

第7回 母数の推定 最尤解 多変数

一般に、ある関数 $r(\xi)$ の極値（極小値または極大値のことであるが、本節では極小値とする）を与えるパラメタ ξ の値を数値的に求めることを関数の最適化と呼ぶが、その方法は、何らかの方法で求めた ξ の初期値から、 $r(\xi)$ が減少する方向 d へある分量 α だけ修正する、

$$\xi_{(\ell+1)} = \xi_{(\ell)} + \alpha d_{(\ell)} \quad (54)$$

$$d_{(\ell)} = -g(\xi_{(\ell)}) = - \left. \frac{\partial r(\xi)}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_{(\ell)}}$$

$$r(\xi_{(\ell+1)}) \leq r(\xi_{(\ell)})$$

Newton-Raphson

$r(\boldsymbol{\xi})$ を $\boldsymbol{\xi}_{(l)}$ のまわりで2次の項まで Taylor 展開すると

$$r(\boldsymbol{\xi}) \approx r(\boldsymbol{\xi}_{(l)}) + \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})'(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)})' \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)})$$

$$\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}_{(l)}) = \left[\frac{\partial^2 r(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi} \partial \boldsymbol{\xi}'} \Big|_{\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{\xi}_{(l)}} \right]$$

3

$$r(\boldsymbol{\xi}) \approx r(\boldsymbol{\xi}_{(l)}) + \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})'(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)})' \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)})$$

したがって、極値の条件は

$$\frac{\partial r(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \approx \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}_{(l)}) + \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_{(l)}) = 0$$

となり、これより

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}_{(l)} - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})^{-1} \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})$$

となる。したがって、Eq.(54)において

$$\mathbf{d}_{(l)} = -\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})^{-1} \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}_{(l)})$$

4

- 微分の話

5

ロジスティック回帰

$$\Pr(Y_i = 1|x_i) = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha x_i + \beta))} = P(x_i|\alpha, \beta) = \pi_i(\boldsymbol{\xi}) \quad (66)$$

モデルのパラメタは $\boldsymbol{\xi} = \{\alpha, \beta\}$
 (f_i, r_i) を試行数と度数として、

$$\mathcal{E}(R_i|x_i) = f_i \times P(x_i|\alpha, \beta) = f_i \pi_i(\boldsymbol{\xi}) \quad (67)$$

$$\text{var}(R_i|x_i) = f_i \pi_i(\boldsymbol{\xi})(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi})) \quad (68)$$

である。

6

尤度関数

$$L(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{i=1}^n \pi_i(\boldsymbol{\xi})^{y_i} (1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi}))^{1-y_i} \quad (69)$$

$$L(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{i=1}^n \pi_i(\boldsymbol{\xi})^{r_i} (1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi}))^{f_i-r_i} \quad (70)$$

対数尤度関数

$$\ln L(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^n y_i \log \pi_i(\boldsymbol{\xi}) + (1 - y_i) \log(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi})) \quad (71)$$

$$\ln L(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^n r_i \log \pi_i(\boldsymbol{\xi}) + (f_i - r_i) \log(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi})) \quad (72)$$

これを最大にするように x_i を求める。

7

一次微分は

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^n (r_i - f_i \pi_i(\boldsymbol{\xi})) x_i$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^n (r_i - f_i \pi_i(\boldsymbol{\xi}))$$

8

導出

$$\begin{aligned}\frac{\partial \ln L(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} &= \sum_{i=1}^n \left(r_i \frac{1}{\pi_i(\boldsymbol{\xi})} \frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} - (f_i - r_i) \frac{1}{1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi})} \frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{r_i(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi})) - (f_i - r_i)\pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\pi_i(\boldsymbol{\xi})(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi}))} \frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right) \quad (75)\end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^n \left(\frac{r_i - f_i \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\pi_i(\boldsymbol{\xi})(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi}))} \frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right) \quad (76)$$

9

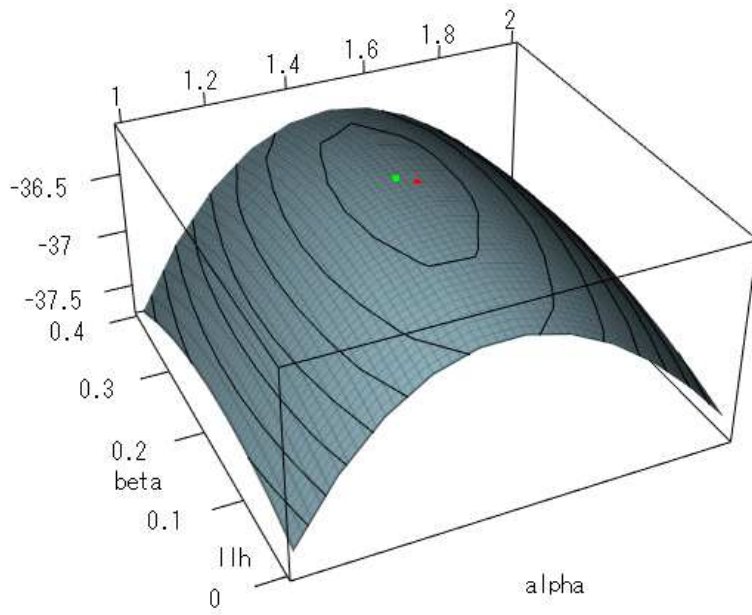
$$\begin{aligned}\frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial A} &= \frac{-1}{(1 + \exp(-(\alpha x_i + \beta)))^2} \times \exp(1 + \exp(-(\alpha x_i + \beta))) \\ &\quad \times \frac{\partial -(\alpha x_i + \beta)}{\partial A} \quad (77)\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial \alpha} = \pi_i(\boldsymbol{\xi})(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi}))x_i \quad (78)$$

$$\frac{\partial \pi_i(\boldsymbol{\xi})}{\partial \beta} = \pi_i(\boldsymbol{\xi})(1 - \pi_i(\boldsymbol{\xi})) \quad (79)$$

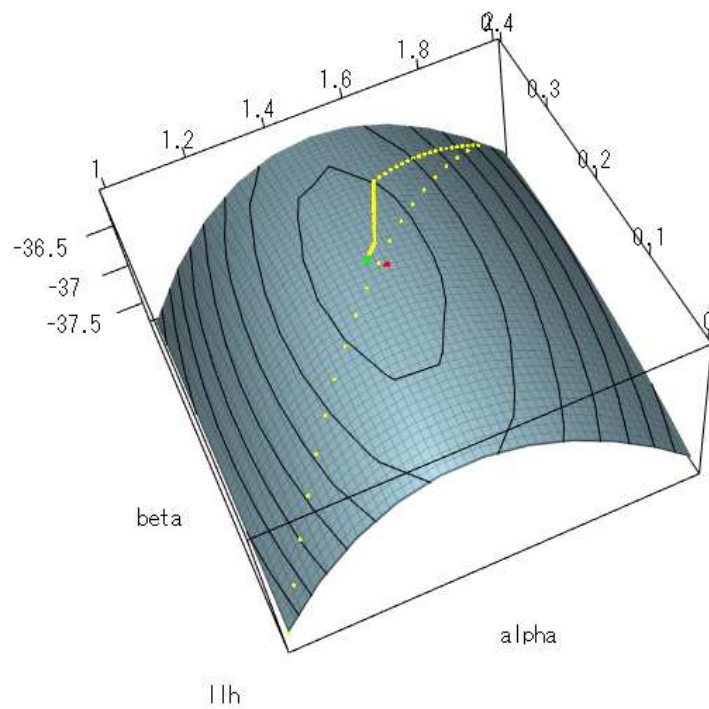
10

尤度関数



11

nlm の経路



12

