

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23500354

研究課題名(和文)鞍点等式を用いた Bayesian 推測の新展開

研究課題名(英文) A new development of Bayesian prediction using saddlepoint equalities

研究代表者

大西 俊郎 (Ohnishi, Toshio)

九州大学・経済学研究科(研究院)・准教授

研究者番号：60353413

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円、(間接経費) 1,080,000円

研究成果の概要(和文)：尤度最大化と Shannon エントロピー最大化は統計学における2つの基本的指導原理である。Bayes 予測と熱力学と通底する数学的構造に着目し、これらに双対性というべき非常に面白い関係があることを明らかにした。ある損失関数の下では Shannon エントロピー最大化が最良の予測を導き、尤度最大化は最悪の予測を導く。一方、双対な損失関数の下では2つの原理の役割が全く逆となる。尤度最大化から最良の予測が、Shannon エントロピー最大化から最悪の予測が導かれる。

研究成果の概要(英文)：The likelihood maximization and the Shannon entropy maximization are two of the most fundamental principles in statistics. Focusing attention on a common mathematical structure between Bayesian prediction and thermodynamics, this research revealed a very interesting relationship, which should be called duality, between these two principles. Under a certain loss function the Shannon entropy maximization derives the best prediction while the likelihood maximization leads to the worst prediction. Under a dual loss function the roles of these two principles are reversed, and the likelihood maximization derives the best prediction and the Shannon entropy maximization leads to the worst prediction.

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎

キーワード：統計的推測 Bayes統計学 モデル平均 熱力学 情報量基準 凸関数 Legendre変換

1. 研究開始当初の背景

(1) Bayes 推測が高次元パラメータモデルで優れたパフォーマンスを示すことは経験的に知られているが、優れた性質の理由が明らかになっていない。大規模データが容易に得られるようになり、Bayes 推測の重要性はますます大きくなっている。Bayes 推測の新たな理論を展開し、Bayes 推測に内在する良さを明らかにしたいと考えている。

(2) いくつかの推定量において面白い等式が成り立つことが分かっている。3 つの例が挙げられる。

指数型分布族における最尤推定量

多変量正規分布における Stein 推定量

Bayes 予測問題における最適予測分布

これらにおいて対数尤度比と Kullback-Leibler ダイバージェンス損失がバランスする。損失は小さいことが望ましい量であるが、尤度原理によれば対数尤度比は大きいことが望ましい量である。両辺のバランスは多変数関数の鞍点を連想させるので、これを鞍点等式と呼ぶことにする。

鞍点等式 が特定のよいモデルや推定量について成立するのに対し、鞍点等式 は一般のモデルで成立する。これは Bayes 推測に内在する解析的性質を反映したものと予想できる。鞍点等式 が研究の着想の原点である。

2. 研究の目的

鞍点等式という面白い概念に着目し、Bayes 推測に新たな展開を与えることが本研究の目的である。鞍点等式の含意を究明することによって Bayes 推測に内在する解析的性質を明らかにする。

3. 研究の方法

(1) 不等式ではなく、鞍点等式という等式 (= ある種の解析的性質) に着目する点が特色である。報告者はこれまで共役事前分布の存在およびピタゴラス関係という解析的性質に着目して研究してきており、これは見通しのよい方法だと考えている。

(2) ピタゴラス関係、共役事前分布、物理学など多様な視点をもって研究を遂行する。多様な視点をもつことが計画を予定どおり遂行する上で重要であり、また、予想外のよい結果を生み出すことも多いと考えている。

(3) 報告者、連携研究者の柳本武美教授 (中央大学) および海外共同研究者の Peter Dunn 准教授 (Sunshine Coast 大学) の 3 人で行う共同研究である。

4. 研究成果

研究成果を一言でいえば、Bayes モデル平均と熱力学に通底する数学的構造 凸関数および Legendre 変換 の発見である。

(1) 問題の定式化

標本分布と事前分布からなる Bayes モデルを複数個考える。これらを所与のウェイト (事前の信念) で平均化する。これは Bayes モデル平均と言われ、モデル選択の代替手段として注目を集めている。

ここで予測分布によって真の分布を推定する予測問題として問題を定式化する。損失関数としては Kullback-Leibler ダイバージェンス型損失のうち e-ダイバージェンス損失を採用する。これは予測分布から真の分布への Kullback-Leibler ダイバージェンスである。

各 Bayes モデルにおける Bayes リスクを事前の信念によって平均したものを目的関数とし、この目的関数を最小化する予測分布を求めることを考える。これを最小問題 (E1) とする。

(2) 2 つの基本的な量

最小問題 (E1) において 2 つの量が基本的である。1 つは各 Bayes モデルにおける最適予測分布である。もう 1 つは Bayes の定理を用いて計算されるウェイト (事後の信念) である。最小問題 (E1) は次の最小問題 (E2) に帰着される。「予測分布から各 Bayes モデルにおける最適予測分布への e-ダイバージェンスを事後の信念というウェイトによって平均化したものを目的関数とし、これを最小化する予測分布を求める。」

(3) 問題の一般化

最小問題 (E2) を少し一般化すると見通しがよくなる。事後の信念を一般のウェイトにしておくのである。これを正準ウェイトと呼ぶことにする。事前の信念であるウェイトは所与のものとして扱ったが、正しい値は誰も知らないことに注意されたい。一般化された最小問題を (E3) とする。

(4) 最適な予測分布

最小問題 (E3) の最適解は、各 Bayes モデルにおける最適予測分布を正準ウェイトによって平均したものとなる。ここでの平均は幾何平均である。

(5) 双対なウェイト

最小問題 (E3) の最小値は正準ウェイトの凸関数になる。これは極めて重要な事実である。この凸関数を用いて正準ウェイトと双対なウェイトを導入することができる。これらの 2 つは指数型分布族における正準パラメータと平均パラメータと同様の関係である。そこで平均ウェイトと呼ぶことにする。

(6) 問題の等価変形および凸関数

最小問題 (E3) は、次の最大問題 (E4) と等価であることが示される。「平均ウェイトが与えられているという制約条件の下で Shannon エ

ントロピーを最大化する予測分布を求める。」
この等価性において凸関数が決定的な役割を果たす。

(7) 熱力学と通底する構造

最小問題(E3)の最大問題(E4)への等価変形は熱力学と共通する構造である。熱力学において平衡状態の特徴づけは、

エントロピーが与えられたときは内部エネルギー最小原理によって行われ、

温度が与えられたときは Helmholtz 自由エネルギーの最小原理によって行われる。

内部エネルギーと Helmholtz 自由エネルギーは凸関数であり、Legendre 変換によって結ばれている。

(6)で述べた事実を共通性を強調するような方法で表現すると次のようになる。Bayes モデル平均では、最適予測分布の特徴づけは

正準ウェイトが与えられたときはリスク最小化によって行われ、

平均ウェイトが与えられたときは Shannon エントロピー最大化によって行われる。

(8) 事後の信念以外の正準ウェイト

正準ウェイトとして事後の信念を用いると、最小問題(E1)の解が得られる。これ以外に2つの興味深い正準ウェイトが考えられる。

対数尤度を最大化する正準ウェイト
リスクの最小値を最大化する正準ウェイト

(9) 対数尤度の最大化

対数尤度を最大化すると次の意味で最悪の予測分布が得られる。最適予測分布および対数尤度を最大化する予測分布はある等式を満たす。その等式によって予測分布のクラスが指定される。そのクラスで最良のものが最適予測分布であり、最悪のものが対数尤度を最大化する予測分布となる。

(10) リスク最小値の最大化

リスクの最小値を最大化すると、真のウェイトによらずリスクが一定の予測分布を導くことができる。この性質は頑健性と言える。

(11) 情報量基準との関連

正準ウェイトも平均ウェイトもモデルを平均するためのウェイトであるが、少し違いがある。正準ウェイトは e-ダイバージェンスを平均化するウェイトである。一方、平均ウェイトは予測分布とモデルとの「距離」を表す。より正確に表現するならば、予測分布から各 Bayes モデルにおける最適予測分布への e-ダイバージェンスである。対数尤度を最大化する正準ウェイトに対応する平均ウェイトが AIC に似たものになることが分かった。

(12) 双対な Bayes リスク最小問題

最小問題(E1)における損失は e-ダイバージェンス損失と呼ばれ、引数を入れ替えたもの、すなわち、真の分布から予測分布への Kullback-Leibler ダイバージェンスは m-ダイバージェンス損失と呼ばれる。この双対なリスク最小問題(M1)を考察すると、まさにパラレルな結果が得られる。e-ダイバージェンスおよび m-ダイバージェンスは互いに双対と言われる。この言葉を用いれば、双対な損失の下で双対な結果が得られると表現できる。

(13) 双対な結果

最小問題(E1)および(M1)を両睨みすることにより、次の結果が得られる。

e-ダイバージェンス損失の下では、リスク最小化は Shannon エントロピー最大化と等価であり、尤度最大化は最悪の予測になる。

m-ダイバージェンス損失の下では、リスク最小化は尤度最大化と等価であり、Shannon エントロピー最大化は最悪の予測になる。

この意味において尤度最大化および Shannon エントロピー最大化という2つの基本的原理に双対性があるという大変興味深い結果である。日本学術振興会から依頼を受け、2014年1月に日仏先端科学シンポジウム (http://www.jsps.go.jp/j-bilat/fos_jf/) において研究発表した。

(14) ウェイトが連続型の場合

ウェイトが連続型の場合へ拡張にも成功している。こちらの方が熱力学との共通性により顕著になる。

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8件)

Takemi Yanagimoto, Toshio Ohnishi, Partial Order of Concentration about a Position for Comparing Bayesian Prior Densities, Far East Journal of Theoretical Statistics, Accepted, 2014, 査読有。

<http://www.pphmj.com/abstract/8199.htm>

Takemi Yanagimoto, Toshio Ohnishi, Permissible boundary prior function as a virtually proper prior density, Annals of the Institute of Statistical Mathematics, Accepted, 2014, 査読有。DOI: 10.1007/s10463-013-0421-1

Toshio Ohnishi, Takemi Yanagimoto, Dual roles of maximizing likelihood and Shannon entropy in Bayesian prediction, The 59th ISI World Statistics Congress, 25-30 August 2013,

Hong Kong ,3785-3790, 2014, 査読無.
<http://www.statistics.gov.hk/wsc/CPS018-P6-S.pdf>
Takemi Yanagimoto, Toshio Ohnishi, Examining the role of a non-informative prior function through weakly informative prior densities, The 59th ISI World Statistics Congress, 25-30 August 2013, Hong Kong ,3765-3766, 2014, 査読無.
<http://2013.isiproceedings.org/Files/CPS018-P2-S.pdf>
大西俊郎, 柳本武美, Duality in Bayesian prediction and its implication, 京都大学 数理解析研究所 講究録,1860, 104-119, 2013, 査読無.
<http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/1860-08.pdf>
Toshio Ohnishi, Takemi Yanagimoto, Twofold structure of duality in Bayesian model averaging, Journal of the Japan Statistical Society, 43, 29-55, 2013, 査読有.
DOI:<http://dx.doi.org/10.14490/jjss.43.29>
大西俊郎, 柳本武美, Saddlepoint condition on a predictor and its implications, 京都大学 数理解析研究所 講究録, 1758, 90-99, 2011, 査読無.
<http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/1758.html>
Takemi Yanagimoto, Toshio Ohnishi, Saddlepoint condition on a predictor to reconfirm the need for the assumption of a prior distribution, Journal of Statistical Planning and Inference, 141, 1990-2000, 2011, 査読有.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jspi.2010.12.011>

〔学会発表〕(計 14 件)

柳本武美, 大西俊郎, ある混合の下でのベイズモデルの尤度, 第 13 回西東京統計研究会, 2014.03.11, 東京.
大西俊郎, Bayes 予測における尤度とエントロピーの双対性, 京都大学 数理解析研究所 RISM 共同研究による研究会 "Asymptotic Statistics and Its Related Topics", 2014.03.03, 京都.
Toshio Ohnishi, Duality between maximization of likelihood and Shannon entropy, The 8th Japanese-French Frontiers of Science Symposium, 2014.01.25, Metz, France.
大西俊郎, 尤度最大化とシャノン・エントロピー最大化の双対性, 日仏先端科学 (JFFoS) シンポジウム 事前検討会, 2013.11.29, 東京.

大西俊郎, 柳本武美, Bayes 予測における尤度最大化とシャノン・エントロピー最大化の双対性, 統計関連学会連合大会, 2013.09.10, 大阪.
柳本武美, 大西俊郎, 弱い事前情報が繋ぐ情報なし/情報あり事前分布, 統計関連学会連合大会, 2013.09.10, 大阪.
大西俊郎, 柳本武美, Duality in Bayesian prediction and its implication, RIMS 共同研究による研究会 "Asymptotic Expansions for Various Models and Their Related Topics", 2013.03.05, 京都.
大西俊郎, 柳本武美, Dual roles of maximizing likelihood and Shannon entropy in Bayesian prediction, 科研費シンポジウム「統計的推測とその応用: 正則と非正則」, 2012.12.19, 東京.
大西俊郎, 柳本武美, Twofold structure of duality in Bayesian model averaging, 統計関連学会連合大会, 2012.09.11, 北海道.
Toshio Ohnishi, Takemi Yanagimoto, Peter Dunn, Dual saddlepoint equalities in model averaging and their implication, The 2nd Institute of Mathematical Statistics Asia Pacific Rim Meetings, 2012.07.03, Tokyo, Japan.
柳本武美, 大西俊郎, Bayesian モデル e-統合: 複数の証拠と意見, 科研費シンポジウム「生命科学と統計学」, 2011.11.07, 大阪.
大西俊郎, 柳本武美, Dual saddlepoint equalities in model averaging, 科研費シンポジウム「生命科学と統計学」, 2011.11.07, 大阪.
大西俊郎, 共役事前分布の存在と双対なピタゴラス関係, 統計関連学会連合大会, 2011.09.06, 福岡.
大西俊郎, 柳本武美, 鞍点等式とモデル選択, 統計関連学会連合大会, 2011.09.06, 福岡.

〔図書〕(計 1 件)

二宮嘉行, 大西俊郎, 小林景, 椎名洋, 笛田薫, 田中研太郎, 岡田謙介, 大屋幸輔, 廣瀬英雄, 折笠秀樹, 統計学 (日本統計学会公式認定 統計検定 1 級対応), 東京図書, 30-51, 2013.04.

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大西 俊郎 (OHNISHI, Toshio)
九州大学大学院・経済学研究院・准教授
研究者番号 : 60353413

(2) 連携研究者

柳本 武美 (YANAGIMOTO, Takemi)
中央大学・理工学部・客員教授
研究者番号 : 40000195

(3) 海外共同研究者

Peter Dunn
University of the Sunshine Coast,
Australia