

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 8 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26330044

研究課題名(和文)熱力学視点によるBayesモデル平均の新展開

研究課題名(英文)A new development in Bayesian model averaging from the viewpoints of thermodynamics

研究代表者

大西 俊郎(Ohnishi, Toshio)

九州大学・経済学研究院・教授

研究者番号：60353413

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：確率密度の推定である予測問題をBayes統計学の枠組みでリスク最小問題として定式化する。ここで、予測の良さを測る基準である損失関数を α -ダイバージェンスを採用する。これは Kullback-Leiblerダイバージェンスを拡張したものである。このリスク最小問題を通じて、統計科学における二大基本原理というべき尤度最大化およびShannonエントロピー最大化の間に双対性があることを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We formulate a prediction problem, which is an estimation of a probability density, as a risk minimization problem. Here we adopt the alpha-divergence as a loss function for evaluating the goodness of a prediction. The alpha-divergence is a generalization of the Kullback-Leibler divergence. Through this minimization problem, we reveal a duality between the likelihood maximization and the Shannon entropy maximization, which are two of the most important principles in statistical science.

研究分野：統計科学

キーワード：統計科学 Bayesモデル平均 Bayes予測問題 熱力学

1. 研究開始当初の背景

(1) 【研究動向及び位置づけ】

Bayes モデル平均 (Hoeting, et al. [2]) は近年、モデル選択の代替手段として注目を集めている。複数のモデルから1つを選択することに起因する不安定性を回避できるからである。また、ビッグデータ時代の到来により Bayes 推測の重要性はますます大きくなっている。本研究は Bayes モデル平均の新たな理論的展開を目指す。

(2) 【着想に至った経緯】

報告者の論文 Ohnishi & Yanagimoto [3] と熱力学に通底する類似性に気づいたのが着想の原点である。複数個の Bayes モデルを所与の重みで平均するという Bayes モデル平均を考える。Kullback-Leibler ダイバージェンス損失を採用し、予測問題の枠組みで Bayes リスク最小問題として定式化する。

ここで用語の解説をしておく。予測問題とは確率密度関数の推定問題であり、これを Bayes 統計学の枠組みで Bayes リスク最小問題として論じるのが Bayes 予測問題である。推定のおさを評価するには、真の確率分布と予測分布の乖離度を測る必要がある。確率分布間の乖離度を測るものとして Kullback-Leibler ダイバージェンスがある。これは距離のようなものであるが、対称性がないためダイバージェンスと呼ばれている。真の確率分布から予測分布への Kullback-Leibler ダイバージェンスと予測分布から真の確率分布への Kullback-Leibler ダイバージェンスは異なる。前者は (-1)-ダイバージェンスと呼ばれ、後者は (+1)-ダイバージェンスと呼ばれる。

(+1)-ダイバージェンス損失の下で Bayes リスクの最小化は、制約条件の下での Shannon エントロピー最大問題と等価であることが示される。この等価性において凸関数が決定的な役割を果たす。

(3) 熱力学にも同様の原理の等価性が現れる。平衡状態の特徴づけは、

- ✓ エントロピーが一定のときは内部エネルギー最小原理によって行われ、
 - ✓ 温度一定のときは 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。

(4) 【2013 年度までの研究成果】

報告者が研究代表者である科研費基盤研究 (C)「鞍点等式を用いた Bayes 推測の新展開」(2011-2013 年度) で得られた成果を述べる。上記(2)の Bayes リスク最小問題 (問題 E と呼ぶ) では (+1)-ダイバージェンス損失を採

用した。引数を入れ替えた損失は (-1)-ダイバージェンス損失である。問題 E および (-1)-ダイバージェンス損失の下での Bayes リスク最小問題を両睨みすることにより、次の結果が得られる。

- ✓ (+1)-ダイバージェンス損失の下では Bayes リスク最小化は制約つき Shannon エントロピー最大化と等価である。また、尤度最大化はあるクラスの中で最悪の予測になる。
- ✓ (-1)-ダイバージェンス損失の下では Bayes リスク最小化は制約つき尤度最大化と等価である。また、Shannon エントロピー最大化はあるクラスの中で最悪の予測になる。

上記の 2 つの Kullback-Leibler ダイバージェンス損失は互いに双対と言われる (Amari & Nagaoka [1])。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。さらに、Ohnishi & Yanagimoto [4] は重みが連続型の場合へ拡張している。

< 引用文献 >

- [1] Amari, S-I. and Nagaoka, H. (2000). *Methods of Information Geometry*. American Mathematical Society, Load Island.
- [2] Hoeting, J.A., Madigan, D., Raftery, A.E. and Volinsky, C.T. (1999). "Bayesian model averaging: a tutorial". *Statistical Science*, **14**, 382-417.
- [3] Ohnishi, T. and Yanagimoto, T. (2013). "Twofold structure of duality in Bayesian model averaging". *Journal of the Japan Statistical Society*, **43**, 29-55.
- [4] Ohnishi, T. and Yanagimoto, T. (2013). "Duality in Bayesian prediction and its implication". 京都大学 数理解析研究所 講究録, **1860**, 104-119.

2. 研究の目的

(1) 上記の「研究開始当初の背景」で述べた通り、Bayes モデル平均と熱力学に通底する数学的構造—凸関数・Legendre 変換—があることが分かった。ただし Bayes モデル平均では Kullback-Leibler ダイバージェンス損失を採用し、予測問題の枠組みで定式化している。この共通構造に着目し、Bayes モデル平均さらには Bayes 推測に新たな理論的展開を与えることが本研究の目的である。具体的には、

- ✓ 尤度最大化・Shannon エントロピー最大化という基本概念の理解を深化させ、
- ✓ Bayes モデル間の順序関係がどのように凸関数を規定するかを解明する。
- ✓ また、応用研究として Tweedie 分布という指数型分布族に関する Bayes 推測法を開発する。

3. 研究の方法

(1) 2014 年度は理論研究として、一般の損失関数の下での Bayes モデル平均を予測問題の枠組みで考察する。特に α -ダイバージェンス損失の場合から面白い結果が得られると予想している。ここで、 $(+1)$ -ダイバージェンスおよび (-1) -ダイバージェンスを一般化したものが α -ダイバージェンスである。パラメータ α は -1 から $+1$ までの値をとり得る。

(2) 2015、2016 年度は理論研究として Bayes モデル間の順序関係と凸関数について研究する。熱力学と同様に順序関係が凸関数を規定するかどうか考察する。

(3) 応用研究としては、Tweedie 分布の Bayes 推測法を確立させ、フリーソフト R のパッケージを作成する。

(4) それぞれの研究において予想に反する結果が得られた場合に備えてプラン B を用意しておく。研究成果は国内・国外の研究集会で発表し、論文として投稿する。本研究は報告者、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(University of the Sunshine Coast, Australia)の3人で行う共同研究である。

4. 研究成果

(1) 報告者が研究代表者として 2011-2013 年度に行った科研費基盤研究(C)「鞍点等式を用いた Bayes 推測の新展開」で得た結果を再掲する。Bayes モデル平均を Bayes 予測問題として定式化し、次の双対な事実を得た。

- ✓ $(+1)$ -ダイバージェンス損失の下では Bayes リスク最小化は制約つき Shannon エントロピー最大化と等価である。また、尤度最大化はあるクラスの中で最悪の予測になる。
- ✓ (-1) -ダイバージェンス損失の下では Bayes リスク最小化は制約つき尤度最大化と等価である。また、Shannon エントロピー最大化はあるクラスの中で最悪の予測になる。

本研究の目的は、上記の事実を熱力学的視点から発展・深化させることであり、2014 年度の成果は次の2点である。

- ✓ 損失関数を α -ダイバージェンスに拡張することによって上記の事実を統一的に理解できるようになった。 α -ダイバージェンスは、 $\alpha=+1$ のとき $(+1)$ -ダイバージェンスになり、 $\alpha=-1$ のとき (-1) -ダイバージェンスになる。双対性としてとらえていた事実を、パラメータ α を $+1$ から -1 まで変化させることにより「連続変形」の形で理解できるようになった。
- ✓ 尤度および Shannon エントロピーを一

般化した概念としてダイバージェンス共役量を定義した。これは最適予測分布が満たす等式において α -ダイバージェンスと釣り合う量であり、 $\alpha=+1$ のとき尤度を導き、 $\alpha=-1$ のとき Shannon エントロピーを導く。また、ダイバージェンス共役量を最大化するとあるクラスの中で最悪の予測になることを証明した。

(2) α -ダイバージェンス損失の下での Bayes 予測問題を研究した。予測問題とは確率密度関数の推定問題あり、これを Bayes 統計学の枠組みで論じるのが Bayes 予測問題である。この研究では、推定のよさを評価する基準(損失関数)として Kullback-Leibler ダイバージェンスを一般化した α -ダイバージェンス損失を採用した。先行研究により、 $\alpha=+1$ または $\alpha=-1$ のときは improper な一様事前分布を仮定して得られる最適予測分布を頻度論の意味で改善できることが証明されている。この結果を詳細に検討した。特に証明における鍵となるテクニックを調べた。この結果、 α が ± 1 に十分近いときに同様の改善が可能であることが分かった。

(3) 2015 年度のもう1つの研究として Bayes 予測問題と物理学の一分野である熱力学に通底する共通構造を研究した。公理的熱力学というべき論文 Lieb & Yngvason [1] は、様々な平衡状態に対する順序関係とエントロピーという凸関数の存在が等価であることを明らかにしている。この事実に触発され、次のことを示した。

- ✓ 熱力学においてエントロピーという凸関数が重要な役割を果たしているのと同様に、Bayes 予測問題においては最適問題の最適地が凸関数になり、すべてを支配している。
- ✓ 熱力学において状態間の順序関係が凸関数を導くのと同時に、Bayes 予測問題では予測の良さを評価する損失関数が凸関数を導く。

(4) 2016 年度も 2015 年度に引き続き、 α -ダイバージェンス損失関数の下での Bayes 予測問題を研究した。ねらいは、improper は一様事前分布を仮定して得られる最適予測分布を、頻度論の意味で改善するための十分条件を導くことである。

先行研究により、 $\alpha=+1$ または $\alpha=-1$ のときは周辺密度関数の優調和性が十分条件であることが証明されている。2015 年度は、 α が $+1$ または -1 に十分近いときに同じ十分条件で改善が可能であることを示した。最終年度である 2016 年度は東京大学の丸山祐造准教授との共同研究において、調和関数を improper な事前分布として仮定したときに一定の条件下で頻度論の意味で改善が可能であることに成功した。

この研究は報告者を研究代表者とする科研費基盤研究(C)「熱力学視点による Bayes 予測の新展開」(2017--2019 年度)で継続的に研究する予定である。

<引用文献>

[1] Lieb, E.H. and Yngvason, J. (1999). "The physics and mathematics of the second law of thermodynamics", *Physics Reports*, **310**, 1--96.

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5件)

大西 俊郎 (2017), 「 α -ダイバージェンス損失の下での Stein 現象」, 京都大学解析数理解析研究所講義録, 印刷中。(査読無)

Yozo Maruyama & Toshio Ohnishi (2016), "Harmonic Bayesian prediction under alpha-divergence",

Arxiv **1605.05899**, 1--23. (査読無)

大西 俊郎 (2015), 「Bayes 予測における尤度最大化と Shannon entropy 最大化の双対性」, 日本統計学会誌, **45**, 119--141. (査読有)

大西 俊郎 (2015), 「変分的手法に基づく尤度および entropy の拡張」, 京都大学解析数理解析研究所講義録, **1954**, 61--72. (査読無)

Takemi Yanagimoto & Toshio Ohnishi (2014), "Permissible boundary prior functions as a virtually proper prior density", *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, **66**, 789--809. (査読有)

[学会発表](計9件)

大西 俊郎, 「 α -ダイバージェンス損失の下での Stein 現象」, RIMS 共同研究による研究会 "Bayes Inference and Its Related Topics", 2017.03.07, 京都大学数理解析研究所(京都府京都市).

柳本 武美, 大西 俊郎, 「ベイズモデルの比較による Lindley パラドックスの解消」, 統計関連学会連合大会, 2017.09.07, 金沢大学角間キャンパス(石川県金沢市).

柳本 武美, 大西 俊郎, 「ベイズ尤度による情報量基準の拡張と改良」, 統計関連学会連合大会, 2017.09.08, 岡山大学(岡山県岡山市).

大西 俊郎, 「変分的手法に基づく尤度および entropy の拡張」, RIMS 共同研究による研究会 "Statistical Inference on Divergence Measures and Its Related Topics", 2015.03.09, 京都大学数理解析研究所(京都府京都市).

柳本 武美, 大西 俊郎, 「経験ベイズモデルの超母数の最大ベイズ尤度推定」, 科研

費シンポジウム「空間データと災害の統計モデル」, 2014.12.21, アクロス福岡(福岡県福岡市).

Toshio Sakata, Kosuke Okusa, Hiroyasu Sakamoto, Yukiyasu Yoshihara & Toshio Ohnishi, "Estimation of running distance of top tennis players from video images and its applications", The 7th International Conference of the European Research Consortium for Informatics and Mathematics Working Group on Computational and Methodological Statistics, 2014.12.07, Pisa (Italy).

Toshio Ohnishi, "Duality between likelihood and entropy in Bayesian model averaging", International Statistical Institute Regional Statistics Conference, 2014.11.18, Kuala Lumpur (Malaysia).

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」, 統計関連学会連合大会, 2014.09.14, 東京大学(東京都文京区)

大西 俊郎, 柳本 武美, 「Bayes モデル平均における尤度とエントロピーの双対性」, 統計関連学会連合大会, 2014.09.14, 東京大学(東京都文京区).

6. 研究組織

(1)研究代表者

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

(2)連携研究者

柳本 武美 (YANAGIMOTO, Takemi)
統計数理解析研究所・名誉教授
研究者番号: 40000195

(3)海外共同研究者

Peter Dunn
Associate Professor,
University of the Sunshine Coast,
Australia