

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 4 月 13 日現在

機関番号：62603

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2014～2015

課題番号：26880028

研究課題名(和文) 行列分解・非線形行列分解の統計力学とオートエンコーダの理論解析

研究課題名(英文) Statistical mechanics of linear and non-linear matrix factorization and a theoretical analysis of auto encoder

研究代表者

坂田 綾香 (Sakata, Ayaka)

統計数理研究所・大学共同利用機関等の部局等・助教

研究者番号：80733071

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：一般の行列分解に対してアルゴリズムを構成し、カーネル関数を含むよう拡張する方法を提案した。これにより、低ランク近似やオートエンコーダを含む、行列分解として表せる問題に対してのアルゴリズムを開発することに成功した。いくつかの例題においては、既存手法より良い結果を示すことを明らかにした。

また圧縮センシングにおけるL0, L1再構成条件を与える制限等長定数の新しい評価方法を提案した。レプリカ対称性と呼ばれる統計力学的仮定の下で制限等長定数を評価した結果、既存の研究よりも精度のよいバウンドを与えた。さらにレプリカ対称性の破れの考慮により精度が改善されることを示した。

研究成果の概要(英文)： We developed a matrix factorization algorithm that is applicable to the matrix factorization associated with kernel method. This algorithm can cover broad range of the matrix factorization problems. Our algorithm performs well in some problems compared with existing algorithms.

We developed a method for evaluating restricted isometry constant (RIC) that is a key constant for the identification of the reconstruction condition of L0 and L1 method in compressed sensing. Under the replica symmetric assumption, we derived a tighter bound of RIC than previous results. Furthermore, we found that the consideration of the replica symmetry breaking improves the estimation of the bound.

研究分野：情報科学、統計力学

キーワード：スパース性 行列分解 レプリカ法

1. 研究開始当初の背景

① 行列分解

行列分解とは、特異値分解や LU 分解のように、与えられた行列を複数の行列の積として表現する問題の総称である。近年は信号処理における実的要請から、様々な拘束条件を課した行列分解問題が議論されている。例えば、行列要素が全て非負という制約下での行列分解は、スペクトル解析に応用されている[M. W. Berry et al., *Comput. Stat. Data Anal.* (2006)]。また以下の②、③の問題も行列分解問題として解釈することができる。

② 低ランク近似

行列分解を利用することで、行列として表現したデータの近似表現を得ることができる。例えば、データ行列に対して特異値分解を適用し、特異値の上位数個と対応する特異ベクトルから行列を再構成することで、データを近似する方法が挙げられる[Eckart and Young, *Psychometrika* (1936)]。これは低ランク近似に対応し、データが冗長な場合は良い近似となる [Markovsky, Springer (2012)]。しかし、近似行列のランクと近似性能の関係性や、低ランク近似に用いるアルゴリズムの性能について、理論的研究は整備されていない。

③ オートエンコーダ

オートエンコーダとは、入力 X に対する中間層出力を $h = f(X)$ とし、さらに中間層出力に対する出力を $Y = g(h) = g(f(X))$ とし、出力 $g(f(X))$ が入力 X に近づくように関数 f, g のパラメータを設計したニューラルネットワークである。オートエンコーダを繋げた多層ニューラルネットワークが画像認識において優れた性能を示し、またオートエンコーダ自体も言語学習などにおいて良い性能を示すため、オートエンコーダは大きな注目を集めている[Hinton et al., *Neural Comput.* (2006)]。しかし理論的研究は今後の課題であり、性能の理論的裏付けを得ることで更なる実用に繋がると期待される。

④ カーネル法

何らかの規則性を引き出すことを目的に実データに行列分解を適用する場合、データに対して線形性を仮定していることになる。データに非線形性が存在する場合、この仮定は適切でない。データの非線形性を考慮するには、非線形写像 Φ をデータに適用して特徴空間と呼ばれる空間にマップし、特徴空間上でのデータ表現に対して線形解析を行う方法が有効である。しかし適切な写像 Φ は一般的には未知であるため、対称半正定値行列であるカーネル行列 K を定義し、 $K = \Phi^T \Phi$ として写像 Φ を与える。これはカーネル法と呼ばれ、機械学習の基本的な手法である。

⑤ 圧縮センシングにおける制限等長性

対象とする信号がゼロ成分を多く持つという性質をスパース性と呼ぶ。スパース性を利用した効率的信号処理の枠組みである圧縮センシングでは、対象とする信号がスパース性を持つという事前知識を利用して、少ない観測からデータを復元する。よって従来手法よりも少ない観測数からデータを復元できるため、様々な問題に応用されている。

線形変換として観測を表現した際、復元において利用される L_0, L_1 再構成法の完全復元条件を与えるのが制限等長性である。制限等長性は制限等長定数と呼ばれる、観測行列から構成した小行列の最小・最大固有値から決まる定数により特徴づけられる。制限等長定数の評価はこれまで大偏差理論を用いて行われてきたが、実際の値とは大きくずれているのが現状である。

⑥ 研究代表者の研究背景

研究代表者は行列分解問題の一つである dictionary learning (DL) について研究してきた。既存研究では、発見法的にアルゴリズムを構成し、その性能を実験的に評価する方策がとられてきたが、申請者は統計力学の方法に基づき理論的性能評価を可能にする枠組みを与えた。その結果、DL の典型性能を評価することに成功した。

この DL における研究経験から、一般の行列分解問題に対して同様の研究を進展させることが可能であると確信した。更に低ランク近似とオートエンコーダ、カーネル法の間には共有される背景を合わせると、近年の情報科学における話題を包含する研究が展開できると考えた。この着眼点に基づく理論研究を行うことは、工学的応用に対する基礎理論を進展させ、実用的アルゴリズムの開発に繋がると考え、本研究計画の着想に至った。

2. 研究の目的

① 行列分解問題について、統計力学的アプローチにより統一的理論を構成し、物理的描像を明らかにすることを目標とする。そして行列分解とカーネル法を組み合わせた非線形行列分解を提案し、オートエンコーダの性能解析に応用する。様々な行列分解問題に適用可能なアルゴリズムを開発することで、情報科学における様々な問題群の統一的な理解につなげる。

② 既存の制限等長定数評価手法より精度の良い手法を開発する。制限等長定数を精度よく見積もることは、 L_0, L_1 再構成可能領域を精度よく予測できることにつながる。このことは、実用に耐えうる観測・再構成のパラメータ領域を特定する指針となるため、重要な研究課題である。

3. 研究の方法

① Belief Propagation アルゴリズムの構成

Belief propagation アルゴリズムとは、確率的推定を近似的に行う手法である。一般に、多体相互作用系において一変数の一体分布関数を近似的に導出する。その近似方法は、系のグラフ構造を局所的にツリー構造として近似したことに対応しているため、系が多量のループ構造を含む場合、厳密な答えは得られない。しかし近似としては有用であり、実際に様々な推定問題において使われている。そこで行列分解問題に対して belief propagation アルゴリズムを構成して解析を行う。

② レプリカ法に基づく解析

レプリカ法とは、系が持つランダムネスを統計処理する際に用いられる手法である。もともとはランダムネスを持つ磁性体模型であるスピングラスにおいて開発された手法であったが、その数学的類似性から、近年は情報科学の問題に対して応用されている。

制限等長定数評価においても、観測行列についてランダムネスが存在するため、典型性能を評価する上でレプリカ法が有用であると考えられる。またレプリカ法は、現象の相転移構造を反映しているため、物理的な理解を得るうえでも有用である。

4. 研究成果

① 行列分解アルゴリズムの提案

一般の行列分解に対して Belief propagation アルゴリズムを構成し、さらにカーネル関数を含む場合に拡張する方法を提案した。これにより、低ランク近似やオートエンコーダを含む、行列分解として表せる問題に対してのアルゴリズムを提案することに成功した。いくつかの例題においては、既存手法より良い結果を示すことを明らかにした。カーネル法を組み合わせることで、より複雑な構造を持つデータに対しても適用可能なアルゴリズムを提案することができたと考える。

以上の研究内容の一部は、雑誌論文②にまとめられている。また学会発表①-④、⑩において研究報告を行った。

② 制限等長定数の評価

制限等長定数評価において問題となるのは、最大・最小固有値の解析的な取り扱いである。この困難が統計力学的手法により解消されることに着目し、制限等長定数評価の新しい枠組みを提案することに成功した。

まずはレプリカ対称性と呼ばれる統計力学的仮定の下で制限等長定数を評価した。その結果、既存の研究よりも精度のよいバウンドを与えた。ここまでの研究結果をまとめた論文は、平成 27 年に開催された国際会議「IEEE International Symposium on Information Theory」に採択され、香港にて発表を行った(雑誌論文①、学会発表⑤-⑦)。

更にレプリカ対称性の破れ(RSB)を考慮した解析を行った。一般的に、RSB を考慮することでバウンド評価がより精密になると考えられる。制限等長定数を評価するためには、ランダム行列から生成した小行列の最小・最大固有値を評価することが必要である。RSB には、主に「1 step RSB」と「Full step RSB」と呼ばれるものが存在するが、ガウス型ランダム行列については、最小固有値評価においては 1 step RSB が、最大固有値評価においては Full step RSB が起こることが明らかとなった。1 step RSB、Full step RSB は異なる物理的背景に基づく相転移であり、本研究は最小・最大固有値の評価がそれぞれ異なる相転移描像を持つことを指摘し、その違いを考慮したうえで制限等長定数を評価することが重要であることを示した。以上の研究成果は、論文として執筆中であり、また学会発表⑧、⑨において報告した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

① Ayaka Sakata and Yoshiyuki Kabashima,

“Replica Symmetric Bound for Restricted Isometry Constant”,

IEEE International Symposium on Information Theory Proceedings, 2006-2010 (2015)

DOI: 10.1109/ISIT.2015.7282807

② Yoshiyuki Kabashima, Florent Krzakala,

Marc Mézard, Ayaka Sakata and Lenka

Zdeborová,

"Phase transitions and sample complexity in Bayes-optimal matrix factorization",

<http://arxiv.org/abs/1402.1298>

IEEE Transactions on Information Theory に掲載決定

③ Ayaka Sakata

"Evaluation of Generalized Degrees of Freedom for Sparse Estimation by Replica Method",

<http://arxiv.org/abs/1602.06506>

Journal of Statistical Mechanics に投稿中

[学会発表] (計 12 件)

① 坂田綾香, 樺島祥介

「統計力学的アルゴリズムによる非線形疎性の抽出」

日本物理学会 2014 年秋季大会,
2014 年 9 月 7 日, 中部大学(愛知県春日井市)

② [Ayaka Sakata](#) and Yoshiyuki Kabashima
“Sample Complexity and Belief Propagation in
Dictionary Learning”
Collective Dynamics in Information Science
2014 年 10 月 27 日,
Kavli Institute for Theoretical Physics China,
Beijing (Beijing, China)

③ 坂田綾香, 樺島祥介
「統計力学的貪欲法による特徴空間のスパ
ース表現」
第 17 回情報論的学習理論ワークショップ
(IBIS2014), 2014 年 11 月 18 日,
名古屋大学(愛知県名古屋市)

④ 坂田綾香, 樺島祥介
「統計力学的アルゴリズムによる特徴空間
のスパース表現」
第 37 回情報理論とその応用シンポジウム
(SITA2014), 2014 年 12 月 10 日,
宇奈月ニューオータニホテル(富山県黒部市)

⑤ 坂田綾香, 樺島祥介
「レプリカ法による制限等長定数の評価」
日本物理学会第 70 回年次大会
2015 年 3 月 24 日, 早稲田大学(東京都新宿区)

⑥ [Ayaka Sakata](#) and Yoshiyuki Kabashima
“Replica Symmetric Bound for Restricted
Isometry Constant”
IEEE International Symposium on Information
Theory, 2015 年 6 月 18 日
Hong Kong Convention and Exhibition Centre
(Hong Kong, China)

⑦ [Ayaka Sakata](#)
“Replica Symmetric Bound for Restricted
Isometry Constant”,
Machine Learning Summer School,
2015 年 8 月 27 日, Kyoto University (Kyoto,
Japan)

⑧ 坂田綾香, 樺島祥介
「制限等長定数評価における RSB 転移」

日本物理学会 2015 年秋季大会,
2015 年 9 月 19 日, 関西大学(大阪府吹田市)

⑨ 坂田綾香, 樺島祥介
「レプリカ法による制限等長定数の評価」
第 38 回情報理論とその応用シンポジウム
(SITA 2015), 2015 年 11 月 25 日
下電ホテル(岡山県倉敷市),

⑩ 坂田綾香, 樺島祥介
「スパース表現を探る—辞書学習における
サンプル複雑度とアルゴリズム—」
第 38 回情報理論とその応用シンポジウム
(SITA 2015), 2015 年 11 月 25 日
下電ホテル(岡山県倉敷市),

⑪ 坂田綾香
「一般化自由度評価と SCAD 正則化のレプリ
カ解析」
スパース推定と情報量規準, 2016 年 1 月 7 日
統計数理研究所(東京都立川市)

⑫ [Ayaka Sakata](#)
“Estimation of generalized degrees of freedom
for sparse regularization”,
Statistical Physics of Disordered Systems and Its
Applications (SPDSA 2016), 2016 年 1 月 28 日
Hotel Sakan (Sendai, Japan)

[図書] (計 1 件)

① Rafah El-Khatib, Jean Barbier, [Ayaka Sakata](#)
and Rüdiger Urbanke,
"Error correcting codes and spatial coupling",
Chapter of "Statistical Physics, Optimization,
Inference, and Message-Passing Algorithms",
Eds.: F. Krzakala, F. Ricci-Tersenghi, L.
Zdeborová, R. Zecchina, E. W. Tramel, L. F.
Cugliandolo (Oxford University Press, 2016)

6. 研究組織
(1) 研究代表者
坂田 綾香 (SAKATA, Ayaka)
統計数理研究所・モデリング研究系・助教
研究者番号: 80733071