

ベイズ定理の一般化

多段階逆推定とパス解釈

日大生産工 篠原正明
情報システム研究所 篠原健

1. はじめに

ベイズ定理(あるいはベイズ規則)の一般化については、「原因事象から結果事象が発生するという順方向での確率フロー値(実現頻度)と、結果からその原因を逆推定するという逆方向での頻度が等しくなるべきである」という思想に基づく提案〔1,2〕がある。本文ではさらに、この提案に基づく特殊化提案「多段階逆推定法」と別の思想である「パス」に基づく一般化提案「パス解釈」を与える。

2. 多段階逆推定法

2.1 順方向多段階因果推移としてのマルコフ連鎖

状態数 = n 、状態 i から状態 j への時点 t での推移確率(遷移確率とも呼ぶ)を $P_{ij}(t)$ とするならば、時点 t 、 $t+1$ の状態確率列ベクトル $x(t)$ 、 $x(t+1)$ は、次式により関係づけられる。

$$x(t+1) = P^T(t)x(t) \quad (1)$$

但し、 $P(t) = \{P_{ij}(t)\}$ は時点 t での推移確率行列である。時点 t から時点 $t+1$ への推移は、時点 t での各状態を原因として、時点 $t+1$ での各状態を結果とした、因果関係に基づく推移とみなすことができる。ならば、 $t = 0, 1, 2, 3, \dots$ という継続的時間推移は、因果推移の連鎖とみなすことができる。この順方向多段階の因果推移に、段階的な逆推移を適用する。

2.2 多段階逆推定問題の記述

以下に多段階逆推定問題を記述する。最終時点 T とする。すなわち、 $t = 0, 1, 2, \dots, T$ 。初期原因分布 $x(0)$ ならびに推移確率行列 $P(t)$ ($t = 0, 1, 2, \dots, T-1$) が与えられたもとで、時点 t_2 における状態 j が結果として生じた時にそれが時点 t_1 における状態 i が原因である確率(逆推定確率) $P_{\text{rob}}(i \text{ at } t_1 | j \text{ at } t_2)$ を求めよ。但し、 $0 \leq t_1 < t_2 \leq T$ である。

2.3 逆推定アルゴリズム

以下のステップで逆推定を行う。

ステップ 1 : 以下の漸化式により、 $x(1), x(2), \dots, x(T)$ を計算する。

$$x(t+1) = P^T(t)x(t) \quad (t = 0, 1, 2, \dots, T-1) \quad (2)$$

ステップ 2 : フロー平衡式

「 $Q_{ji}(t)x_j(t+1) = P_{ij}(t)x_i(t)$ 」により、

$Q_{ji}(t)$ を計算する。但し、 $Q_{ji}(t)$ は行列 $Q(t)$ の

(j, i) 要素であり、以下の漸化式を満たす。

$$x(t) = Q^T(t)x(t+1) \quad (t = T-1, T-2, \dots, 2, 1, 0) \quad (3)$$

すなわち、 $Q(t)$ が時点 $t+1$ の結果状態から時点 t の原因状態の逆推定確率行列を表わす。

従って、 $P_{rob}(i \text{ at } t_1 | j \text{ at } t_2)$ を求めるために

は、時点 t_2 から時点 t_1 までさかのぼって逆推定確率行列を連続(cascade)乗算した(4)式 Q の (j, i) 要素で与えられる。

$$Q = Q(t_2) \cdot Q(t_2 - 1) \cdot \dots \cdot Q(t_1 - 1) \quad (4)$$

2.4 例題

〔例題 1〕

$N(0) = N(1) = N(2) = n = 2, T = 2$ の場合

$$x(0) = (0.5, 0.5)^T, P(0) = \begin{pmatrix} 0.2 & 0.8 \\ 0.4 & 0.6 \end{pmatrix},$$

$$P(1) = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.6 \\ 0.3 & 0.7 \end{pmatrix} \text{ とすると、} x(1) = (0.3, 0.7)^T$$

$x(2) = (0.33, 0.67)$ の計算値を得る。フロー平衡式を適用して、逆推定確率行列は

$$Q(1) = \begin{pmatrix} \frac{12}{67} & \frac{21}{67} \\ \frac{33}{18} & \frac{33}{49} \end{pmatrix}, Q(0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{2}{3} \\ \frac{3}{7} & \frac{3}{7} \end{pmatrix} \text{ を得る。}$$

従って、時点 $t = 2$ での事象 1 が結果として生じた時に、それが時点 $t = 0$ での事象 2 が原因である確率 $P_{rob}(2 \text{ at } 0 | 1 \text{ at } 2)$ は、(5)式 Q の

$$(1, 2) \text{ 要素 } Q_{12} = \frac{17}{33} \text{ である。}$$

$$Q = Q(1) \cdot Q(0) = \begin{pmatrix} \frac{16}{67} & \frac{17}{67} \\ \frac{33}{34} & \frac{33}{67} \end{pmatrix} \quad (5)$$

〔例題 2〕

$N(0) = N(2) = 2, N(1) = N(3) = 3, T = 3$

の場合

$$x(0) = (0.2, 0.8)^T, P(0) = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.3 & 0.2 \\ 0.1 & 0.1 & 0.8 \end{pmatrix},$$

$$P(1) = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.6 \\ 0.2 & 0.8 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}, P(2) = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0.25 & 0.75 \end{pmatrix}$$

とすると、順方向漸化式を適用し、

$$x(1) = (0.18, 0.14, 0.68)^T, x(2) = (0.44, 0.56)^T,$$

$x(3) = (0.22, 0.36, 0.42)^T$ の計算値を得る。

フロー平衡式を適用することにより、逆推定確率行列は、

$$Q(2) = \begin{pmatrix} \frac{1.0}{18} & \frac{0}{18} \\ \frac{11}{18} & \frac{7}{18} \\ 0 & 1.0 \end{pmatrix}, Q(1) = \begin{pmatrix} \frac{72}{560} & \frac{28}{560} & \frac{34}{56} \\ \frac{440}{108} & \frac{440}{112} & \frac{44}{34} \\ \frac{44}{560} & \frac{44}{560} & \frac{44}{56} \end{pmatrix},$$

$$Q(0) = \begin{pmatrix} \frac{5}{9} & \frac{4}{9} \\ \frac{3}{7} & \frac{4}{7} \\ \frac{1}{17} & \frac{16}{17} \end{pmatrix} \text{ を得る。}$$

従って、 $P_{rob}(2 \text{ at } 0 | 1 \text{ at } 3)$ は、(6)式 Q の(1,2)

要素 $Q_{12} = \frac{46}{55}$ である。

$$Q = Q(2) \cdot Q(1) \cdot Q(0)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{18} & \frac{0}{18} \\ \frac{11}{18} & \frac{7}{18} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{9}{55} & \frac{46}{55} \\ \frac{8}{35} & \frac{27}{35} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{9}{17} & \frac{46}{73} \\ \frac{55}{17} & \frac{55}{73} \\ \frac{90}{8} & \frac{90}{27} \\ \frac{8}{35} & \frac{27}{35} \end{pmatrix} \quad (6)$$

3. パスに基づく解釈

3.1 パスとパス遷移確率

マルコフ連鎖の状態遷移図を考えよう。状態 i から状態 j への有向枝に付与された値 P_{ij} はマルコフ性を前提にした時の、状態 i に存在する条件下で次に遷移する先が状態 j である条件付確率である。このような状態遷移図において、状態の連鎖 (chain)、例えば、 $(i_1, i_2, i_3, \dots, i_N)$ を状態 i_1 を始点とし状態 i_N を終点とするパスと呼ぶ。このパス $h = (i_1, i_2, \dots, i_N)$ の遷移確率 $P(h)$ を次式で定義する。

$$P(h) = P_{i_1 i_2} \cdot P_{i_2 i_3} \cdot \dots \cdot P_{i_{N-1} i_N} \quad (7)$$

3.2 基本的なベイズ定理

事象 A_1, A_2, \dots, A_m の原因で B_1, B_2, \dots, B_n という結果が得られた時に、ある結果事象 B_j が起こった原因が原因事象 A_i である確率 $P(A_i | B_j)$ を求めるのに用いられ、以下の推定式が成立する。

$$P(A_i | B_j) = \frac{P(A_i)P(B_j | A_i)}{P(B_j)} \quad (8)$$

$$P(B_j) = \sum_i P(A_i)P(B_j | A_i) \quad (9)$$

3.3 基本ベイズ定理のパス解釈

(結果)事象 B_j が発生したもとで、(原因)事象 A_i がその原因である逆推定確率 $P(A_i | B_j)$ は、パス解釈に基づくと次式で与えられる。

$$P(A_i | B_j) = P_{ji} = \frac{P(h_1)}{\sum P(h_2)} \quad (10)$$

但し、分子において $h_1 = (S, A_i, B_j)$ 、分母の

は開始事象(全事象) S から結果事象 B_j に至

るすべてのパス集合(すなわち、 $(S, A_1, B_j),$

$(S, A_2, B_j), (S, A_3, B_j), \dots, (S, A_i, B_j), \dots,$

(S, A_c, B_j)) についての総和である。

図 1 に基本的なベイズ定理に対応する状態遷移図を示すが、 S が開始事象、 $A_1, A_2, \dots, A_i, \dots, A_c$ が原因事象群、 $B_1, B_2, \dots, B_j, \dots, B_R$ が結果事象群である。

(10)式の分母は、図中で S から B_j に至る全ての

(太と細)実線のパス遷移確率の総和で、分子は、 S から A_i を経由して B_j に至るパス

(S, A_i, B_j) の遷移確率である。

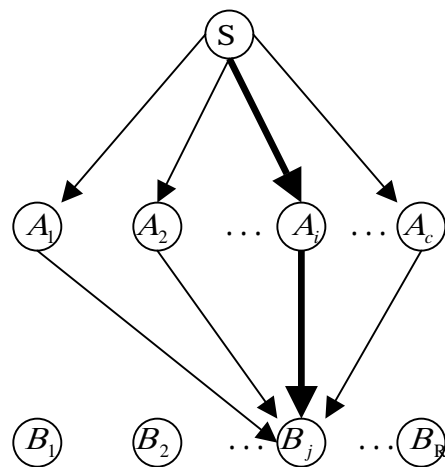


図 1 1 段因果関係の状態遷移図

3.4 パス解釈に基づく一般化

パス解釈に従えば、ベイズ定理は、「考慮する確率遷移全体(それに対応するパス集合を P_2)の中で、注目する確率遷移全体(それに対応するパス集合を P_1)の占める割合 P 」と一般化できる。

$$P = \frac{\sum_{h_1 \in P_1} P(h_1)}{\sum_{h_2 \in P_2} P(h_2)} \quad (11)$$

4 . 考察

- 4.1 多段階逆推定において、 $T = 2$ が基本的なベイズ定理の枠組である。
- 4.2 多段階逆推定において、各時点での状態数は等しく n としたが、異なる場合は無遷移枝を考慮することにより、最大値 = 状態数 n とすることにより帰着する。
- 4.3 多段階逆推定において、各時点での状態数 = n の場合は、時変マルコフ連鎖の逆遷移確率推定の問題となる。すなわち、(3)式の $x(t) = Q^T x(t+1)$ を満たす 1 つの解がベイズ解であり、逆方向遷移は無数存在する。
- 4.4 パス解釈において、対象とする因果関係は、図 1 の 1 段ネットワークに限定されない。
- 4.5 パス解釈において、状態遷移はマルコフ性を前提とする必要はない。パス遷移確率 $P(h)$ が与えられれば、(11)式に基づき、注目するパス(集合)の相対頻度 P が計算できる。

5 . おわりに

「何が原因で何が結果か？」には常に多くの議論が存在するが、この世の全ての出来事は、何らかの原因の何らかの結果として発生する。我々が観測するのは、その様な因果関係の実現した標本の集合である。この状況は、我々、情報処理技術者が、多量のデータや情報に囲まれている状況と一致する。この様な状況において、発生した結果の原因をつきとめるための数理的手段が「ベイズ定理」であり、本論文ではその理論面での拡張と一般化を試みた。

ベイズ定理の IT 技術での適用分野は莫大であり、数理情報工学科においても迷惑メール(spam)検出〔3〕、検索エンジン、ウィルス検出、行動予測ソフト〔4〕、等が研究されている。理論面での拡張と一般化に立脚した応用分野での技術革新が今後の課題である。

参考文献

- 〔1〕 篠原正明：ベイズの定理とマルコフ連鎖と枝確率フロー平衡、第 36 回日本大学生産工学会講演会数理情報部会論文集、7 - 17、pp.41 - 44(2003.12).
- 〔2〕 篠原正明、篠原健：マルコフ連鎖上の Bayes 定理の拡張と一般化、第 37 回日本大学生産工学会講演会数理情報部会論文集、7 - 13、pp.35 - 36 (2004.12).
- 〔3〕 山口達也：ベイズの定理を用いた spam 判定、日本大学生産工数理情報工学科平成 16 年度卒業研究論文 (2005.3).
- 〔4〕 河上翔太：TPO を加味した行動支援検索サービス、平成 16 年度日本大学生産工数理情報工学科生産実習報告書(2004.9).