

ベイズの求積法の最適収束レートおよび誤設定下における収束解析

金川 元信 統計的機械学習研究センター 特任助教

【数値積分／求積法】

- 科学・工学の様々な問題に現れる基本的タスク:

$$\sum_{i=1}^n w_i f(X_i) \approx \int f(x) dP(x)$$

(例: (準)モンテカルロ法)

特に, 被積分関数の評価コストが高い場合を考える.

(例: 統計モデルの周辺尤度計算, 微分方程式の数値解法)

問: いかにかに**少ない点列**で**良い精度**が達成できるか?

方法: 被積分関数の**滑らかさに関する知識**を用いる.

【ベイズの求積法 O'Hagan 1991, Briol et al. 2015】

- **ガウス過程**を被積分関数の事前分布として用いる.

- ガウス過程の**共分散関数(カーネル)**に滑らかさの知識を反映させる:

$$f \sim GP(k)$$

- 積分値の事後期待値を推定量とする:

$$\sum_{i=1}^n w_i f(X_i) = \mathbb{E} \left[\int f(x) dP(x) \mid (X_1, f(X_1)), \dots, (X_n, f(X_n)) \right]$$

- 重みはカーネル行列を用いて計算される:

$$w = (w_1, \dots, w_n)^T = G^{-1} z$$

$$G = (k(X_i, X_j)) \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad z = \left(\int k(X_i, x) dP(x) \right) \in \mathbb{R}^n$$

【本研究で取り組む問題】

【課題1: ベイズ的求積法の収束レート】

- 点列の数を増やした時に, **どのぐらいの速さ**で真の積分値に収束するか?

【問題2: 誤設定下での解析】

- 被積分関数が, 仮定した滑らかさよりも**粗かった**場合(カーネルの誤設定), 収束性は保証できるか?

- 本研究では被積分関数が**ソボレフ空間**に属していると仮定(Matern/Wendland カーネルに対応)

$$W_2^r(\Omega) := \{f \in L_2(\Omega) : \partial_\alpha f \in L_2(\Omega) \text{ for all } |\alpha| \leq r\}$$

- 滑らかな境界を持つ有界集合上で定義: $\Omega \subset \mathbb{R}^d$

【準備: いくつかの定義】

- **最悪時誤差(Worst case error):**

仮説空間の単位球における最悪の積分誤差

$$e_n(P, \mathcal{H}) := \sup_{\|f\|_{\mathcal{H}} \leq 1} \left| \sum_{i=1}^n w_i f(X_i) - \int f(x) dP(x) \right|$$

- **充填距離(Fill distance):**

点列が集合をどれぐらい敷き詰められているかを定量化

$$h_n := \sup_{x \in \Omega} \min_{i=1, \dots, n} \|x - X_i\|$$

- **分離半径(Separation radius):**

$$q_n := \frac{1}{2} \min_{i \neq j} \|X_i - X_j\|$$

【結果1: 最適収束レート(正しい仮定の下)】

- 点列が $h_n = O(n^{-1/d})$ ($n \rightarrow \infty$) を満たすとき, 最悪時誤差は以下のレートで収束:

$$e_n(P, W_2^r(\Omega)) = O(n^{-r/d}) \quad (n \rightarrow \infty)$$

ただし, 重みは r 次のソボレフ空間を定義するカーネルで計算されているとする(**正しい滑らかさの仮定**)

- 上の収束レートはミニマックス最適として知られる.

- **滑らかさが大きいほど速い収束レートになる.**

【結果2: 誤設定下における収束保証】

- 被積分関数が以下の仮定を満たすとする.

$$f \in W_2^s(\Omega) \setminus W_2^r(\Omega), \quad s < r$$

- 結果1の仮定に加え, 点列が $h_n \leq Cq_n^{1-r/s}$ を満たす時, 以下が成り立つ.

$$\left| \sum_{i=1}^n w_i f(X_i) - \int f(x) dP(x) \right| = O(n^{-s/d}) \quad (n \rightarrow \infty)$$

- **異なる点が互いに近くなりすぎなければ, 誤設定下においても最適収束レートが達成できる.**

【参考文献】 O'Hagan, A. (1991). Bayes-Hermite quadrature. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 29(3), 245-260.

Briol, F.-X., Oates, C. J., Girolami, M., Osborne, M. A., & Sejdinovic, D. (2015). Probabilistic Integration: A Role for Statisticians in Numerical Analysis? *ArXiv:1512.00933*

Kanagawa, M., Sriperumbudur, B. K., & Fukumizu, K. (2016). Convergence guarantees for kernel-based quadrature rules in misspecified settings. *Adv. NIPS* 29. pp. 3288-3296