確率数理工学7

③ 変数変換

$x \sim f(x)$ (p.d.f.) $(x \in \mathbb{R})$

$$\begin{cases} y = \varphi(x) & (y \in \mathbb{R}) \\ x = \psi(y) & (\psi = \varphi^{-1}) \end{cases}$$

xとyは一対一．

のとき．yの従う分布のp.d.f.は？

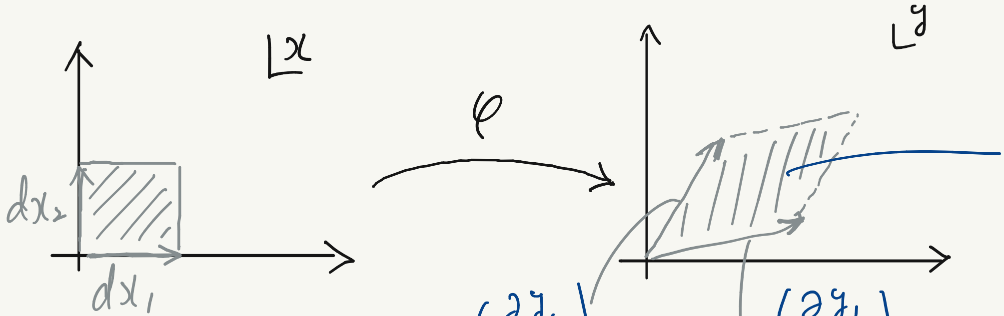
A: $\underbrace{g(y)}_{y\text{ の p.d.f.}} = \underbrace{f(\psi(y))}_{x\text{ の p.d.f.}} \underbrace{|\psi'(y)|}_{\text{変数変換によるスケールの調整}}$

考え方：

$$f(x)\,dx = f(x)\left|\frac{dx}{dy}\right|dy$$

$$= f(x)\,|\psi'(y)|\,dy$$

$$= f(\psi(y))\,|\psi'(y)|\,dy$$



$$\begin{vmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{vmatrix} dx_1 dx_2$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} dx_2 \qquad \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} \end{pmatrix} dx_1$$

$$\underbrace{\begin{vmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{vmatrix}}_{= \left|\frac{\partial y}{\partial x}\right|}$$

確率

$$f(x)\,dx_1 dx_2 = g(y)\left|\frac{\partial y}{\partial x}\right| dx_1 dx_2$$

$$\Longrightarrow\ g(y) = \frac{1}{\left|\frac{\partial y}{\partial x}\right|} f(x) = \left|\frac{\partial x}{\partial y}\right| f(x)$$ ← チェックせよ．

$x, y \sim h(x,y)$ （同時分布の p.d.f.）

$$\begin{cases} u = \varphi_1(x,y) \\ v = \varphi_2(x,y) \end{cases}, \quad \begin{cases} x = \psi_1(u,v) \\ y = \psi_2(u,v) \end{cases}$$ と書けるとき

（φ, ψ は1対1対応かつ微分可能）

$$\Longrightarrow \underset{\substack{\uparrow \\ (u,v)\text{の p.d.f.}}}{p(u,v)} = h(\psi_1(u,v), \psi_2(u,v)) \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)} \right|$$

Jacobian

ただし、$\left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)} \right| = \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial u} & \frac{\partial \psi_1}{\partial v} \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial u} & \frac{\partial \psi_2}{\partial v} \end{pmatrix} \right|$

Ex. $\begin{cases} X \sim N(0,1) \\ Y \sim G\left(\frac{1}{2}, \frac{n}{2}\right) \text{ --- 自由度 } n \text{ の } \chi^2 \text{ 分布} \end{cases}$ 　2つ独立とする

$\longrightarrow \dfrac{X}{\sqrt{Y/n}}$ の分布は？　（検定統計量としてよく現れる）

例：$X_1, \dots, X_n$ の平均は μ か？（$X_i \sim$ 正規分布）

$$\frac{\dfrac{X_1 + \cdots + X_n}{n} - \mu}{\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \hat{\mu})^2}} \quad \begin{array}{l} \leftarrow N(0,1)\cdot\sigma \\ \leftarrow G\left(\frac{1}{2}, \frac{n-1}{2}\right)\cdot\sigma^2 \text{ in 帰無仮説} \end{array}$$

$$\begin{cases} u = \dfrac{x}{\sqrt{y/n}} \\ v = y \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} x = u\sqrt{\frac{v}{n}} = \psi_1(u,v) \\ y = v = \psi_2(u,v) \end{cases}$$

$$h(x,y) = f(x)g(y) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{定数}}}{C} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \cdot y^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{y}{2}\right)$$

$$\left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)} \right| = \left| \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{v}{n}} & 0 \\ \frac{u}{2\sqrt{vn}} & 1 \end{pmatrix} \right| = \sqrt{\frac{v}{n}} \text{ より}$$

$$\begin{aligned} p(u,v) &= h(\psi_1(u,v), \psi_2(u,v)) \sqrt{\frac{v}{n}} \\ &\cong \exp\left(-\frac{1}{2} u^2 \frac{v}{n}\right) v^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{v}{2}\right) \cdot v^{\frac{1}{2}} \\ &= v^{\frac{n+1}{2}-1} \exp\left(-\frac{v}{2}\left(1 + \frac{u^2}{n}\right)\right) \end{aligned}$$

あとは $p(u) = \int_0^\infty p(u,v)\, dv$ を計算すれば良い。　（$v = y \geq 0$ (a.s.) に注意）

$$p(u) = \int_0^\infty p(u,v)\,dv$$

$$\simeq \left(1+\frac{u^2}{n}\right)^{-\frac{n+1}{2}} \quad (\because ガンマ分布の積分)$$

$\int_{-\infty}^{\infty} p(u)\,du = 1$ より

$$p(u) = \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{\sqrt{n\pi}\,\Gamma(\frac{n}{2})}\left(1+\frac{u^2}{n}\right)^{-\frac{n+1}{2}}$$: 自由度 n の t-分布

Ex. $\begin{cases} X \sim N(0,1) \\ Y \sim N(0,1) \end{cases}$

$v = \frac{X}{Y}$ の分布は? $\longrightarrow$ $p(u) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{1+u^2}$: Cauchy分布

(上の例の $n=1$ に対応)

- 畳み込み分布

絶対連続な場合

$$\left.\begin{array}{l} X_1 \sim f_1(x_1) \\ X_2 \sim f_2(x_2) \end{array}\right\} \text{互いに独立}$$

$Z = X_1 + X_2$ の分布は? 特にその p.d.f. は?

$$\begin{cases} z = x_1 + x_2 \\ \omega = x_2 \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} x_1 = z - \omega \\ x_2 = \omega \end{cases}$$

$$\rightarrow \left|\frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(u, v)}\right| = \left|\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\right| = 1 \quad \text{より}$$

$$p(z,\omega) = f_1(x_1) f_2(x_2)\cdot 1 = f_1(z-\omega) f_2(\omega)$$

$$p(z) = \int_{-\infty}^{\infty} p(z,\omega)\,d\omega = \underline{\int_{-\infty}^{\infty} f_1(z-\omega) f_2(\omega)\,d\omega}$$

畳み込み

Def (畳み込み分布)

密度 f_1 と f_2 の畳み込み分布 (convolution) は密度関数

$$(f_1 * f_2)(z) \overset{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(z-\omega) f_2(\omega)\,d\omega$$

で与えられる。 //

離散の場合

$$p(z) = \sum_{k} f_1(z-k) f_2(k) = (f_1 * f_2)(z)$$

$\uparrow$
z の p.m.f.

一般の場合

分布関数：

$$F(z) = F_1 * F_2(z) = \int F_1(z-w) F_2(dw)$$

(証明) 特性関数 $\phi(t) = \int e^{itz} F(dz)$

$$= \iint e^{itz} dF_1(z-w) dF_2(dw)$$

$$= \int e^{itw} \underbrace{\int e^{it(z-w)} dF_1(z-w)}_{=\phi_1(t)} dF_2(dw) \quad \text{(Fubini)}$$

$$= \phi_1(t) \int e^{itw} dF_2(w)$$

$$= \phi_1(t)\phi_2(t)$$

あとは特性関数と分布の一対一対応から従う. //

同様にして $Z = X_1 + \cdots + X_n$ の分布関数は

$$F = F_1 * \cdots * F_n$$

として与えられる.

Ex. 二項分布の再生性

$$\begin{cases} X \sim B(n, \theta) \\ Y \sim B(m, \theta) \end{cases} \text{独立} \Longrightarrow Z = X + Y \sim B(n+m, \theta)$$

Ex. Poisson 分布

$$\begin{cases} X \sim Po(\lambda_1) \\ Y \sim Po(\lambda_2) \end{cases} \text{独立} \Longrightarrow Z = X + Y \sim Po(\lambda_1 + \lambda_2)$$

Ex. 正規分布

$$\begin{cases} X \sim N(\mu_1, \sigma_1^2) \\ Y \sim N(\mu_2, \sigma_2^2) \end{cases} \text{独立} \Longrightarrow Z = X + Y \sim N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$

Ex. ガンマ分布

$$\begin{cases} X \sim G(\lambda, k_1) \\ Y \sim G(\lambda, k_2) \end{cases} \text{独立} \Longrightarrow Z = X + Y \sim G(\lambda, k_1 + k_2)$$

確率評価に関する不等式

標本平均の期待値からのずれや、確率変数の大きさ・収束を論じるための不等式を紹介

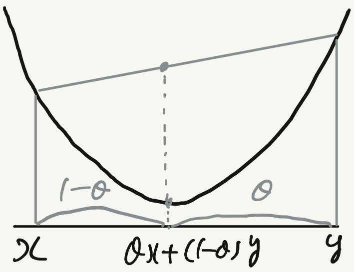
• 期待値に関する不等式

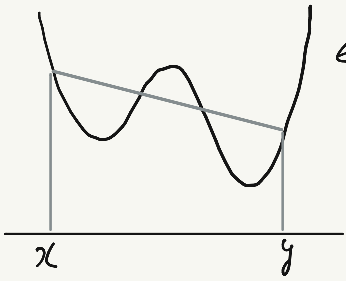
Def (凸関数)

$f:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ が凸関数

$\overset{def}{\iff}$ $\forall x, y\in\mathbb{R}^d$, $0\le \forall\theta\le 1$ に対し、

$$f(\theta x+(1-\theta)y)\le \theta f(x)+(1-\theta)f(y)$$





← 非凸

Ex. $\exp(x)$, $-\log(x)$, $(x-a)^2$, $|x-a|$, $\log(1+\exp(-x))$: 凸関数

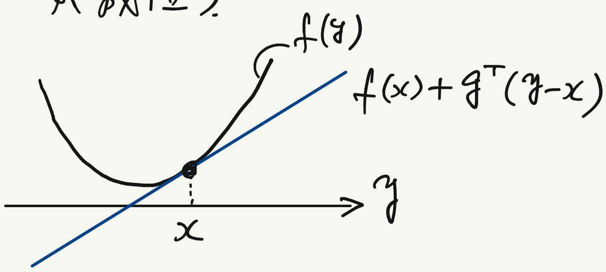
$\sqrt{x}$, $\log(x)$: 非凸関数

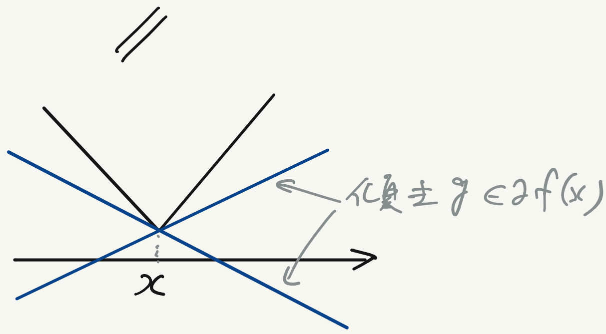
Prop f: 凸関数 ($f:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$)

$\forall x\in\mathbb{R}^d$ において、ある $g\in\mathbb{R}^d$ が存在して、

$$f(y)\ge f(x)+g^T(y-x) \quad (\forall y\in\mathbb{R}^d)$$

が成り立つ





$$\partial f(x)=\{g\in\mathbb{R}^d \mid \forall y,\ f(y)\ge f(x)+g^T(y-x)\}$$

$\Longrightarrow$ 劣微分 と言う ← ※ $\forall x\in\mathbb{R}^d$ で $\partial f(x)\neq\phi$ (演習問題)

$\partial f(x)$ の元を劣勾配と言う

f が微分可能なら

$g=\nabla f(x)$ が $\partial f(x)$ の唯一の元.

Thm (Jensenの不等式) ㊙ 重要

$f:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ を凸関数とする.

X: $\mathbb{R}^d$値-r.v., 可積分, $f(X)$も可積分 なら.

$$f(E[X]) \leqq E[f(X)]$$

//

(証明) $g\in\partial f(E[X])$ とする.

すると, $\forall y\in\mathbb{R}^d$ に対し,

$$f(y)\geqq f(E[X])+g^T(y-E[X])$$

である. y について期待値を取れば,

期待値の単調性より

$$E[f(X)]\geqq f(E[X])+g^T\underbrace{(E[X]-E[X])}_{0}=f(E[X])$$

//

Cor (Youngの不等式)

$r\geqq 1,\ s\geqq 1$ が

$$\frac{1}{r}+\frac{1}{s}=1$$

をみたすなら,

$$|ab|\leqq \frac{1}{r}|a|^r+\frac{1}{s}|b|^s$$

← 関数解析でもよく出てきます.
e.g. Sobolev空間
Besov空間

Proof

$$\begin{aligned}-\log(|ab|)&=-\log\left(|a|^{\frac{r}{r}}|b|^{\frac{s}{s}}\right)\\&=-\frac{1}{r}\log(|a|^r)-\frac{1}{s}\log(|b|^s)\\&\geqq-\log\left(\frac{1}{r}|a|^r+\frac{1}{s}|b|^s\right)\quad(\because -\log は凸)\end{aligned}$$

//

$r=s=2$のとき, 相加相乗平均の不等式になる.

$$|ab|\leqq\frac{1}{2}(|a|^2+|b|^2)$$

Thm

(1) Hölder の不等式

X, Y : r.v. $r \geqq 1, s \geqq 1, \frac{1}{r}+\frac{1}{s}=1$ とする.

$$E[|XY|] \leqq E[|X|^r]^{\frac{1}{r}} E[|Y|^s]^{\frac{1}{s}}$$

$$(= \|X\|_r \cdot \|Y\|_s)$$

(2) Minkowski の不等式

$r \geqq 1$ のとき.

$$E[|X+Y|^r]^{\frac{1}{r}} \leqq (E[|X|^r])^{\frac{1}{r}} + (E[|Y|^r])^{\frac{1}{r}}$$

$$(\|X+Y\|_r \leqq \|X\|_r + \|Y\|_r)$$

(証明) (1) Young の不等式よりある $\tilde{X}, \tilde{Y}$ に対し.

$$|\tilde{X}\tilde{Y}| \leqq \frac{1}{r}|\tilde{X}|^r + \frac{1}{s}|\tilde{Y}|^s$$

である. 両辺期待値を取れば

$$E[|\tilde{X}\tilde{Y}|] \leqq \frac{1}{r}E[|\tilde{X}|^r] + \frac{1}{s}E[|\tilde{Y}|^s].$$

ここで. $\tilde{X} = \frac{X}{(E[|X|^r]^{\frac{1}{r}})}$, $\tilde{Y} = \frac{Y}{(E[|Y|^s])^{\frac{1}{s}}}$ とおくと.

$$\frac{E[|XY|]}{E[|X|^r]^{\frac{1}{r}}E[|Y|^s]^{\frac{1}{s}}} \leqq \frac{1}{r}\frac{E[|X|^r]}{E[|X|^r]} + \frac{1}{s}\frac{E[|Y|^s]}{E[|Y|^s]}$$

$$= \frac{1}{r}+\frac{1}{s} = 1$$

//

(2)
$$\begin{aligned}
E[|X+Y|^r] &= E[|X+Y| \cdot |X+Y|^{r-1}] \\
&\leqq E[|X| \cdot |X+Y|^{r-1}] + E[|Y| \cdot |X+Y|^{r-1}] \\
&\leqq E[|X|^r]^{\frac{1}{r}} \cdot E[|X+Y|^{(r-1)s}]^{\frac{1}{s}} \\
&\quad + E[|Y|^r]^{\frac{1}{r}} E[|X+Y|^{(r-1)s}]^{\frac{1}{s}} \quad (\text{Young より})
\end{aligned}$$

(ただし. $\frac{1}{s}+\frac{1}{r}=1$, つまり $s=\frac{r}{r-1}$ とする)

$$= (E[|X|^r]^{\frac{1}{r}} + E[|Y|^r]^{\frac{1}{r}}) \cdot (E[|X+Y|^r])^{\frac{r-1}{r}}$$

$$\Longrightarrow E[|X+Y|^r]^{\frac{1}{r}} \leqq E[|X|^r]^{\frac{1}{r}} + E[|Y|^r]^{\frac{1}{r}}$$

//

Young の不等式より $E[|XY|] \leqq \frac{1}{r}\|X\|_r^r + \frac{1}{s}\|Y\|_s^s$ でもある.

- $\|X\|_p := E[|X|^p]^{\frac{1}{p}}$ $(p \geq 1)$ と書くと、Minkowskiの不等式より
  これは3角不等式を満たす。$\Rightarrow$ <u>L^p-ノルムと言う</u>

- Hölderの不等式から $\|\cdot\|_r$ と $\|\cdot\|_s$ は互いに"双対"
  $\langle X,Y\rangle = E[XY]$ と書くと、
  $\langle X,Y\rangle \leq \|X\|_r\|Y\|_s$ かつ $\|X\|_r = \sup_{\|Y\|_s \leq 1} \langle X,Y\rangle$
  ($Y = \dfrac{\mathrm{sign}(X)\cdot|X|^{r-1}}{\|X\|_r^{r-1}}$ とすれば = をみたす)

- $\|X\|_p < \infty$ である r.v. X を L^p-可積分と言う
  L^p-可積分な r.v. 全体を $L^p(P)$ と書く。
  L^pの元 X,Y で $\|X-Y\|_p = 0$ なる r.v. を同一視することで、
  $\|\cdot\|_p$ は L^p のノルムになる。さらに、L^p は $\|\cdot\|_p$ について完備であることも示せる。
  つまり $(X_n)_n$ が L^p内のコーシー列 ($\forall\varepsilon>0$, $\exists N\in\mathbb{N}$ で $\|X_n-X_m\|_p \leq \varepsilon$ $(\forall n,m \geq N)$)
  なら、ある $X\in L^p$ が存在して $\|X_n - X\|_p \to 0$ である。(非自明) ← 次回の演習問題で出題予定
  これより、L^p は Banach空間になる。$\Longrightarrow$ L^p-空間と言う

  より正確には $L^p/\sim$ なる商空間を考える。 $(X\sim Y \Leftrightarrow \|X-Y\|_p = 0)$

- L^2-空間は $\langle X,Y\rangle$ を内積とした Hilbert空間になる。
- もっとも $\|X-Y\|_p = 0$ なら $X=Y$ (a.s.) である。(Markovの不等式より)
  → 次回。

<u>Cor</u> (Schwartzの不等式)

$$E[|XY|] \leq \|X\|_2 \cdot \|Y\|_2$$

特に $\|X+Y\|_2 \leq \|X\|_2 + \|Y\|_2$

<u>Ex.</u> Kullback-Leibler divergence (KL-ダイバージェンス, 相対エントロピー)

p, q: 2つの p.d.f.

$$D(p\|q) := \int p(x)\log\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right)dx$$: KL-divergence

$\Longrightarrow$ $D(p\|q) \geq 0$ かつ $D(p\|q) = 0 \Leftrightarrow p = q$ である。

(∵) Jensenより $D(p\|q) = \int p(x)\left[-\log\left(\frac{q(x)}{p(x)}\right)\right]dx \geq -\log\left(\int \cancel{p(x)}\frac{q(x)}{\cancel{p(x)}}dx\right) = -\log(1) = 0$

= は $\frac{p(x)}{q(x)} = 1$ (a.s.) のとき、つまり $p = q$ (a.s.) //

参考: KL-div を一般化して、$f(1)=0$ なる凸関数を用いた

$$D_f(p\|q) := \int p(x) f\left(\frac{q(x)}{p(x)}\right) dx$$

を f-ダイバージェンスと言う.

例えば: $f(u) = -(u+1)\log\left(\frac{1+u}{2}\right) + u\log u$ を用いると、

$$D_f(p\|q) = \frac{1}{2}\int p(x)\log\left(\frac{2p(x)}{p(x)+q(x)}\right) + q(x)\log\left(\frac{2q(x)}{p(x)+q(x)}\right) dx$$

を Jensen-Shannon エントロピーと言い、深層学習における GAN に用いられている