

令和元年6月20日現在

機関番号：62603

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K16131

研究課題名(和文)非凸スパース正則化の統計力学による解析

研究課題名(英文)Statistical Mechanical Analysis of non convex sparse penalty

研究代表者

坂田 綾香 (Sakata, Ayaka)

統計数理研究所・数理・推論研究系・助教

研究者番号：80733071

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：非凸正則化を用いたスパース推定は、凸正則化を用いたスパース推定よりも高い圧縮性能を与えることが示唆されている。しかし、パラメータ値によっては局所解が多数出現する難しさがある。そこで、局所解が出現する条件を理論的に導出し、また大域的安定解が存在する領域で効率的に推定問題を解く方法が求められてきた。本研究では、統計力学の手法を用いて、局所解が多数出現するパラメータ領域を特定した。また確率伝搬法と呼ばれるアルゴリズムを用いて、非凸正則化付きの推定問題を凸正則化と同じ計算コストで解くことができることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

非凸正則化は高いポテンシャルを持つものの、数学的に扱いにくいという問題点があった。本研究では、その数学的困難を統計力学的手法により解決し、凸正則化と同様に扱うことができる条件を特定した。また、収束条件を導出することができる確率伝搬法を非凸正則化に導入したことで、適切な正則化パラメータの選び方が明らかになった。また低コストで予測誤差を評価することが可能となり、予測に基づくモデリング方法も整った。これらの研究結果は、非凸正則化を用いた新しい推定方法を広く利用可能とするものであり、データ駆動科学に大きく貢献すると考える。

研究成果の概要(英文)：It has been implied that sparse estimation based on nonconvex penalties leads high compression performance compared with that based on convex penalties. However, the nonconvex penalties provide lots of local minima depending on the values of regularization parameters. Mathematical methods that derive the condition for the appearance of local minima and algorithms to solve problems penalized by nonconvex penalty are required. In this study, we identified the parameter regions where the local minima appear based on the statistical mechanical method. Further, we show that the estimation problems with nonconvex penalties can be solved with the same computational cost as convex penalties. In addition, we proposed model selection methods.

研究分野：統計科学、統計物理

キーワード：スパース推定 非凸正則化 統計物理

1. 研究開始当初の背景

L1 正則化に代表されるスパース正則化を用いたスパース推定は、近年盛んに研究されている。L1 正則化は非常に扱いやすい推定の枠組みを与えるが、推定値に偏りを生じさせてしまう。非凸型スパース正則化はこの欠点を補うが、従来の凸最適化手法をそのまま適用することが困難であり、また応用上重要なモデル選択規準も明確ではなかった。

2. 研究の目的

既存研究から、非凸スパース正則化によるスパース推定の有効性が示唆されているが、その解析方法、実用的アルゴリズム、モデル選択規準の一般的な表現が存在しないために応用に結びついていない。そこで本研究では、(1) 非凸スパース正則化の理論解析 (2) 非凸スパース正則化に対するアルゴリズム開発 (3) スパース推定における情報量規準の導出 という3点の研究を達成することで、非凸スパース正則化を実用可能な手法として確立することを目標とする。

3. 研究の方法

従来法では困難であった非凸スパース正則化の理論解析に対して、統計力学的手法を導入することが本研究の特徴である。

非凸スパース正則化の理論解析については、スパース推定の難しさを特徴づける **de Almeida-Thouless (AT)**安定性の存在を明らかにすることを中心に、理論解析を行う。この研究は、統計力学において発展してきたレプリカ法と呼ばれる解析方法を用いて行う。アルゴリズム開発については、AT 安定性が存在するパラメータ領域で動作する **BP** アルゴリズムの構成を目指す。そして非凸スパース正則化を実問題に適用するために必要な、情報量規準の導出については、**BP** アルゴリズムの固定点における性質を利用する。

4. 研究成果

(1) **SCAD**、**MCP** と呼ばれる非凸スパース正則化において **AT** 安定性条件を導出し、**AT** 安定性が存在するパラメータ領域を特定した。そして **AT** 安定性が存在するパラメータ領域で、非凸スパース正則化の推定性能の理論予測を与え、L1 正則化と性能を比較した。

(2) 確率的推定アルゴリズムである確率伝搬法を非凸スパース正則化に適用した。アルゴリズム性能の解析の結果、確率伝搬法が収束しなくなるパラメータ領域が存在することが発見された。更に、導出された確率伝搬法の収束条件は、レプリカ法により導出される **AT** 安定性条件と一致することを示した。また既存のアルゴリズムである **coordinate descent** 法と比較した結果、確率伝搬法の収束する範囲内で **coordinate descent** も大域的安定解に収束することがわかった。**coordinate descent** については、先行研究で収束のための十分条件が導出されていたが、本研究で得られた収束条件の方がよりタイトであり、システムサイズ無限大の極限で数値実験と一致している。以上の結果から、精度良い収束条件を持った、効率的なアルゴリズムが非凸スパース正則化に対して提案できた。

(3) 確率伝搬法を用いて、予測誤差の推定量を構成する方法を提案した。一般に、**AIC** は正則化が存在するときは予測誤差の不偏推定量とはならないため、別の推定量を構成する必要がある。我々は **Mallows' Cp** から出発し、一般化自由度と呼ばれる量の推定量を確率伝搬法の固定点から導出する方法を開発した。この確率伝搬法に基づく推定量は、説明変数とデータの各成分が独立にガウス分布に従う場合は、不偏性を持つことが数学的に示される。しかし一般のデータでは必ずしも成り立たないため、我々は説明変数の相関を考慮した補正方法を提案した。これにより、確率伝搬法を用いて **AIC** より良い予測誤差の推定量を構成することに成功した。

(4) 非凸正則化を圧縮センシングに適用した。ベイズ推定や L1 正則化を用いた方法と比較した結果、これら手法より高い信号復元性能を示すことが明らかとなった。その信号復元を実際に成功させるアルゴリズムを、確率伝搬法により構成した。さらに、非凸正則化に含まれるパラメータを減少させながら推定することで、推定性能が大きく改善されることも示した。一方で、要求される計算量は L1 などの凸関数を正則化とした場合と変わらない。これらの結果は、実問題における非凸正則化の有用性を示すものである。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 3 件)

1. Ayaka Sakata (査読あり)

“Estimator of prediction error based on approximate message passing for penalized linear regression”

Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, vol. 2018, pp. 063404-1--24 (2018)

2. Ayaka Sakata and Yingying Xu (査読あり)

“Approximate message passing for nonconvex sparse regularization with stability and asymptotic analysis”

Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, vol. 2018, pp. 033404-1--35 (2018)

3. Ayaka Sakata (査読あり)

“Evaluation of Generalized Degrees of Freedom for sparse estimation by replica method”

Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, vol.2016, pp. 123302-1--29 (2016)

[学会発表] (計 12 件)

1. Tomoyuki Obuchi and Ayaka Sakata

「Cross validation in sparse linear regression with piecewise nonconvex penalties and its acceleration」

The 4th ISM-ZIB-IMI workshop on mathematical optimization and data analysis, 2019 年 3 月

2. 坂田綾香、小淵智之「非凸性制御下での非凸制約最小化による信号復元」

最適化：モデリングとアルゴリズム 2019 年 3 月

3. 坂田綾香「スパース推定におけるモデル選択規準」

SITA2018、2018 年 12 月

4. 坂田綾香、小淵智之「Model selection under SCAD and MCP based on approximate message passing」

2018 年度統計関連学会連合大会 2018 年 9 月

5. 坂田綾香、小淵智之「非凸正則化付き線形回帰における復号性能」

日本物理学会 2018 年秋季大会 2018 年 9 月

6. 坂田綾香「非凸スパース正則化に対する確率伝搬法と収束条件」

日本物理学会第 73 回年次大会 2018 年 3 月

7. Ayaka Sakata 「Approximate message passing for nonconvex sparse regularization and its convergence condition」

ISI-ISM-ISSAS joint conference (統計数理研究所) 2017 年 12 月

8. 坂田綾香「非凸スパース正則化における確率伝搬法とその収束条件」

IBIS2017(東京大学) 2017 年 11 月

9. 坂田綾香「L1 正則化における AIC のブートストラップ補正と分布の評価」

日本物理学会(岩手大学) 2017 年 9 月

10. 坂田綾香「Fluctuation of AIC in LASSO and its approximation by bootstrap method」

統計関連学会連合大会 2017 年 9 月

11. 坂田綾香「LASSO における AIC の揺らぎ」日本物理学会(大阪大学) 2017 年 3 月

12. 坂田綾香「スパース正則化におけるモデル選択規準の評価」

日本物理学会(金沢大学) 2016 年 9 月

6. 研究組織

(1) 研究分担者：なし

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：Yingying Xu、小渕智之

ローマ字氏名：Yingying Xu、Tomoyuki Obuchi

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。