

氏 名 黄 撫 春

学位（専攻分野） 博士(学術)

学位記番号 総研大甲第306号

学位授与の日付 平成10年3月24日

学位授与の要件 数物科学研究科 統計科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学位論文題目 Studies in Methods Toward Likelihood Based
Inference for Spatial Statistical Models

論文審査委員 主 査 教 授 種村 正美
教 授 江口 真透
教 授 尾形 良彦
教 授 田村 義保
教 授 間瀬 茂（東京工業大学）
助 教 授 忝地 真弘人（統計数理研究所）

論文内容の要旨

Many spatial statistical models are described by the interaction among variables on the space. For the likelihood based method, difficulty arises since the normalizing factor of the Gibbsian equilibrium distribution is usually not numerically feasible. To overcome this difficulty, many efforts have been made since 1970s. These can be classified into three categories:

1. calculation of the normalizing factor by Markov chain Monte Carlo (MCMC) integration for the likelihood procedures;
2. numerical iteration procedures converging to the maximum likelihood estimate (MLE);
3. proposal and theoretical studies of alternative estimators such as the maximum pseudo-likelihood estimator (MPLE).

Relating to the first category at least two methods exist in the literatures. They are the method proposed by Ogata and Tanemura (O-T) and the method proposed by Jerrum and Sinclair (J-S). Special versions of the J-S method are used by statisticians before the proposal. The O-T method has been developed because they knew that the J-S type method was not effective for a high dimensional integration. However, it seems that its merit is not yet widely perceived. Some researchers even claim superiority of the J-S method over the O-T method based on some mathematical assumptions. In chapter 1, simulation studies are extensively carried out to compare the efficiency and accuracy of the two methods using different kinds of spatial statistical models, namely, an Ising model, a Gauss Markov random field model and a pairwise interacted point field model. In particular, the effect of the size of the models which corresponds to the dimensionality of the integration is examined. According to the simulation results, the O-T method is better than the J-S method, and their difference becomes large as the interaction of the model gets strong or the size of the model increases.

Concerning the second category, the stochastic approximation seems to prevent the iteration procedures from stable convergence to the solution, meanwhile the intensive computation is required for each step. Therefore, a good initial estimate ought to be sought for fewer iteration steps to converge. Thus the MPLE is considered to be the input of the Newton-Raphson transformation to examine the efficiency of the output estimate relative to the MLE. In chapter 2, this is implemented by using the gradient and Hessian of the log-likelihood function which are estimated by the MCMC method. It is revealed that, for the parameter range up to the strongest interaction, the MPLE is a good initial value to produce the efficient estimate towards the MLE by the single step Newton-Raphson transformation. This is examined by looking at the values of the new estimator and the corresponding log-likelihood values, as well as the biases, standard deviations and efficiency

values of various estimators. In addition, in the case of the spatial point processes, the proper MPLE is proposed and its performance is compared with that of the conventional MPLE used in the literature. It is revealed that the proper MPLE is substantially better than the conventional MPLE, especially when the size of the sample is small.

In chapter 3, an alternative transformation formula instead of the Newton transformation formula is studied. Simulation results for an Ising model and a pairwise interaction point pattern model show that the new transformation gives results better than those by the Newton transformation in some cases of strong interaction, while in the cases of weak interaction both transformations give estimators very close to the MLE. This exploratory research proposes the consideration of the shape or good approximation of the log-likelihood functions in practice, and the use of the corresponding good transformation formula in searching the maximum likelihood estimator by the MCMC approach.

The initial value is known important to ensure the efficient searching of the MLE according to the research of chapters 2 and 3. In chapter 4, as to the third category, a generalized pseudo-likelihood and the maximum generalized pseudo-likelihood estimator (MGPLE) for various Markov random fields on lattice are proposed. The MGPLE is a class of estimates connecting the MLE and MPLE, which is defined by the product of conditional probabilities (or densities) of random variables at an adjacent sites on the rest of random variables. Their performances are examined by simulation experiments for an Ising model and a Gaussian Markov random field model. According to the simulation results, the MGPLEs are clearly better than the MPLE, and their performances become better as the size of the taken adjacent sites increases, and their calculation is as easy as the MPLE as long as the size of the taken adjacent sites is not too large.

論文の審査結果の要旨

審査委員会は、数物科学研究科統計科学専攻黄撫春君の論文の審査を行なった結果、下記の理由により課程博士の博士論文として十分な内容と形式を備えていると判断した。

1) 論文の概要

空間統計は空間上の各位置での確率変数値のデータに基づいて、位置間の距離や方向などの位相的制約のもとでの変数間の相互作用についての推論をおこなうものである。その統計的モデルは確率場の理論や統計力学の成果に大きく負って発展しており、統計科学としては比較的若い分野である。しかし空間統計の解析法の最弱点は、統計科学の基本原理である尤度 (likelihood) の数値的な取扱いが難しいためにモデル構築や適合性の比較を自由に行えないということである。これは確率分布の規格化定数 (分配関数) が高次元の積分であり、この数値が与えられないと尤度が定義できないためである。この困難にも拘らず最大尤度法 (最尤法) の実用化を目指す努力、または困難を回避して代用の方法でモデルのパラメタを推定しようとする試みが 1970 年代以来数多く重ねられてきた。

これらの推定方法の提案と理論的研究は大きく分けて 3 つのカテゴリに分類される：

[A] . 尤度計算を実用化するためにマルコフ連鎖モンテカルロ法で出来るだけ正確に効率的に高次元積分を行いパラメタごとに必要な規格化定数をもとめること。 [B] . 最尤推定値へ収束させることを目標としてマルコフ連鎖モンテカルロ法で Newton-Raphson 法などの確率的反復法を実用化すること。 [C] . 尤度関数と類似の解析的に計算可能な自然な評価関数 (擬似尤度など) の最大化やモーメント関係式に依拠した最小二乗法などによって空間統計モデルのパラメタを推定すること。

ここで黄君の提出した学位申請論文は以下の 4 章から成り、上記 3 つの項目それぞれに関わる研究結果を著したものである。各章の題名に上記の項目を付記してある。

第 1 章: 空間統計モデルの規格化定数 (分配関数) の計算法の比較 [A]

多次元関数の規格化定数を独立な乱数によって直接モンテカルロ積分する計算は次元が高いほど真値との偏差が大きくなり役に立たない。現実的な方法としては既知の被積分関数と求めたい被積分関数を繋ぐ径数 (温度または縮尺など) を導入した被積分関数族を考えるものである。そこで第一の方法は径数を離散化して隣合う被積分関数同士の積分の比をマルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法でもとめて、それらの全ての積として求める方法 (JS 法) で、第二の方法は被積分関数族の対数の径数に関する微分値を MCMC 法で求め、それを径数に関して数値積分する方法 (OT 法) が考えられる。実際にどちらの方法がより正確で計算効率が良いのかというのがここでの研究課題である。解析的な形で分配関数 (積分) が知られている Ising モデル、ガウス型マルコフ確率場モデル、および VSC モデルと呼ぶ空間点配置モデルを使った計算機実験によると、相互作用が強いほど (すなわち被積分関数の変動が大きいほど)、そしてモデルの規模 (すなわち被積分関数の次元) が大きくなるほど、JS 法より OT 法の方が真値への収束の速さが優れていることを示している。

第 2 章: 空間統計モデルにおける最大擬似尤度推定量の改良について [B]

対数尤度の各階の微分値を MCMC 法で推定できるので、これらを使い Newton-Raphson 法 (Newton 法) で最尤推定値に収束させることは原理的に可能である。しかし実際には反復による推定誤差のため収束が不安定であるのが問題である。ここでは初期値として最大擬似尤度推定値 (MPLE) を考え、一回限りの Newton 変換で得られる推定値 (AMLE) を考え、その性能を最尤推定値 (MLE) や MPLE と比較している。解析的な尤度関数が計算できる第一章のものと同じ確率場モデルを使った計算機実験によると、弱い相互作用の場合は 3 つの推定値はいずれも同様に統計的に「有効 (efficient)」である。しかし、相互作用が強くなるにつれて MPLE と MLE の差が出てくるが、AMLE は MLE と極めて近い値をとり、したがって「有効」であることを示している。

第 3 章: 最尤推定量を求める新しい反復変換法について [B]

前章で導入された MPLE から AMLE を求める方法では Newton 法を用いたが、これは対数尤度関数が MLE 近傍で放物型に近いことを期待している。実際、対数尤度が厳密に放物型であれば、Newton 法を一回適用することによって、ただちに MLE に到達する。しかし、標本数が小さく相互作用が強い場合には大標本の漸近理論が成り立たず、対数尤度が極大近傍で非対称関数となり得る。本章では、そのような場合に Newton 法よりも近似のよい反復変換法を考察した。論文では Ising モデルと VSC モデルの場合について、「ガンマ変換」を導入して、近似が一段と改良されることを示している。

第 4 章: 最大擬似尤度法の拡張について [C]

Besag の擬似尤度関数はマルコフ確率場の各位置の条件付き遷移確率関数の形式的な積を評価関数としたもので、これを最大化することによって最尤推定量と同様の性質を期待したものである。黄君はこれを一定の凸集合上の場の同時確率を、その余集合との境界での値に関する条件付き関数として与え、これらを全ての同種の凸集合に関する直積を取ったものを評価関数とすることを考えた。そしてこれを最大化する一般化最大擬似尤度推定量 (MGPLe) を提案した。MGPLe は凸集合が一点配置のとき MPLE で全配置のとき MLE となるのである。その精度や効率性を計算機実験によって MLE や MPLE と比較したところ、凸集合が大きくなると確かに MPLE より改善され MLE に近づいていることが確認された。

2) 論文の評価

第 1 章は尤度関数を定義するための確率 (密度) 分布の規格定数の MCMC 積分法の評価に関する研究であるが、OT 法より JS 法が優れているという定理を導いた論文もある。しかし、比較条件を実際的に適切に設定した黄君の工夫によって被積分関数の次元 (モデルの規模) の大小や複雑性 (相互作用の強弱) によって二つの方法の優劣について明解な結論を導いた。

第 2 章の AMLE は、一定の統計モデルに関する大標本漸近理論によって、その MLE に匹敵する「有効性」が期待されていたものである。しかし、それは標本数が限りなく保証される数学的設定の結果である。ここでの統計モデルは極めて複雑なものであり、所与のデータ数のもとで漸近理論がどの程度あてはまるか未知である。黄君は第 2 章では Newton 法によって MPLE がどれだけ改善されるかを議論し、AMLE が MLE を極めて良く近似することを計算機実験によって定量的に示した。

第3章では所与のデータ数のもとで漸近理論の妥当性が未知の複雑な統計モデルに対して、第2章のNewton法よりもさらに近似が改善される反復変換法を考察した。黄君は計算機実験によってスケール・パラメタの場合にそれを適用して興味ある定量的な結果を導きだした。特にMPLEを初期値にとったとき新しい変換によってAMLEがMLEと殆ど同じになるという第2章、3章の結果は最尤法による空間統計のデータ解析の実用化に向けて有望な前途を示したと言えよう。

第4章は擬似尤度の概念を一般化して、その実行可能性と優位性を示した研究である。最大擬似尤度法は、冒頭に述べた様に数値的に取り扱いにくい最尤法に代わる、比較的優れた推定法として確率幾何、空間統計や画像解析などで幅広く使われているので、一般化された最大擬似尤度法の今後の波及効果は想像に難くない。

以上の様に黄君の研究は空間統計の方法の現状における最弱点の課題に真正面から取り組み、最尤法の実用化に向けて充分意義のある貢献をしたものと考えられる。従って統計科学専攻の課程博士に値する論文であると考えられる。