

経験推定可能なアフィン不変ダイバージェンス

藤澤 洋徳 数理・推論研究系 准教授

はじめに

近年になって様々なダイバージェンスが提案されている。その中でも γ -ダイバージェンスは他のダイバージェンスと少し違った性質を持っていることが知られている。スーパーロバストネスをもたらし、また、それをもたらすために普通のダイバージェンスよりも柔軟なダイバージェンスを考える必要があった。

本研究では、様々なダイバージェンスを含む広いクラスのダイバージェンスを考えることで、よりスムーズな理解を目指す。その研究の中でキーになったのが「経験推定可能性」と「アフィン不変性」である。

本研究は、名古屋大学の金森敬文先生との共同研究である。また、proper scoring rule との関係もあるが、本ポスターでは省略する。

相互エントロピーとダイバージェンス

$p, q: p(x) \geq 0, q(x) \geq 0$. 普通は密度関数だけに制限される。

相互エントロピー $d(p, q)$:

$$d(p, q) \geq d(p, p).$$

p と q が密度関数であれば、等号は $p = q$ のときにのみ成り立つ。

ダイバージェンス $D(p, q)$:

$$D(p, q) = d(p, q) - d(p, p) \geq 0$$

Bregmanダイバージェンス

Bregmanダイバージェンス (G : (狭義)凸汎関数. G^* : 劣微分)

$$d(p, q) = -G(q) - \int G^*(q, x)\{p(x) - q(x)\}dx$$

$$D(p, q) = G(p) - G(q) - \int G^*(q, x)\{p(x) - q(x)\}dx$$

可分Bregmanダイバージェンス (U : (狭義)凸関数)

$$d(p, q) = -\int U(q(x))dx - \int U'(q(x))\{p(x) - q(x)\}dx$$

$$D(p, q) = \int \{U(p(x)) - U(q(x)) - U'(q(x))\{p(x) - q(x)\}\} dx$$

例

KL-ダイバージェンス ($U(a) = a \log a - a$)

$$d_{\text{KL}}(p, q) = -\int p(x) \log q(x) dx + \int q(x) dx$$

β -ダイバージェンス ($U(a) \propto a^{1+\beta}$)

$$d_{\beta}(p, q) = -\frac{1}{\beta} \int p(x) q(x)^{\beta} dx + \frac{1}{1+\beta} \int q(x)^{1+\beta} dx$$

γ -ダイバージェンス (可分型ではない)

$$d_{\gamma}(p, q) = -\frac{1}{\gamma} \log \int p(x) q(x)^{\gamma} dx + \frac{1}{1+\gamma} \log \int q(x)^{1+\gamma} dx$$

注: $d_{\gamma}(p, q) = 0 \iff p \propto q$ ($p = q$ ではない.)

Hölderダイバージェンス

$$d_H(p, q) = \phi \left(\int p(x) q(x)^{\gamma} dx / \int q(x)^{1+\gamma} dx \right) \int q(x)^{1+\gamma} dx \quad \text{for } \gamma > 0$$

$$= -\int p(x) \log q(x) dx + \int q(x) dx \quad (= d_{\text{KL}}(p, q)) \quad \text{for } \gamma = 0$$

$$\phi(1) = -1 \quad \phi(z) \geq -z^{1+\gamma} \quad (z \geq 0)$$

例

γ -相互エントロピー: $\phi(z) = -z^{1+\gamma}$ (これは下限)

β -相互エントロピー: $\phi(z) = \beta - (1 + \beta)z$

アフィン不変性と経験推定可能性

アフィン変換 $\theta = (\Sigma, \mu)$

$$y = \Sigma^{-1}(x - \mu) \quad p_{\theta}(y) = |\det(\Sigma)| p(\Sigma y + \mu)$$

アフィン不変ダイバージェンス

$$D(p, q) = h(\theta) D(p_{\theta}, q_{\theta})$$

共変推定量をもたらす: $(\hat{p})_{\theta} = \hat{p}_{\theta}$

定理: 相互エントロピーが次のクラスだとする (経験推定可能):

$$d(p, q) = \psi \left(\int p(x) \chi(q(x)) dx, \int \rho(q(x)) dx \right).$$

適当な条件の下では、対応するダイバージェンスがアフィン不変ならば、それはHölderダイバージェンスになる。

ダイバージェンスの関係

BregmanとHölderの関係

ある種の共通部分は、 β -相互エントロピーと γ -相互エントロピーを一つのパラメータで繋ぐダイバージェンス族になる:

$$d(p, q) = \left(\int q(x)^{1+\gamma} dx \right)^{\kappa/(1+\gamma)} \left(1 - \frac{1}{\kappa} - \int p(x) q(x)^{\gamma} dx / \int q(x)^{1+\gamma} dx \right).$$

