

平成 22 年 6 月 9 日現在

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2008～2009

課題番号：20700260

研究課題名（和文） 予測問題におけるベイズとブートストラップに関する研究

研究課題名（英文） A study on Bayesian prediction and bootstrap prediction

研究代表者

伏木 忠義 (FUSHIKI TADAYOSHI)

統計数理研究所・数理・推論研究系・助教

研究者番号：50370094

研究成果の概要（和文）：

既存のデータをもとに将来のデータの値を予測する問題は統計科学において広く興味をもたれている問題のひとつである。本研究では、ブートストラップ法とよばれる方法を使って構成される予測とベイズ法とよばれる方法を使って構成される予測の間の関係や予測精度について理論と数値実験の両方で検証した。また、実データを用いた解析では予測性能の評価が重要になるため、予測性能をよりよく評価するための方法を開発した。

研究成果の概要（英文）：

The problem to predict future observations based on past observations is one of the problems that are widely interested in statistics. In this study, we clarified the relation between bootstrap prediction and Bayesian prediction and calculated the predictive performances of them, both theoretically and experimentally. For real data analysis, we developed a method for evaluating the predictive performance.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	500,000	150,000	650,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,000,000	300,000	1,300,000

研究分野：統計科学

科研費の分科・細目：情報学・統計科学

キーワード：ベイズ法・ブートストラップ

1. 研究開始当初の背景

既存のデータをもとに将来のデータの値を予測する方法は、日常で広く必要とされる技

術である．このような予測問題に対して，統計学や機械学習など，さまざまな分野で研究が行われてきた．予測問題は基本的で重要な問題であり，長年の研究があるが，使える計算リソースや扱う問題の大きさ，データ量といった要因は，時代と共に変化し，それらに対応した手法が提案，研究されている．

機械学習の世界では，アンサンブル学習とよばれる手法が研究されている．アンサンブル学習は，何度も学習を行い，その結果得られた多数の学習機械をうまく組み合わせて予測を行うものである．アンサンブルをとることで1つの学習機械のみで予測するよりも良い予測が実現される場合がある．特に，ブートストラップデータを用いて何度も学習を行い，それらの単純平均で予測するバグgingや学習がうまくいかなかった例題について重みをつけて次の学習を行うブースティングという手法が有名である．

一方，統計学においては，統計的予測問題の文脈で，ブートストラップデータを用いて予測する手法やベイズ法を用いた予測法が研究されている．統計学で提案されていたブートストラップを用いた予測は，機械学習のアンサンブル学習の立場からは，統計的予測問題にバグgingを適用したものと考えることができる．ベイズ予測は，事後分布からパラメータをリサンプリングして平均をとったものと考えられるので，これもアンサンブル学習の1つとみなせる．

これまで，ブートストラップを用いた予測とベイズ予測の関係やそれらの手法を用いた予測の有効性を漸近論を用いて議論してきた．具体的には，まずブートストラップとベイズの関係については，モデルが真の分布を含む場合にブートストラップデータを用いて構成した予測がある事前分布を用いたベイズ予測と2次のオーダーまで一致することを示した．

次に，予測性能に関しては，カルバック・ライブラーダイバージェンスを損失関数とした統計的予測問題において，ブートストラップを用いた予測が最尤推定量のプラグイン予測よりも漸近的により予測を実現することを示した．一方，真の分布が仮定した統計モデルに含まれない場合は，無情報事前分布を用いたベイズ予測よりもブートストラップを用いた予測の方がよい予測を与えるということを明らかにした．

つまり，モデルの間違いが危惧され，また有効な事前分布が見つからない場合にはブートストラップを用いた予測が有効であるこ

とがこれまでの研究で明らかになったわけだが，しかし，現実の予測問題にブートストラップを用いた予測を適用する場合にはさまざまな問題が起こりうる．本研究では，そういった問題を解決するための方法を考えたい．

## 2．研究の目的

(1) 研究開始当初の背景に記述したように，ブートストラップを用いた予測を適用する場合に起こりうるさまざまな問題を解決するための方法を考えたい．特に，近年の統計科学においてはサンプルサイズがパラメータの次元に対してそれほど大きくない場合の問題が注目されている．一方，サンプルサイズがそれほど大きくない場合に通常のノンパラメトリックブートストラップを行うと独立なサンプルの数はさらに減り，有効な結果が得られないことがある．本研究ではそのような状況でブートストラップ予測を構成する場合の問題点を解決する予測法の開発を目指す．

(2) 実データを使った予測の解析をする際には，予測誤差を適切に評価することが重要になる．そのため予測誤差を適切に評価する方法を開発する．

## 3．研究の方法

(1) ブートストラップ予測に関しては，Rubin が提案したベイジアン・ブートストラップを用いて予測を構成する方法を考える．そのようにして構成された予測の性質や性能評価を理論的に調べ，数値実験によって実際の有効性を検証する．

(2) 予測誤差を評価するための方法として cross-validation を用いる．実データの解析においては，cross-validation のバイアスが問題となることがあるが，その問題点を克服するための方法として Burman と Yanagihara et al. が異なる方法を提案している．Burman は一般の K-fold cross-validation に対する方法を提案しているが，Yanagihara et al. では K がデータ数の場合に対する方法のみが提案されている．本研究では Burman と Yanagihara et al. の方法の比較を行うと共に，Yanagihara et al. の方法を一般の K-fold

cross-validation の場合に拡張することを考える。

#### 4. 研究成果

(1) ベイジアン・ブートストラップを用いた予測の有効性を理論、数値実験の両方で検証した。この研究で提案したような方法は、Clyde & Lee によってベイジアン・バグging という名前で提案されていたものと本質的に同じだということがわかったが、予測分布に対して適用したということと、関連する研究の間の関係を明確にしたという意味でいくらか新しい知見を得ることができた。

理論面では、Newton & Raftery が以前の論文で導出していたベイジアン・ブートストラップを用いて構成される推定量の分布と事後分布の関係を含む新たな関係式が導出された。

数値実験では、特に、非線形回帰の問題において、ブートストラップ予測の有効性を確認した。データ数が大きな場合には必ずしも良い方法となるとは限らないが、データ数が小さな場合においてはベイジアン・ブートストラップを用いた予測が安定した結果を出すということがわかった。

これらの結果は、Journal of Statistical Planning and Inference に発表された。

(2) 実データを使った予測の解析をする際には、予測誤差を適切に評価することが重要になる。そのため予測誤差を適切に評価する方法について研究を行った。

予測誤差のもっとも安易な評価方法は訓練誤差を用いるというものである。しかし、訓練誤差は予測を構成するときと、構成された予測を評価する際に同じデータを使うので予測誤差を平均的に小さく見積もる傾向がある。

広く用いられている予測誤差を評価する方法のひとつに K-fold cross-validation がある。一方、K-fold cross-validation は予測を構成するときに使うデータ数が減るため予測誤差を平均的に大きく見積もる傾向がある。K-fold cross-validation が平均的に大きな予測誤差を与える問題を解決する方法として、Burman と Yanagihara et al. が異なる方法を提案している。しかし、Burman が一般の K-fold cross-validation

に対する方法を提案しているのに対し、Yanagihara et al. は K がデータ数の場合 (leave-one-out cross-validation) のみ扱っている。本研究では Burman と Yanagihara et al. の方法の比較を行うと共に、Yanagihara et al. の方法を一般の K-fold cross-validation の場合に拡張することを考える。

上述のように訓練誤差では平均的に小さな予測誤差の評価となるのに対して、K-fold cross-validation では平均的に大きな予測誤差の評価となるのでこの両者の間にちょうど良い予測誤差の推定値があるのではないかと考えられる。本研究では、訓練誤差と K-fold cross-validation をつなげる二つの族を扱い、それぞれの族の中で適切に予測誤差を推定するものを選ぶための方法を考えた。

上述のようにして得られた予測誤差の推定方法は、leave-one-out cross-validation に対して Yanagihara et al. が提案した方法を K-fold cross-validation の場合に拡張したものとなっていることを示した。

これらの結果は、論文として Statistics and Computing に掲載予定である。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

{ 雑誌論文 } (計 2 件)

Fushiki, T. (2010).  
Bayesian bootstrap prediction.  
Journal of Statistical Planning and Inference, 140, 65-74, 査読有。

Fushiki, T.  
Estimation of prediction error by using K-fold cross-validation.  
Statistics and Computing, to appear, DOI 10.1007/s11222-009-9153-8, 査読有。

{ 学会発表 } (計 0 件)

{ 図書 } (計 0 件)

{ 産業財産権 }

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

6. 研究組織

(1) 研究代表者

伏木 忠義 (FUSHIKI TADAYOSHI)

統計数理研究所・数理・推論研究系・助教

研究者番号：50370094

(2) 研究分担者

( )

研究者番号：

(3) 連携研究者

( )

研究者番号：