

An integrated perspective of robustness in regression through the lens of the bias-variance trade-off

(arXiv: 2407.10418)

奥野彰文 (統数研, 理研AIP)

<https://okuno.net/>

1. 研究背景

手法研究において、「ロバストネス (頑健性)」という言葉聞いたとき何を連想するだろうか？

統計学分野においては、外れ値に対するロバストネスを連想する人が多いだろう。一方で、最適化分野で良く用いられる「ロバスト最適化」は観測値の仮想的な摂動を考え、その摂動が結果に及ぼす影響を考慮している。本研究では、これら発想が異なるロバストネスは本質的に同じものであるのか、または異なるのか、それぞれどのような関係性を持つのかについて俯瞰的に議論する。

2. ロバストネスの対象と実装

本研究では、手法のロバストネスを以下の3つに分類する。

1. 外れ値へのロバストネス：

観測値に、典型的なパターンから外れた値 (外れ値) が含まれるとき、推定に強い悪影響を与えうる。外れ値ロバストネスは主に統計学分野で盛んに研究されている。

2. 入力の摂動へのロバストネス：

予測モデルの入力にノイズが含まれていると考え、入力に仮想的な摂動を加えた場合の最悪ケースを最適化することで、データが多少間違っても必ず動作するよう予測を実現する。最適化分野で盛んに研究されている。
(*敵対的学習などもこの枠組みに含まれる)

3. モデルの誤特定へのロバストネス：

真の関数が予測モデルに含まれていない場合においても正しい予測が行われるかを考える。例えば、多くのバイアス補正法はモデル誤特定時にむしろバイアスを悪化させることがありうる。

3.はニューラルネットなど万能近似能力を持つモデルを利用することによって解決しうるので、本研究では特に1.と2.の関係性を考える。(1.-3.をすべて達成する統計的推定については Okuno and Yagishita, arXiv:2308.02293)

2. OptimismとPessimism

本研究では、1.がOptimism, 2.がPessimismと呼ばれる概念と関係していて、それぞれ逆の関係性を持つことを示している。

2.1 Optimism

回帰の設定において、Covariate/Outcome Optimismを以下のように設定する。

$$X_{\alpha,\beta,\gamma,\tau}^{\min}(y, f_{\theta}(X)) := \min_{\Delta \in \mathbb{R}^{n \times d}} \{ \|y - f_{\theta}(X + \Delta)\|_2^2 + \tau^{-1} (\Delta)_{\alpha,\beta}^{\gamma} \},$$
$$Y_{\alpha,\gamma,\tau}^{\min}(y, f_{\theta}(X)) := \min_{\mu \in \mathbb{R}^n} \{ \|y + \mu - f_{\theta}(X)\|_2^2 + \tau^{-1} (\mu)_{\alpha}^{\gamma} \},$$

Optimismは、確率的に自然な解釈が可能である。例えばCovariate OptimismはErrors-in-variableの確率モデル

$$y | \tilde{X}, \theta \sim N_n(f_{\theta}(\tilde{X}), \frac{n}{2} I_n), \quad X | \tilde{X} \sim E_{\alpha,\beta,\gamma,\tau}(\tilde{X}),$$

を用いた最尤推定と等価である。

特に、Outcome optimistic regressionはHuber損失を利用した外れ値ロバスト回帰と等価であることが示されている (Gannaz, 2007)。

2.2 Pessimism

Minをmaxに差し替えると、Pessimismが定義できる。

$$X_{\alpha,\beta,\gamma,\tau}^{\max}(y, f_{\theta}(X)) := \max_{(\Delta)_{\alpha,\beta}^{\gamma} \leq \tau} \|y - f_{\theta}(X + \Delta)\|_2^2,$$
$$Y_{\alpha,\gamma,\tau}^{\max}(y, f_{\theta}(X)) := \max_{(\mu)_{\alpha}^{\gamma} \leq \tau} \|y + \mu - f_{\theta}(X)\|_2^2.$$

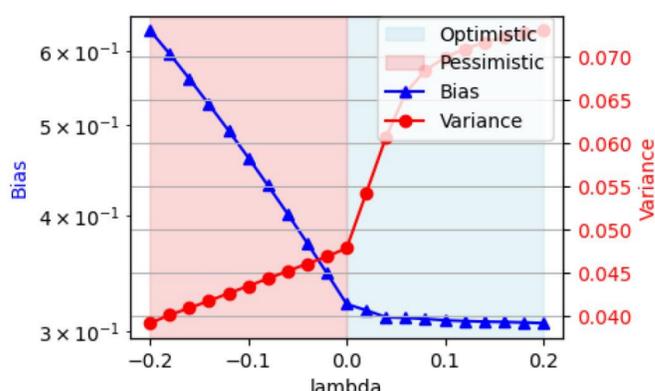
Pessimismはパラメータ正則化と強い関係を持つことが知られていて、特に線形回帰のときSquare-Lassoとの関係性が指摘されている (Ribeiro et al. 2023 など)。

非線形なモデルにおいては特に関数値の変動を正則化しているとみなせて、pessimismを導入することで、予測された関数の一様収束の最適性なども示される (Imaizumi 2023)。

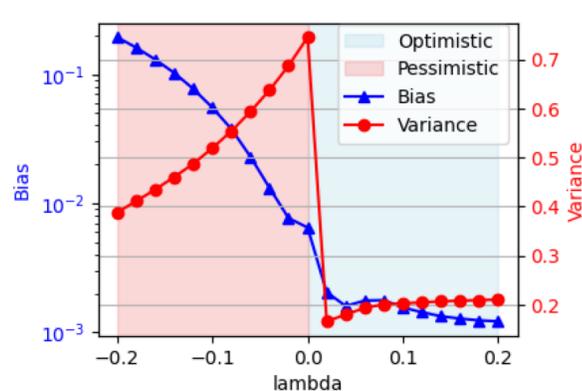
3. バイアスとバリエーションのトレードオフ

これまで説明した通り、外れ値ロバストネス (optimism) と 入力の摂動へのロバストネス (pessimism) は逆の関係を持っている。これらの方法はバイアス-バリエーションのトレードオフをもつ (下図)。

外れ値が含まれる場合、Optimismにより外れ値が無視されて、バイアスが急激に減少するが、一方でバイアス-バリエーションのトレードオフは引き続き発生する。



(a) 外れ値が含まれない



(b) 外れ値が含まれる