スパース正則化における一般化自由度評価

坂田 綾香 モデリング研究系 助教

【スパース推定】

正則化付き二乗誤差最小化

$$\hat{\boldsymbol{x}}_\eta(\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}) = \min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 + r(\boldsymbol{x};\eta)$$

- $\boldsymbol{y} \in R^M$: データベクトル
- $\boldsymbol{A} \in R^{M\times N}$: 説明変数
- $\boldsymbol{x} \in R^N$: 回帰係数
- $\alpha = M/N$, $\hat{\boldsymbol{x}}$の非ゼロ要素数$/M = \delta$
- $r(\boldsymbol{x};\eta)$: スパース正則化
- η: 正則化パラメータ(スパース度をコントロールする)

正則化パラメータにより異なるスパース表現$\hat{\boldsymbol{x}}_\eta$が得られる。

それを用いたデータ表現を$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}_\eta$とする。

正則化パラメータをどのように選ぶか → モデル選択

【Mallows' Cpによるモデル選択】

$y_\mu \sim N(\mu_y, \sigma_y^2)$の場合の 予測誤差の不偏推定量

(二乗誤差最小化問題の場合はAICと等価)

$$c_p(\boldsymbol{y}) = \mathrm{err}_{\mathrm{train}}(\boldsymbol{y}) + 2\sigma_y^2\widehat{\mathrm{df}}(\boldsymbol{y})$$

- $\widehat{\mathrm{df}} = \mathrm{cov}[\boldsymbol{y},\hat{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{y})]/(2M\sigma_y^2)$ を一般化自由度と呼ぶ。
- 訓練誤差: $\mathrm{err}_{\mathrm{train}} = \frac{1}{M}\|\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{y})\|_2^2$
- 予測誤差: $\mathrm{err}_{\mathrm{pre}} = \frac{1}{M}E_{\boldsymbol{w}}[\|\boldsymbol{w}-\hat{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{y})\|_2^2]$, $w_\mu \sim N(\mu_y,\sigma_y^2)$

一般化自由度が評価できれば、モデル選択基準が得られる。

既存研究ではℓ_1正則化、elastic net 正則化について評価されている。

→ 一般のスパース正則化に適用可能な枠組みを提案したい。

【レプリカ法による一般化自由度の評価】

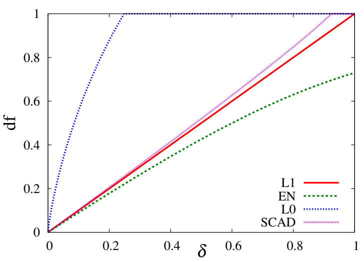
- 解析方法は参考文献参照
- 利点：一般のスパース正則化に適用可能。
- 欠点：解析の際に仮定をおく必要がある。
  (レプリカ対称性仮定など)

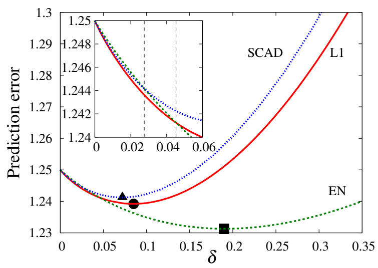
レプリカ対称性仮定下での一般化自由度の表現

- $A_{\mu i} \sim N(0, M^{-1})$の場合

$$\mathrm{df} = \frac{\text{推定値周辺の揺らぎ}}{\text{非ゼロ成分の揺らぎ}}$$

ℓ_1正則化、elastic net 正則化の先行研究の結果と一致する。





(左) ℓ_1正則化(L1), elastic net 正則化(EN), ℓ_0正則化(L0), SCAD正則化における一般化自由度のδ依存性。$\alpha = 0.5, \mu_y = 0, \sigma_y^2 = 1$とした。
(右) 予測誤差(c_pの期待値)のδ依存性。$\alpha = 0.5, \mu_y = 0.5, \sigma_y^2 = 1$とした。

任意のデータ$\boldsymbol{y}$, 説明変数$\boldsymbol{A}$について一般化自由度を評価するには数値的手法が有用。しかし非凸正則化における評価は一般的に困難。

- SCAD正則化では、レプリカ対称性が存在する領域で Approximate Message Passing(AMP)による一般化自由度評価が可能。

SCAD正則化：
$$r(x;\eta) = \begin{cases} \eta\lambda|x|, & \text{for } |x| \le \lambda \\ -\eta\left\{\frac{x^2-2a\lambda|x|+\lambda^2}{2(a-1)}\right\}, & \text{for } \lambda < |x| \le a\lambda \\ \frac{\eta(a+1)\lambda^2}{2}, & \text{for } |x| > a\lambda \end{cases}$$

【SCAD正則化に対するAMPアルゴリズム】

- ステップtでのi番目要素の推定値を$x_i^{(t)}$とする。
- ステップtでのデータ表現を$\hat{\boldsymbol{y}}^{(t)} = \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}^{(t)}$とする。

$$h_i^{(t)} = \hat{x}_i^{(t-1)}\sum_{\mu=1}^{M}\frac{A_{\mu i}^2}{1+\sigma_\mu^{(t-1)^2}} + \sum_{\mu=1}^{M}A_{\mu i}R_\mu^{(t-1)}$$

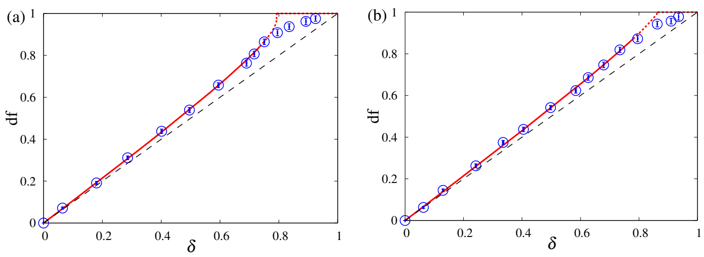
$$\hat{Q}_i^{(t)} = \sum_{\mu=1}^{M}\frac{A_{\mu i}^2}{1+\sigma_\mu^{(t-1)^2}}$$

$$\hat{x}_i^{(t)} = \begin{cases} \dfrac{h_i^{(t)} - \lambda\eta\,\mathrm{sgn}\left(h_i^{(t)}\right)}{\hat{Q}_i^{(t)}}, & \text{for } \lambda\eta < \left|h_i^{(t)}\right| \le \lambda\left(\hat{Q}_i^{(t)}+\eta\right) \\ \dfrac{h_i^{(t)}(a-1) - a\lambda\,\mathrm{sgn}\left(h_i^{(t)}\right)}{\hat{Q}_i^{(t)}(a-1)-\eta}, & \text{for } \lambda\left(\hat{Q}_i^{(t)}+\eta\right) < \left|h_i^{(t)}\right| \le a\lambda\hat{Q}_i^{(t)} \\ \dfrac{h_i^{(t)}}{\hat{Q}_i^{(t)}}, & for\ \left|h_i^{(t)}\right| > a\lambda\hat{Q}_i^{(t)} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

ここで

$$R_\mu^{(t)} = \frac{y_\mu - \hat{y}_\mu^{(t)}}{1+\sigma_\mu^{(t)^2}}, \qquad \sigma_\mu^{(t)^2} = \sum_{i=1}^{N}A_{\mu i}^2 v_i^{(t)}$$

$$v_i^{(t)} = \begin{cases} \hat{Q}_i^{(t)^{-1}}, & \text{for } \lambda\eta < \left|h_i^{(t)}\right| \le \lambda\left(\hat{Q}_i^{(t)}+\eta\right) \text{ and } \left|h_i^{(t)}\right| > a\lambda\hat{Q}_i^{(t)} \\ \left(\hat{Q}_i^{(t)} - \dfrac{\eta}{a-1}\right)^{-1}, & \text{for } \lambda\left(\hat{Q}_i^{(t)}+\eta\right) < \left|h_i^{(t)}\right| \le a\lambda\hat{Q}_i^{(t)} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$



AMPによるSCAD正則化の一般化自由度の評価。
線はRS仮定による理論曲線を意味し、点線部分はRSB領域である。
○はAMPの結果で、$N = 200$で100通りの$\{\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\}$について平均化した。
(a) $\alpha = 0.5$, $a = 5$, $\lambda = 1$, (b) $\alpha = 0.8$, $a = 8$, $\lambda = 0.7$

【参考文献】

Ayaka Sakata
"Evaluation of Generalized Degrees of Freedom for Sparse Estimation by Replica Method", arXiv:1602.06506