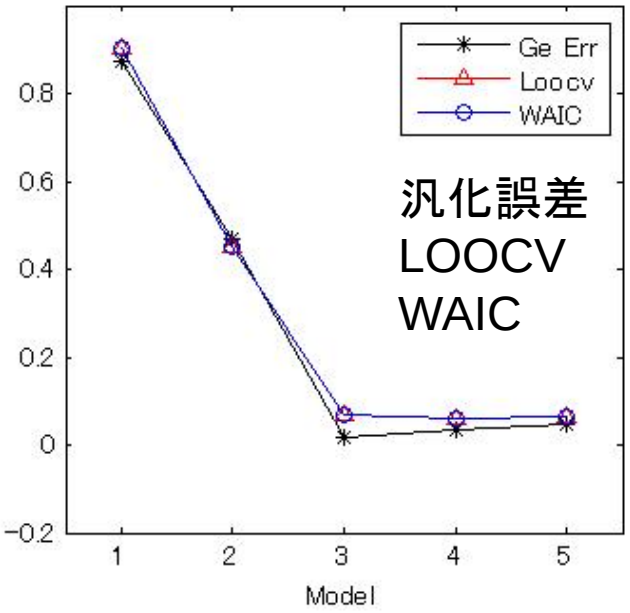
ただし τ は十分に小さく設定した。

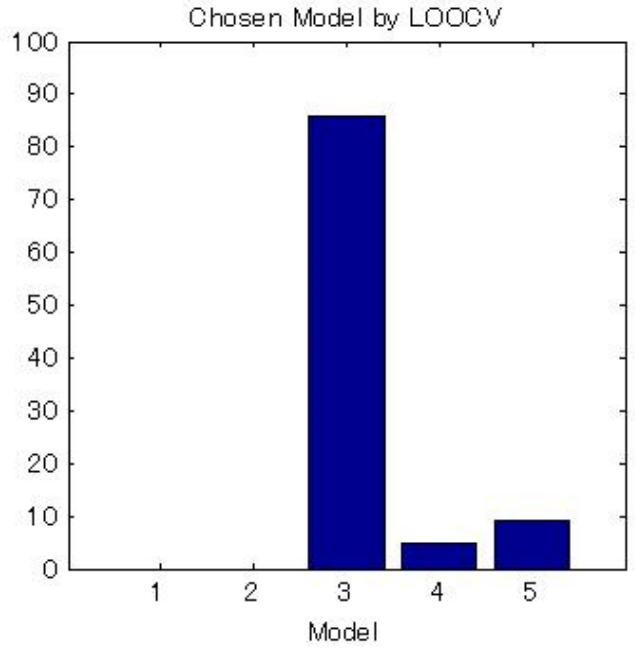
実験の結果





LOOCVで選ばれたモデル





ここまでの物語

◎ 人間は真 q(x) を知ることはできない。

◎ データ X^n は得られる。

◎ とりあえず φ(w) と p(x|w) をテキトーに決めて予測 $p(x|X^n)$ は作れる。

◎ 汎化損失 G_n が小さくなるように φ(w) と p(x|w) を改良したい。

◎ 人間は汎化損失 G_n を求めることはできない。

◎ 学習損失 T_n を求めることはできるが、それで G_n は推測できない。

◎ ところが、ひとつぬき交差損失 C_n を求めることはできる。

◎ C_n と G_{n-1} は平均値が等しい　←いまここ

だんだん厳しく難しくなる

◎ C_n を小さくすると G_n も小さくなるのか？

◎ C_n よりも精度よく G_n を推定する方法はないのか？

◎ そもそも G_n を理論で計算できればいいのに。それは無理？