不確実性の下でのマルコフ決定過程に対する区間ベイズ手法
(An Interval Bayesian Method for uncertain MDPs)

伊喜哲一郎 (T. IKI)
Faculty of Education and Culture, Miyazaki University Miyazaki 889-2192 Japan
堀口正之 (M. HORIGUCHI)
Faculty of Engineering, Kanagawa University, Kanagawa 221-8686 Japan
安田正實 (M. YASUDA)
Faculty of Science, Chiba University, Chiba 263-8522 Japan
藏野正美 (M. KURANO)

1 はじめに

推移確率行列が未知のマルコフ決定過程 (Markov Decision Processes, MDPs) の解析は, 最尤推定法を用いる場合 (cf. [Doshi & Shreve 1980, Hernández-Lerma 1989, Iki, Horiguchi, Yasuda & Kurano 2007, Mandl 1974]) とベイズ推定法を用いる場合 (cf. [van Hee 1978, Hernández-Lerma 1989, Martin 1967]) がある. ベイズ推定法においては, 事前分布をいかに設定するかが一つの問題である. その設定において, 柔軟性と融通性に富んだ頑健なモデルを構成することは現実問題への応用において重要である.

これに答えるために, 本論文では De Robert and Hartigan[De Robertis & Hartigan 1981] が提唱した事前測度区間による区間ベイズの考え方を適応して, 推移確率行列が未知の MDPs の解析を試みる. そのために, 未知の推移確率行列をある区間で推定した場合のモデルとして, 区間推定 MDPs(Interval estimated MDPs) を定式化しその解析を行う. この解析結果を受けて, 事前情報を区間ベイズ法 ([De Robertis & Hartigan 1981]) にもとづく処理から得られた区間を用いたモデルとして, 区間ベイズ MDPs(Interval Bayesian estimated MDPs) を構成する.

マルコフ連鎖の推移確率行列の区間ベイズ推定は, 基本的には, 多項分布の生起確率の区間推定に帰着されるので, これに関する計算法といくつかの数値例を与える. Kurano et al.[Kurano, Song, Hosaka & Huang 1998, Kurano, Yasuda & Nakagami 2002] で考察された “Controlled Markov set-chain model” は, 推移確率行列を区間でとらえる考え方においては本論文とおなじであるが, 前者においては各期で推移確率行列が区間内に変動することも可能な場合を取り扱っている. 区間推定 MDPs では, 全過程を通して推移確率行列は一定である場合を扱う.

2 記号と基本命題

ここでは, いくつかの記号と続く節で用いられる基本補題を与えておく.

$\mathbb{R}, \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{m\times n}$ をそれぞれ実数, n 次元実列ベクトル, $m \times n$ 型実行列の全体を表す. $\mathbb{R} = \mathbb{R}^{1\times 1}, \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{n\times 1}$ とする. また, $\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^n_+, \mathbb{R}^{m\times n}_+$ はそれぞれ $\mathbb{R}, \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{m\times n}$ の各成分が非負であるようなものの集合とする.

$\mathbb{R}^{m\times n}$ の半順序 $\preceq, \prec$ は次で定める:
$\mathbb{R}^{m\times n} \ni A = (a_{ij}), B = (b_{ij})$ に対して

$$(2.1)\qquad \begin{cases} A \preceq B & (a_{ij} \leqq b_{ij}\ (1 \leqq i \leqq m, 1 \leqq j \leqq n)\ \text{のとき}) \\ A \prec B & (A \preceq B\ \text{かつ}\ A \neq B\ \text{のとき}) \end{cases}$$

とする.

$\underline{A} \preceq \overline{A}$ なる $\underline{A} = (\underline{a}_{ij}), \overline{A} = (\overline{a}_{ij}) \in \mathbb{R}^{m\times n}_+$ に対して区間 $\langle \underline{A}, \overline{A} \rangle$ を次で定める:

$$(2.2)\qquad \langle \underline{A}, \overline{A} \rangle = \left\{ Q = (q_{ij}) \in \mathbb{R}^{m\times n}_+ \middle| q_{ij} \geqq 0, \sum_{j=1}^{n} q_{ij} = 1\ (1 \leqq i \leqq m, 1 \leqq j \leqq n) \right\}.$$

$n \times n$ 型の確率行列の区間集合全体を $\mathcal{M}_n$ で表す.

$$(2.3)\qquad \mathcal{M}_n = \left\{ \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle \middle| \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle = \emptyset, \underline{Q} \preceq \overline{Q}, \underline{Q}, \overline{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}_+ \right\}$$

$\mathcal{M}_n \ni \mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2$ に対する積 $\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2$ を次で定める.

$$(2.4)\qquad \mathcal{Q}_1\mathcal{Q}_2 = \left\{ Q_1Q_2 \middle| Q_1 \in \mathcal{Q}_1, Q_2 \in \mathcal{Q}_2 \right\}$$

また, $\mathcal{Q} \in \mathcal{M}_n$ に対する多重積は逐次的に定義される:

$$(2.5)\qquad \mathcal{Q}^k = \mathcal{Q}^{k-1}\mathcal{Q}\ (k \geqq 2).$$

$\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)$ を $\mathbb{R}_+$ の有界閉区間の全体とする. また, $\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ を $\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)$ の要素を成分に持つ n 次元列ベクトルの全体とする:

$$(2.6)\qquad \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n = \left\{ D = (D_1, D_2, \ldots, D_n)' \middle| D_i \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)\ (1 \leqq i \leqq n) \right\}$$

ただし, $\boldsymbol{d}'$ はベクトル $\boldsymbol{d}$ の転置を表す.

$\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ 上の算法 (加法, スカラー倍) は次で定める: $D = (D_1, D_2. \ldots, D_n)', E = (E_1, E_2, \ldots, E_n)' \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n, h \in \mathbb{R}^n_+, \lambda \in \mathbb{R}_+$ に対して,

$$(2.7)\qquad D + E = \{d + e | d \in D, e \in E\}, h + D = \{h + d | d \in D\}, \lambda D = \{\lambda d | d \in D\}.$$

$D = ([\underline{d}_1, \overline{d}_1], [\underline{d}_2, \overline{d}_2], \ldots, [\underline{d}_n, \overline{d}_n])' \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ を $D = [\underline{d}, \overline{d}]$ と記す. ただし, $\underline{d} = (\underline{d}_1, \underline{d}_2, \ldots, \underline{d}_n) \in \mathbb{R}^n_+, \overline{d} = (\overline{d}_1, \overline{d}_2, \ldots, \overline{d}_n) \in \mathbb{R}^n_+$ とする. $D = (D_1, D_2, \ldots, D_n)' \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ と部分集合 $G \subset \mathbb{R}^{1\times n}_+$ に対して, その積 GD を次で定める:

$$(2.8)\qquad GD = \{gd | g = (g_1, g_2, \ldots, g_n) \in G, d = (d_1, d_2, \ldots, d_n)' \in D, d_i \in D_i\ (1 \leqq i \leqq n)\}$$

次が成り立つ.

Lemma 2.1. *([Hartfiel 1998, Kurano et al. 1998])*

(i) 任意の $\mathbb{Q} \in \mathcal{M}_n$ は $n \times n$ 次元ベクトル空間 $\mathbb{R}^{n\times n}$ の凸多面体である.

(ii) コンパクト凸部分集合 $G \subset \mathbb{R}_+^{1\times n}$ と $D = (D_1, D_2, \ldots, D_n) \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ に対して $GD \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)$ である.

$\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)$ 上の半順序 $\preceq, \prec$ を次で定める: $[c_1, c_2], [d_1, d_2] \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)$ に対して

$$\begin{cases} [c_1, c_2] \preceq [d_1, d_2] & (c_i \leqq d_i \ (i = 1, 2) \text{ のとき}) \\ [c_1, c_2] \prec [d_1, d_2] & ([c_1, c_2] \preceq [d_1, d_2] \text{ かつ } [c_1, c_2] \neq [d_1, d_2] \text{ のとき}) \end{cases} \tag{2.9}$$

とする. $\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ 上の半順序 $\preceq, \prec$ は $\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)$ 上の半順序を用いて次により定める: $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, \ldots, v_n)', \boldsymbol{w} = (w_1, w_2, \ldots, w_n)' \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ に対して

$$\begin{cases} \boldsymbol{v} \preceq \boldsymbol{u} & v_i \leqq w_i \ (1 \leqq i \leqq n) \text{ のとき}, \\ \boldsymbol{v} \prec \boldsymbol{u} & \boldsymbol{v} \prec \boldsymbol{w} \text{ かつ } \boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{w} \text{ のとき}. \end{cases} \tag{2.10}$$

$\mathbb{R}_+^n$ の 2 つの閉集合 D_1, D_2 の距離としてハウスドルフ距離 ρ を考える:

$$\rho(D_1, D_2) = \max\{\sup_{x\in D_1} \inf_{y\in D_2} \|x - y\|, \sup_{y\in D_2} \inf_{x\in D_1} \|x - y\|\}. \tag{2.11}$$

次に, 次節以降の議論の準備として有限状態マルコフ決定過程について述べる. ある決定過程の状態空間を $S = \{1, 2, \ldots, n\}$, 行動空間を $A = \{1, 2, \ldots, k\}$ とする. 次の集合を定義する:

$$P(S) := \{p = (p_1, p_2, \ldots, p_n) \in \mathbb{R}_+^n \big| \sum_{i\in S} p_i = 1\}, \tag{2.12}$$

$$P(S|S) := \{q = (q_{ij} : i, j \in S) \in \mathbb{R}_+^{n\times n} \big| \sum_{j\in S} q_{ij} = 1 \ (i \in S)\}, \tag{2.13}$$

$$P(S|S \times A) := \{Q = (q_{ij}(a) : i, j \in S, a \in A) \in \mathbb{R}_+^{n\times kn}\}. \tag{2.14}$$

集合 D 上の非負実数値関数の全体を $B_+(D)$ で表す. D が有限集合のとき $B_+(D)$ と $\mathbb{R}_+^n$ を同一視する. ただし $n = |D|$ であるとする.

$Q = (q_{ij}(a)) \in P(S|S\times A)$ と $r = r(i, a) \in B_+(S\times A)$ に対して, 通常のマルコフ決定過程 $\{S, A, Q, r\}$ を考え (cf. [Puterman 1994]), ここでは簡単のために確定的 (deterministic) で定常 (stationary) な政策のみを考える. S から A への写像 f の全体を F で表す. 任意の $f \in F$ に対して, 割引率 β $(0 < \beta < 1)$ によって割り引かれた総期待利得ベクトル $\phi(f|Q) \in \mathbb{R}_+^n$ を確率行列 $Q \in P(S|S \times A)$ の関数として次で定める:

$$\phi(f|Q) = \sum_{t=0}^{\infty} (\beta Q(f))^t \boldsymbol{r}(f), \tag{2.15}$$

ただし, $\boldsymbol{r}(f) = (r(1, f(1)), r(2, f(2)), \ldots, r(n, f(n)))' \in \mathbb{R}_+^n, Q(f) = (q_{ij}(f(i)) \in P(S|S)$. 各 $f \in F$ に対して写像 $L(f) : \mathbb{R}_+^n \to \mathbb{R}_+^n$ を次で定める:

$$L(f)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{r}(f) + \beta Q(f)\boldsymbol{x}, \ \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)' \in \mathbb{R}_+^n. \tag{2.16}$$

このとき, 次の基本補題が知られている.

Lemma 2.2. *(cf. [Puterman 1994])*

(i) $L(f)$ は単調増加および縮小写像である．すなわち，

$$\boldsymbol{x} \leqq \boldsymbol{x}' \quad \text{ならば}\; L(f)\boldsymbol{x} \leqq L(f)\boldsymbol{x}' \, (componentwise),$$
$$\|L(f)\boldsymbol{x} - L(f)\boldsymbol{x}'\| \leqq \beta\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'\| \;(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}' \in \mathbb{R}^n_+).$$

(ii) $\phi(f|Q)$ は $L(f)$ の唯一の不動点である．任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n_+$ に対して

$$L(f)^t\boldsymbol{x} \to \phi(f|Q) \;(t \to \infty)$$

が成り立つ．

3 区間推定 MDPs とパレート最適

本節では, MDP(S, A, Q, r) の推移確率行列 Q を区間 $\mathcal{Q} = \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle$ で推定した場合を考察する．ただし,

(3.1) $\quad \underline{Q} = (\underline{q}_{ij}(a) : i, j \in S, a \in A) \in \mathbb{R}^{n\times kn}_+, \overline{Q} = (\overline{q}_{ij}(a) : i, j \in S, a \in A) \in \mathbb{R}^{n\times kn}_+,$

(3.2) $\quad \mathcal{Q} = \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle = \left\{ Q \in P(S|S \times A \big| \underline{Q} \leqq Q \leqq \overline{Q} \right\}$

とする．推移確率行列 Q を $\mathcal{Q} = \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle$ で推定した決定モデルを区間推定 MDPs$\{\mathcal{Q}\}$(Interval estimated MDPs) と呼ぶ．以下, 区間推定 MDPs の利得関数を定義しその最適化について議論する．

$f \in F$ に対する割引された総期待-集合ベクトル $\phi(f|\mathcal{Q})$ を次で定める．

$$\phi(f|\mathcal{Q}) = \bigcup_{Q\in\mathcal{Q}} \phi(f|Q) \subset \mathbb{R}^n_+ \tag{3.3}$$

ただし, $\phi(f|Q)$ は式 (2.15) で与えられている．

ここで, $\psi(f|\mathcal{Q}) \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ であることを示そう．$\mathcal{L}$ を $\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ から $\mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ への写像で次のように定める:

$$\mathcal{L}(f)v = f(f) + \beta\mathcal{Q}(f)v, \; v \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n, \tag{3.4}$$

ただし, 式 (3.3) において $\mathcal{Q} = \mathcal{Q}(f) = \langle \underline{Q}(f), \overline{Q}(f) \rangle, \underline{Q}((f) = (\underline{q}_{ij}(f(i))) \in \mathbb{R}^{n\times n}_+, \overline{Q}((f) = (\overline{q}_{ij}(f(i))) \in \mathbb{R}^{n\times n}_+$ である．補題 2.1 より $\mathcal{L}(f)v \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ $(v \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n)$ であることが示されていることに注意する．さらに, $\underline{L}(f) : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}^n_+, \overline{L}(f) : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}^n_+$ を次で定める: $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)' \in \mathbb{R}^n_+$ に対して

$$\underline{L}(f)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{r}(f) + \beta \min_{q\in\mathcal{Q}(f)} Q\boldsymbol{x} \tag{3.5}$$

$$\overline{L}(f)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{r}(f) + \beta \max_{q\in\mathcal{Q}(f)} Q\boldsymbol{x}. \tag{3.6}$$

このとき, 次が成り立つ．

Lemma 3.1. 任意の $f \in F$ に対して, 次が成り立つ.

(i) $\mathcal{L}(f)$ は単調増加かつ縮小写像である.

(ii) $\underline{L}(f), \overline{L}(f)$ は, ともに単調増加かつ縮小写像である.

補題 2.2 と 3.1 を適用して次を得る.

Theorem 3.1. 任意の $f \in F$ に対して次が成り立つ:

(i) $\phi(f|\mathcal{Q}) \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ かつ $\phi(f|\mathcal{Q})$ は $\mathcal{L}(f)$ の唯一の不動点である. さらに, 任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ に対して

$$\mathcal{L}(f)^\ell \boldsymbol{v} \to \phi(f|\mathcal{Q}) \ (\ell \to \infty)$$

(ii) $\phi(f|\mathcal{Q}) = [\underline{\phi}(f), \overline{\phi}(f)]$ とするとき, $\underline{\phi}(f), \overline{\phi}(f)$ はそれぞれ $\underline{L}(f), \overline{L}(f)$ の唯一の不動点である.

$f^* \in F$ がパレート最適であるとは

$$\phi(f^*|\mathcal{Q}) \prec \phi(f|\mathcal{Q})$$

なる $f \in F$ が存在しない場合を言う.

Lemma 3.2. $f, g \in F$ に対して, $\phi(f|\mathcal{Q}) \prec \mathcal{L}(g)\phi(f|\mathcal{Q})$ ならば $\phi(f|\mathcal{Q}) \prec \phi(g|\mathcal{Q})$.

$D \subset \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ に対して点 $\boldsymbol{v} \in D$ が D の**有効点** (efficient point) であるとは, $\boldsymbol{v} \prec \boldsymbol{u}$ なる $\boldsymbol{u} \in D$ が存在していない場合を言う. D の有効点の全体を $\mathrm{eff}(D)$ で表す. 式 (3.1) の $\underline{Q}, \overline{Q}$ の成分ベクトル

$$\underline{Q}_{i,a} = (\underline{q}_{i1}(a), \underline{q}_{i2}(a), \ldots, \underline{q}_{in}(a)),$$
$$\overline{Q}_{i,a} = (\overline{q}_{i1}(a), \overline{q}_{i2}(a), \ldots, \overline{q}_{in}(a))$$

に対して $\mathcal{Q}_{i,a} = \langle \underline{Q}_{ia}, \overline{Q}_{ia} \rangle$ $(i \in S, a \in A)$ とする. $\boldsymbol{u} \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n$ に対して次を定める:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{u}) := (\mathcal{L}(\boldsymbol{u})_1, \mathcal{L}(\boldsymbol{u})_2, \ldots, \mathcal{L}(\boldsymbol{u})_n)', \tag{3.7}$$

ただし, $\mathcal{L}(\boldsymbol{u})_i := \mathrm{eff}(\{r(i,a) + \beta \mathcal{Q}_{ia}\boldsymbol{u} | a \in A\})$ $(i \in S)$ である.
このとき, 補題 3.2 を用いて次が示される.

Theorem 3.2. f^* がパレート最適であるための必要十分条件は, $\phi(f|\mathcal{Q})$ が次の最適包含式の最大解となることである.

$$\boldsymbol{u} \in \mathcal{L}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{u} \in \mathbb{C}(\mathbb{R}_+)^n \tag{3.8}$$

4 多項分布の区間ベイズ解析

マルコフ連鎖の推移確率行列の区間ベイズ推定は, 行列の行成分に着目すれば, 多項分布の生起確率の区間推定に帰着される. ここでは, 多項分布の区間ベイズ推定に関する計算法について考察し, いくつかの数値例を与える.

以下、メモのまとめをする.

5 準備

記号：
ガンマ関数 $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt \quad (x>0)$
ベータ関数 $B(x,y) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}\,dt \quad (x,y>0)$

性質

- $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x), \Gamma(1) = 1, \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$
- $B(x,y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$

ディリクレ分布 (Wilks 1962 Mathematical Statistics p.177–)
ベータ分布 $\tilde{B}(\nu_1,\nu_2)$ の p.d.f.

$$f(x) = \frac{\Gamma(\nu_1+\nu_2)}{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2)} x^{\nu_1-1}(1-x)^{\nu_2-1} \tag{5.1}$$

を拡張して, k-変数ディリクレ分布 (k-variable Diriclet distribution) の p.d.f. を次のように定義する:

$$f(x_1,\ldots,x_k) = \frac{\Gamma(\nu_1+\cdots+\nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})} x_1^{\nu_1-1}\cdots x_k^{\nu_k-1}(1-x_1-x_2-\cdots-x_k)^{\nu_{k+1}-1} \tag{5.2}$$

但し,
$x_1,\ldots,x_k$ は k 次元の多面体 (simplex)

$$s_k := \{(x_1,\ldots,x_k) : x_i \geqq 0, i=1,\ldots,k, \sum_{i=1}^k x_i \leqq 1\}$$

の各成分であり, f は S_k 上の点以外では 0 とする. $\nu_i \in \mathbb{R}$ は $\nu_i > 0$ とする.

$\tilde{D}(\nu_1,\ldots,\nu_k;\nu_{k+1}) = \int\cdots\int_{S_k} f(x_1,\ldots,x_k)\,dx_1\cdots dx_k$ と表すとき次が成り立つ:

• $k=1$ のとき, $\tilde{D}(\nu_1;\nu_2)$ は $\tilde{B}(\nu_1,\nu_2)$ である.(定義から明らか)
• $k \geqq 2$ のとき, 式 (5.2) は確かに確率密度関数を表し, ベータ関数 (分布ではない) の値 $B(x,y)$ を用いて

$$
\begin{aligned}
&\tilde{D}(\nu_1,\nu_2,\dots,\nu_k;\nu_{k+1}) \\
&= \frac{\Gamma(\nu_1+\cdots+\nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})} B(\nu_1,\nu_2+\cdots+\nu_{k+1})B(\nu_2,\nu_3+\cdots+\nu_{k+1})\cdots \\
&\cdots B(\nu_k,\nu_{k+1}) \\
&= \frac{1}{B(\nu_1,\nu_2+\cdots+\nu_{k+1})}\tilde{D}(\nu_2,\dots,\nu_k;\nu_{k+1})
\end{aligned}
\tag{5.3}
$$

が成り立つ.

実際, 確率密度関数となることは以下のような変数変換をとることで示される:

$$
\begin{aligned}
&x_1 = \theta_1 \\
&x_2 = \theta_2(1-x_1) = \theta_2(1-\theta_1) \\
&x_3 = \theta_3(1-x_1-x_2) = \theta_3(1-\theta_1)(1-\theta_2) \\
&\vdots \\
&x_k = \theta_k(1-x_1-x_2-\cdots-x_{k-1}) = \theta_k(1-\theta_1)(1-\theta_2)\cdots(1-\theta_{k-1})
\end{aligned}
\tag{5.4}
$$

とすると $S_k = \{(x_1,\dots,x_k) : x_1+x_2+\cdots+x_k \leqq 1, x_i \geqq 0)\}$ は

$$
\begin{aligned}
&0 \leqq x_1 \leqq 1, 0 \leqq x_2 \leqq 1-x_2, 0 \leqq x_3 \leqq 1-x_1-x_2, \dots, \\
&0 \leqq \theta_1 \leqq 1, 0 \leqq \theta_2 = \frac{x_2}{1-x_1} \leqq 1, 0 \leqq \theta_3 = \frac{x_3}{1-x_1-x_2} \leqq 1, \dots,
\end{aligned}
$$

の関係式より k-次元直方体 $U_k := \{(\theta_1,\dots,\theta_k) : 0 \leqq \theta_i \leqq 1, i=1,2,\dots,k\}$ に 1 対 1 対応で移される. ヤコビアンは

$$
\left|\frac{\partial(x_1,\dots,x_k)}{\partial(\theta_1,\dots,\theta_k)}\right|
$$

$$
= \begin{vmatrix}
1 & 0 & \cdots & & 0 \\
-\theta_2 & 1-\theta_1 & 0 & \cdots & 0 \\
-\theta_3(1-\theta_1) & -\theta_3(1-\theta_2) & (1-\theta_1)(1-\theta_2) & \cdots & 0 \\
\vdots & & & & \vdots \\
-\theta_k \prod_{\substack{r\neq 1,\\ 1\leq r\leq k-1}}(1-\theta_r) & -\theta_k \prod_{\substack{r\neq 2,\\ 1\leq r\leq k-1}}(1-\theta_r) & \cdots\cdots & -\theta_k \prod_{1\leq r\leq k-2}(1-\theta_r) & \prod_{1\leq r\leq k-1}(1-\theta_r)
\end{vmatrix}
$$

$$
= (1-\theta_1)^{k-1}(1-\theta_2)^{k-2}\cdots(1-\theta_{k-2})^2(1-\theta_{k-1})
$$

となる. 従って,

(5.5)

$$\begin{aligned}
&\tilde{D}(\nu_1, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) \\
&= \int \cdots \int_{S_k} f(x_1, \dots, x_k)\, dx_1 \cdots dx_k \\
&= \int \cdots \int_{U_k} \frac{\Gamma(\nu_1 + \nu_2 + \cdots + \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})} \theta_1^{\nu_1 - 1}(1-\theta_1)^{\nu_2 + \cdots + \nu_{k+1} - 1} \theta_2^{\nu_2 - 1}(1-\theta_2)^{\nu_3 + \cdots + \nu_{k+1} - 1} \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \theta_k^{\nu_k - 1}(1-\theta_k)^{\nu_{k+1} - 1}\, d\theta_1 d\theta_2 \cdots d\theta_k \\
&= \frac{\Gamma(\nu_1 + \cdots + \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})} B(\nu_1, \nu_2 + \cdots + \nu_{k+1}) B(\nu_2, \nu_3 + \cdots + \nu_{k+1}) B(\nu_k, \nu_{k+1}) \\
&= \frac{\Gamma(\nu_1 + \cdots + \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})} \frac{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2 + \cdots \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1 + \cdots + \nu_{k+1})} \frac{\Gamma(\nu_2)\Gamma(\nu_3 + \cdots \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_2 + \cdots + \nu_{k+1})} \cdots \frac{\Gamma(\nu_k)\Gamma(\nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_k + \nu_{k+1})} \\
&= 1
\end{aligned}$$

を得る. 式 (5.3) の第 2 の等式の関係については上の関係式より

$$\tilde{D}(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) = \frac{\Gamma(\nu_1 + \cdots + \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2 + \cdots + \nu_{k+1})} \tilde{D}(\nu_2, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) \tag{5.6}$$

であることから明らかである.

系:ディリクレ積分, すなわち,

$$\begin{aligned}
&D(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) \\
&:= \int \cdots \int_{S_k} x_1^{\nu_1 - 1} x_2^{\nu_2 - 1} \cdots x_k^{\nu_k - 1}(1 - x_1 - x_2 - \cdots x_k)^{\nu_{k+1} - 1}\, dx_1 dx_2 \cdots dx_k \\
&= \frac{\Gamma(\nu_1)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1 + \cdots + \nu_{k+1})}
\end{aligned} \tag{5.7}$$

であるから,

$$\begin{aligned}
&D(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) \\
&= \frac{\Gamma(\nu_1)\Gamma(\nu_2 + \cdots + \nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_1 + \cdots + \nu_{k+1})} \frac{\Gamma(\nu_2)\Gamma(\nu_3)\cdots\Gamma(\nu_{k+1})}{\Gamma(\nu_2 + \cdots + \nu_{k+1})} \\
&= B(\nu_1, \nu_2 + \cdots + \nu_{k+1}) D(\nu_2, \nu_3, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) \\
&= B(\nu_1, \nu_2 + \cdots + \nu_{k+1}) B(\nu_2, \nu_3 + \cdots + \nu_{k+1}) D(\nu_3, \nu_4, \dots, \nu_k; \nu_{k+1}) \\
&= \cdots \\
&= B(\nu_1, \nu_2 + \cdots + \nu_{k+1}) B(\nu_2, \nu_3 + \cdots + \nu_{k+1}) \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots B(\nu_{k-1}, \nu_k + \cdots + \nu_{k+1}) D(\nu_k; \nu_{k+1}) \\
&= \prod_{n=1}^{n=k} B\left(\nu_n, \sum_{l=n+1}^{k+1} \nu_l\right)
\end{aligned} \tag{5.8}$$

を得る.

$0 < \lambda < 1$ に対して,

(5.9)
$$\begin{aligned} &D(\nu_1, \ldots, \nu_k; \nu_{k+1}|\lambda) \\ &:= \int \cdots \int_{S_k \cap \{0 \le x_1 \le \lambda\}} x_1^{\nu_1 - 1} \cdots x_k^{\nu_k - 1} (1 - x_1 - \cdots - x_n)^{\nu_{k+1}-1} \, dx_1 \cdots dx_k \end{aligned}$$

とすると, 式 (5.4) と同様の変数変換により

$$\begin{aligned} &D(\nu_1, \ldots, \nu_k; \nu_{k+1}|\lambda) \\ &= \int_0^\lambda \theta_1^{\nu_1-1}(1-\theta_1)^{\nu_2+\cdots+\nu_{k+1}-1} \, d\theta_1 \int_0^1 \theta_2^{\nu_2-1}(1-\theta_2)^{\nu_3+\cdots+\nu_{k+1}-1} \, d\theta_2 \cdots \\ &\qquad \cdots \int_0^1 \theta_k^{\nu_k-1}(1-\theta_k)^{\cdots+\nu_{k+1}-1} \, d\theta_k \\ &= B(\nu_1, \nu_2 + \cdots + \nu_{k+1}|\lambda) B(\nu_2, \nu_3 + \cdots + \nu_{k+1}) B(\nu_3, \nu_4 + \cdots + \nu_{k+1}) \cdots B(\nu_k, \nu_{k+1}) \end{aligned}$$

であることがわかる. ここで, m, n を正の整数とするとき $B(m, n|\lambda) = \int_0^\lambda x^{m-1}(1-x)^{n-1} dx \quad (m, n > 0)$ を $x = \lambda\theta$ として置換積分してみると

$$\begin{aligned} B(m, n|\lambda) &= \int_0^1 (\lambda\theta)^{m-1}(1-\lambda\theta)^{n-1} \lambda \, d\theta \\ &= \lambda^m \int_0^1 \theta^{m-1}(1-\lambda\theta)^{n-1} \, d\theta \\ &= \lambda^m \int_0^1 \theta^{m-1} \left(\sum_{i=0}^{n-1} \binom{n-1}{i} (-\lambda\theta)^i \right) d\theta \\ &= \lambda^m \sum_{i=0}^{n-1} \binom{n-1}{i} (-\lambda)^i \int_0^1 \theta^{m+i-1} \, d\theta \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \binom{n-1}{i} (-1)^i \lambda^{m+i} \frac{1}{m+i}. \end{aligned}$$

また,

(5.10)
$$\frac{d}{d\lambda} B(m, n|\lambda) = \lambda^{m-1}(1-\lambda)^{n-1}$$

であることも注意しておこう.

6 区間ベイズによる事前・事後解析

$P(S) = P_n = \{p = (p_1, p_2, \ldots, p_n) | p_i \ge 0, \sum_{i=1}^n p_i = 1\}$
(※前節の k 次元多面体 S_k との関係は P_n の $0 \le p_n \le 1$ に関する
切片の空間 $\{(p_1, \ldots, p_{n-1}) | \sum_{i=1}^{n-1} p_i \le 1, p_i \ge 0, i = 1, 2, \ldots, n-1\}$ は S_{n-1} に等しい.)

$L(\cdot)$:P_n 上のルベーグ測度 (*lower bound measure*)
$U(\cdot) := kL(\cdot)$ (*upper bound measure*), 測度 L の $k(k>0)$ に関する proportional measure

事前測度区間:$[L, kL] = [dp, kdp]$ とする.
データ $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n)$ は $\overline{\sigma} := \sum_{k=1}^{n} \sigma_k$ 回の独立試行実験でそれぞれ state i が σ_i 回起きたことを表す. state i の生起確率が p_i であるとき, $p = (p_1, \ldots, p_n) \in P_n$ に対する σ の p.d.f. は多項分布で表されて

$$f(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n | p) = \frac{(\sigma_1 + \cdots + \sigma_n)!}{\sigma_1! \cdots \sigma_n!} p_1^{\sigma_1} p_2^{\sigma_2} \cdots p_n^{\sigma_n} \tag{6.1}$$

となる. これはディリクレ分布 $\tilde{D}(\sigma_1 + 1, \sigma_2 + 1, \ldots, \sigma_{n-1} + 1; \sigma_n + 1)$ の p.d.f. である.

p_1 に関する事後測度区間 $\left\{ \frac{\int_{P_n} p_1 Q(dp)}{\int_{P_n} Q(dp)} \middle| L_\sigma \leqq Q \leqq U_\sigma \right\}$ について調べる.

論文 (Robertis & Hartigan "Bayesian Inference using intervals of measures") から, 上の区間は $[\underline{\lambda}, \overline{\lambda}]$ は次の方程式の一意の解である.

$$U_\sigma(p_1 - \underline{\lambda})^- + L_\sigma(p_1 - \underline{\lambda})^+ = 0 \tag{6.2}$$

$$U_\sigma(p_1 - \overline{\lambda})^+ + L_\sigma(p_1 - \overline{\lambda})^- = 0 \tag{6.3}$$

ただし, $x^+ = \max\{0, x\}, x^- = x - x^+ = \min\{0, x\}$ である.
$U_\sigma = kL_\sigma$ であるから, (6.2),(6.3) は

$$kL_\sigma(p_1 - \underline{\lambda})^- + L_\sigma(p_1 - \underline{\lambda})^+ = 0$$
$$kL_\sigma(p_1 - \overline{\lambda})^+ + L_\sigma(p_1 - \overline{\lambda})^- = 0$$

となる. 従って,

$$k \int \cdots \int_{0 \leq p_1 \leq 1, p \in P_n} (p_1 - \underline{\lambda})^- L_\sigma(dp) + \int \cdots \int_{0 \leq p_1 \leq 1, p \in P_n} (p_1 - \underline{\lambda})^+ L_\sigma(dp) = 0 \tag{6.4}$$

$$k \int \cdots \int_{0 \leq p_1 \leq 1, p \in P_n} (p_1 - \overline{\lambda})^+ L_\sigma(dp) + \int \cdots \int_{0 \leq p_1 \leq 1, p \in P_n} (p_1 - \overline{\lambda})^- L_\sigma(dp) = 0 \tag{6.5}$$

であって,

$$(p_1 - \lambda)^- = \begin{cases} 0, & (\lambda \leq p_1 \leq 1) \\ p_1 - \lambda, & (0 \leq p_1 < \lambda) \end{cases}, (p_1 - \lambda)^+ = \begin{cases} p_1 - \lambda, & (\lambda < p_1 \leq 1) \\ 0, & (0 \leq p_1 \leq \lambda) \end{cases} \tag{6.6}$$

に注意すれば, lower bound $\underline{\lambda}$ と upper bound $\overline{\lambda}$ に関する λ の積分方程式は次のようになる:

lower bound $\underline{\lambda}$

$$(6.7)\qquad k\int\cdots\int_{0\le p_1\le\lambda, p\in P_n}(p_1-\lambda)p_1^{\sigma_1}\cdots p_n^{\sigma_n}dp+\int\cdots\int_{\lambda\le p_1\le 1, p\in P_n}(p_1-\lambda)p_1^{\sigma_1}\cdots p_n^{\sigma_n}dp=0$$

upper bound $\overline{\lambda}$

$$(6.8)\qquad k\int\cdots\int_{\lambda\le p_1\le 1, p\in P_n}(p_1-\lambda)p_1^{\sigma_1}\cdots p_n^{\sigma_n}dp+\int\cdots\int_{0\le p_1\le\lambda, p\in P_n}(p_1-\lambda)p_1^{\sigma_1}\cdots p_n^{\sigma_n}dp=0$$

式 (6.8) について,

$$(6.9)\quad k\int\cdots\int_{\lambda\le p_1\le 1, p\in P_n}p_1^{\sigma_1+1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp-\lambda k\int\cdots\int_{\lambda\le p_1\le 1, p\in P_n}p_1^{\sigma_1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp$$
$$+\int\cdots\int_{0\le p_1\le\lambda, p\in P_n}p_1^{\sigma_1+1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp-\lambda\int\cdots\int_{0\le p_1\le\lambda, p\in P_n}p_1^{\sigma_1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp=0$$

従って,

(6.10)

$$k\left(D(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1)-D(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)\right)$$
$$-k\lambda\left(D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1)-D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)\right)$$
$$+D(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)-\lambda D\left(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda\right)=0$$

であるから, 整理すると,

$$(6.11)\quad kD(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1)$$
$$-(k-1)D(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)-k\lambda D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1)$$
$$+(k-1)\lambda D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)=0$$

を得る. ここで, 前節の式 (5.8) から

$$(6.12)\qquad D(\nu_1,\nu_2,\ldots,\nu_k;\nu_{k+1})=B(\nu_1,\nu_2+\cdots+\nu_{k+1})D(\nu_2,\nu_3,\ldots,\nu_k;\nu_{k+1})$$
$$(6.13)\qquad D(\nu_1,\nu_2,\ldots,\nu_k;\nu_{k+1}|\lambda)=B(\nu_1,\nu_2+\cdots+\nu_{k+1}|\lambda)D(\nu_2,\nu_3,\ldots,\nu_k;\nu_{k+1})$$

の関係を適用すると式 (6.11) はベータ関数 $B(x,y)$ と $B(x,y|\lambda)$ を用いて

$$(6.14)\quad kB(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1)-(k-1)B(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda)$$
$$-k\lambda B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1)+\lambda(k-1)B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda)=0$$

と表される. ここでベータ関数のよく知られた性質から

$$(6.15)\qquad B(x+1,y)=\frac{\Gamma(x+1)\Gamma(y)}{\Gamma(x+1+y)}=\frac{x\Gamma(x)\Gamma(y)}{(x+y)\Gamma(x+y)}=\frac{y}{x+y}B(x,y)$$

であることに注意すると

$$(6.16)\quad B(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1)$$
$$=\frac{\sigma_1+1}{(\sigma_1+1)+(\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1)}B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1)$$

であるから, $\overline{\sigma}=\sigma_1+\sigma_2+\cdots+\sigma_n, p=\sigma_1+1, q=\overline{\sigma}-\sigma_1+n-1$ と置くと式 (6.8) は結局

$$(6.17)\quad G(p,q,\lambda):=k\left(\frac{p}{p+q}-\lambda\right)B(p,q)-(k-1)\left(B(p+1,q|\lambda)-\lambda B(p,q|\lambda)\right)=0$$

同様に, lower bound $\underline{\lambda}$ について調べると式 (6.7) より,

(6.18)
$$k\int\cdots\int_{0\le p_1\le\lambda, p\in P_n} p_1^{\sigma_1+1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp - k\lambda\int\cdots\int_{0\le p_1\le\lambda, p\in P_n} p_1^{\sigma_1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp$$
$$+\int\cdots\int_{\lambda\le p_1\le 1, p\in P_n} p_1^{\sigma_1+1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp - \lambda\int\cdots\int_{\lambda\le p_1\le 1, p\in P_n} p_1^{\sigma_1}p_2^{\sigma_2}\cdots p_n^{\sigma_n}dp = 0$$

から

(6.19)
$$\begin{aligned}&kD(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda) - k\lambda D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)\\&+\left(D(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1) - D(\sigma_1+2,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)\right)\\&-\lambda\left(D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1) - D(\sigma_1+1,\sigma_2+1,\ldots,\sigma_{n-1}+1;\sigma_n+1|\lambda)\right)\\&=0\end{aligned}$$

と表されていて, 式 (6.12) と (6.13) より

(6.20)
$$\begin{aligned}&kB(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda) - k\lambda B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda)\\&+B(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1) - B(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda)\\&-\lambda B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1) + \lambda B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda)=0\end{aligned}$$

となる. 整理すると

(6.21)
$$\begin{aligned}&B(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1) - \lambda B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1)\\&+(k-1)B(\sigma_1+2,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda) - (k-1)\lambda B(\sigma_1+1,\sigma_2+\cdots+\sigma_n+n-1|\lambda)=0\end{aligned}$$

となるから lower bound $\underline{\lambda}$ に関する次のような方程式を得ることができた:

(6.22)
$$\boxed{K(p,q,\lambda) := \left(\frac{p}{p+q}-\lambda\right)B(p,q) + (k-1)\left(B(p+1,q|\lambda) - \lambda B(p,q|\lambda)\right) = 0}$$

7 p_1 の事後測度区間 $[\underline{\lambda},\overline{\lambda}]$ と多項式

前節で求めた p_1 の事後測度区間 $[\underline{\lambda},\overline{\lambda}]$ の値 $\underline{\lambda},\overline{\lambda}$ はそれぞれ式 (6.22) と (6.17) から具体的には次の $(\overline{\sigma}+n)$ 次多項式の解になっている.

(7.1)
$$\begin{aligned}K(p,q,\lambda) = &\left(\frac{p}{p+q}-\lambda\right)B(p,q)+\\&(k-1)\left(\sum_{i=0}^{q-1}\binom{q-1}{i}(-1)^{i+1}\lambda^{(p+1)+i}\left(\frac{1}{(p+1+i)(p+i)}\right)\right)=0\end{aligned}$$

(7.2)
$$\begin{aligned}G(p,q,\lambda) = &k\left(\frac{p}{p+q}-\lambda\right)B(p,q)\\&-(k-1)\left(\sum_{i=0}^{q-1}\binom{q-1}{i}(-1)^{i+1}\lambda^{(p+1)+i}\left(\frac{1}{(p+1+i)(p+i)}\right)\right)=0\end{aligned}$$

ただし, $\overline{\sigma}=\sum_{i=1}^n\sigma_i, p=\sigma_1+1, q=\overline{\sigma}-\sigma_1+n-1$.

$K(p,q,\lambda), G(p,q,\lambda)$ はともに狭義単調関数で, $K(p,q,\lambda)$ は上に凸, $G(p,q,\lambda)$ は下に凸である.

(7.3)
$$\begin{aligned}\frac{dG}{d\lambda} &= -kB(p,q) - (k-1)\left(\lambda^p(1-\lambda)^{q-1} - B(p,q|\lambda) - \lambda^p(1-\lambda)^{q-1}\right)\\ &= -kB(p,q) + (k-1)B(p,q|\lambda)\\ &\leqq -kB(p,q) + (k-1)B(p,q) = -B(p,q) < 0\end{aligned}$$

(7.4)
$$\frac{d^2G}{d\lambda^2} = (k-1)\lambda^{p-1}(1-\lambda)^{q-1} > 0$$

(7.5)
$$\begin{aligned}\frac{dK}{d\lambda} &= -B(p,q) + (k-1)\left(\lambda^p(1-\lambda)^{q-1} - B(p,q|\lambda) - \lambda^p(1-\lambda)^{q-1}\right)\\ &= -B(p,q) - (k-1)B(p,q|\lambda) < 0\end{aligned}$$

(7.6)
$$\frac{d^2K}{d\lambda^2} = -(k-1)\lambda^p(1-\lambda)^{q-1} < 0$$

また, $\overline{\lambda}, \underline{\lambda}$ が一意の解であることは定理 (cf. Robertis& Hartigan) で明らかであるが,

(7.7)
$$G(p,q,0) = kB(p+1,q) > 0, G(p,q,1) = -\frac{q}{p+q}B(p,q) < 0$$

(7.8)
$$K(p,q,0) = B(p+1,q) > 0, K(p,q,1) = -\frac{kq}{p+q}B(p,q) < 0$$

と G, K の単調性から λ に関して $[0,1]$ で必ず解を持つ.

8 A numerical experiment

前節までの多項分布に関して $n = 3$ のときを考える.
$P_3 = \{p = (p_1, p_2, p_3) | \sum_{i=1}^3 p_i = 1, p_i \geq 1, i = 1, 2, 3\}$
$k = 2$ とする, すなわち事前測度区間を $[L, 2L]$ とする.$\overline{\sigma} = 6$ 回の試行をして, $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 2$ を観測したとする.

$$\begin{aligned}\overline{\sigma} &= \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 6,\\ p &= \sigma_1 + 1 = 4,\\ q &= \sigma_2 + \sigma_3 + (n-1) = 5\end{aligned}$$

式 (7.2) に関する多項式は

(8.1)
$$2\left(\frac{4}{6+3} - \lambda\right)B(4,5) - \left(\sum_{i=0}^{4}\binom{4}{i}(-1)^{i+1}\lambda^{5+i}\left(\frac{1}{(4+i)(5+i)}\right)\right) = 0$$

より

(8.2)
$$8 - 18\lambda + \lambda^5(126 - 336\lambda + 360\lambda^2 - 180\lambda^3 + 35\lambda^4) = 0$$

となる. このとき, 解 $\overline{\lambda} \fallingdotseq 0.489$ を得る. また, 式 (7.1) に関する多項式は

(8.3)
$$\left(\frac{4}{6+3} - \lambda\right)B(4,5) + \left(\sum_{i=0}^{4}\binom{4}{i}(-1)^{i+1}\lambda^{5+i}\left(\frac{1}{(4+i)(5+i)}\right)\right) = 0$$

より

(8.4)
$$4 - 9\lambda - \lambda^5(126 - 336\lambda + 360\lambda^2 - 180\lambda^3 + 35\lambda^4) = 0$$

となる. このとき, 解として $\underline{\lambda} \fallingdotseq 0.400$ を得る. よって p_1 の事後測度区間は $[0.400, 0.481]$ と考えられる.

参考文献に Robertis& Hartigan(1981) と Kurano& Song & Hosaka & Huang(1998) の論文を追加する.

9 区間ベイズ推定

最初に, 区間推定 MDPs$\{\mathcal{Q}\}$ の $\mathcal{Q} \in \mathcal{M}_n$ に関する連続性を証明する. 次に, 事前情報を区間ベイズ法によって処理したデータを使って区間ベイズ MDPs を定義する.

まず, $\mathcal{Q} = \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle \in \mathcal{M}_n$ の $\underline{Q}, \overline{Q} \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ の連続性について示そう.

次が成り立つ. ただし, 収束は各空間に対応してユークリッド距離とハウスドルフ距離に対応している.

Lemma 9.1. *(i)* $\underline{Q}_t \downarrow \underline{Q}, \overline{Q}_t \uparrow \overline{Q}$ $(t \to \infty), \langle \underline{Q}_t, \overline{Q}_t \rangle \neq \emptyset$ $(t \geqq 1)$.
このとき, $\langle \underline{Q}_t, \overline{Q}_t \rangle \xrightarrow{\rho} \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle$ $(t \to \infty)$

(ii) $\underline{Q}_t \uparrow \underline{Q}, \overline{Q}_t \downarrow \overline{Q}$ $(t \to \infty), \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle \neq \emptyset$ $(t \geqq 1)$.
このとき, $\langle \underline{Q}_t, \overline{Q}_t \rangle \xrightarrow{\rho} \langle \underline{Q}_t, \overline{Q}_t \rangle$ $(t \to \infty)$

上の補題 9.1 を用いて次が示される.

Theorem 9.1. $\underline{Q}_t \to \underline{Q}, \overline{Q}_t \to \overline{Q}$ $(t \to \infty), \mathcal{Q}_t := \langle \underline{Q}_t, \overline{Q}_t \rangle \neq \emptyset$ $(t \geqq 1), \mathcal{Q} := \langle \underline{Q}, \overline{Q} \rangle$.
このとき, 次が成り立つ:

(i) $\mathcal{Q}_t \to \mathcal{Q}$ $(t \to \infty)$

(ii) $\phi(f|\mathcal{Q}_t) \to \phi(f|\mathcal{Q})$ $(t \to \infty)$ $(f \in F)$.

$Q \in P(S|S \times A)$ による MDPs$\{Q\}$ の t 期の状態と行動を X_t, Δ_T $(t \geqq 0)$ で表し, t 期までの履歴を $H_t = (X_0, \Delta_0, X_1, \Delta_1, \ldots, X_t)$ とする. 任意の $i, j \in S, a \in A$ に対して

(9.1) $$N_T(j|i, aH_T) := \sum_{t=0}^{T-1} I_{\{X_t=i, \Delta_t=a, X_{t+1}=j\}} \ (T \geqq 1)$$

とおく. 各 $i \in S, a \in A$ に対して, 多項分布の生起確率 $\{p_j = p_{ij}(a),\ (1 \leqq j \leqq n)\}$ に対する観測値 $\{N_T(j|i, a, H_T,\ 1 \leqq j \leqq n\}$ によるベイズ区間を $[\underline{q}_{ij}(a|H_T), \overline{q}_{ij}(a|H_T)]$ とする.

(9.2) $$\underline{Q}(H_T) := (\underline{q}_{ij}(a|H_T) :\ i, j \in S, a \in A) \in \mathbb{R}_+^{n\times nk}$$

(9.3) $$\overline{Q}(H_T) := (\overline{q}_{ij}(a|H_T) :\ i, j \in S, a \in A) \in \mathbb{R}_+^{n\times nk}$$

として,

(9.4) $$\mathcal{Q}(H_T) = \langle \underline{Q}(H_T), \overline{Q}(H_T) \rangle$$

とする.

$Q \in P(S|S \times A)$ に対して, MDPs$\{Q\}$ を事前情報 H_T の区間ベイズ $\mathcal{Q}(H_T)$ で推定した MDPs を区間ベイズ推定 MDPs$\{\mathcal{Q}(H_T)\}$ と言う.

(9.5) $$N_T(i, a|H_T) := \sum_{j\in S} N_T(j|i, a, H_T) \ (i \in S, a \in A)$$

とおく.

区間ベイズの性質 ([De Robertis & Hartigan 1981]) および定理 9.1 を用いて次の結果を得る.

Theorem 9.2. $\{X_0, \Delta 0, X_1, \Delta 1, \ldots\}$ を *MDPs*$\{Q\}$ からの過程とする. 任意の $i \in S, a \in A$ に対して, 確率 *1* で

$$N_T(i, a|H_T) \to \infty \ (T \to \infty)$$

とする. このとき, 確率 1 で区間ベイズ推定 MDPs$\{\mathcal{Q}(H_T)\}$ は MDPs$\{Q\}$ に収束する, すなわち, 次が成り立つ.

(i) $\mathcal{Q}(H_T) \to \{Q\} \ (T \to \infty)$

(ii) $\phi(f|\mathcal{Q}(H_T)) \to \phi(f|Q) \ (T \to \infty), \ (f \in F)$

References

De Robertis, L. & Hartigan, J. A. [1981], ‘Bayesian inference using intervals of measures’, *Ann. Statist.* **9**(2), 235–244.

Doshi, B. & Shreve, S. E. [1980], ‘Strong consistency of a modified maximum likelihood estimator for controlled Markov chains’, *J. Appl. Probab.* **17**(3), 726–734.

Furukawa, N. [1980], ‘Characterization of optimal policies in vector-valued Markovian decision processes’, *Math. Oper. Res.* **5**(2), 271–279.

Hartfiel, D. J. [1998], *Markov set-chains*, Vol. 1695 of *Lecture Notes in Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin.

Hernández-Lerma, O. [1989], *Adaptive Markov control processes*, Vol. 79 of *Applied Mathematical Sciences*, Springer-Verlag, New York.

Iki, T., Horiguchi, M., Yasuda, M. & Kurano, M. [2007], ‘A learning algorithm for communicating markov decision processes with unknown transition matrices.’, *Bulletin of Informatics and Cybernetics* **39**, 11–24.

Kurano, M., Song, J., Hosaka, M. & Huang, Y. [1998], ‘Controlled Markov set-chains with discounting’, *J. Appl. Probab.* **35**(2), 293–302.

Kurano, M., Yasuda, M. & Nakagami, J.-i. [2002], Interval methods for uncertain Markov decision processes, *in* ‘Markov processes and controlled Markov chains (Changsha, 1999)’, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, pp. 223–232.

Kuratowski, K. [1966], *Topology. Vol. I*, New edition, revised and augmented. Translated from the French by J. Jaworowski, Academic Press, New York.

Mandl, P. [1974], ‘Estimation and control in Markov chains’, *Advances in Appl. Probability* **6**, 40–60.

Martin, J. J. [1967], *Bayesian decision problems and Markov chains*, Publications in Operations Research, No. 13, John Wiley & Sons Inc., New York.

Puterman, M. L. [1994], *Markov decision processes: discrete stochastic dynamic programming*, John Wiley & Sons Inc., New York. A Wiley-Interscience Publication.

Solan, E. [2003], 'Continuity of the value of competitive Markov decision processes', *J. Theoret. Probab.* **16**(4), 831–845 (2004).

van Hee, K. M. [1978], *Bayesian control of Markov chains*, Vol. 95 of *Mathematical Centre Tracts*, Mathematisch Centrum, Amsterdam.