

凸計画問題を用いたカーネル多変量解析

-4.2 サポートベクトル回帰

-4.3 損失関数も最適化する： ν トリック

茨城大学工学部情報工学科
菊池裕紀

4.2 サポートベクトル回帰(1)

(a) 二乗誤差から ϵ -不感応関数へ

- ・ 回帰問題の場合

二乗誤差を区分線形関数の誤差にすることによってロバストでスパースな関数を得ることができる。

→ サポートベクトル回帰

目標値と関数の出力の差 $z = y - f(x)$ を二乗…

→ 最小二乗法

誤差

それを、区分線形関数に置き換えて考えてみる。

4.2 サポートベクトル回帰(2)

区分線形関数への置き換え

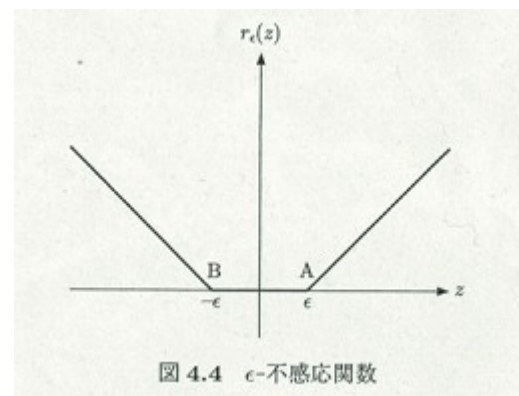
$$r_\varepsilon = \begin{cases} z - \varepsilon & (\varepsilon \leq z \text{ のとき}) \\ 0 & (-\varepsilon \leq z < \varepsilon \text{ のとき}) \\ -z - \varepsilon & (z < -\varepsilon \text{ のとき}) \end{cases}$$

- 特徴

ε 以下の誤差は損失に加えない。

二乗誤差に比べて損失の増え方が緩やか。

r_ε : ε -不感応関数



4.2 サポートベクトル回帰(3)

r_ε は 3 本の直線から構成されている。

→ 3 つの制約条件で損失関数を記述

$\xi_i = r_\varepsilon(y^{(i)} - f(\mathbf{x}^{(i)}))$ とおいたとき…

$$\left. \begin{array}{l} \xi_i \geq y^{(i)} - f(\mathbf{x}^{(i)}) - \varepsilon \\ \xi_i \geq 0 \\ \xi_i \geq -(y^{(i)} - f(\mathbf{x}^{(i)})) - \varepsilon \end{array} \right\} \text{同時に満たすものの最小値}$$

二次の正則化を入れて損失関数を書くと…

$$\min_{\xi, \alpha} \sum_{i=1}^n \xi_i + \lambda \alpha^T K \alpha$$

を制約下で解く。

(サポートベクトル回帰の凸二次計画問題としての表現)

4.2 サポートベクトル問題(4)

(b) 双対問題の導出

$\beta_i, \gamma_i^+, \gamma_i^-$: ラグランジュ乗数(3つの制約式に対応)

$$\begin{aligned} L(\xi, \alpha, \beta, \gamma^+, \gamma^-) = & \sum_{i=1}^n \xi_i + \frac{1}{2} \lambda \alpha^T K \alpha - \sum_{i=1}^n \beta_i \xi_i \\ & - \sum_{i=1}^n \gamma_i^+ (\xi_i + \varepsilon - y^{(i)} + \sum_{j=1}^n \alpha_j K_{ij}) \\ & - \sum_{i=1}^n \gamma_i^- (\xi_i + \varepsilon + y^{(i)} - \sum_{j=1}^n \alpha_j K_{ij}) \end{aligned}$$

α_i で微分して $\alpha_i = 1/\lambda (\gamma^+ - \gamma^-) \dots [1]$

4.2 サポートベクトル問題(5)

ξ_i に関しては、一次式より…係数は” 0 ”

$$1 - \beta_i - \gamma_i^+ - \gamma_i^- = 0 \quad \dots[2]$$

[1]、[2]式をLに代入すると…

$$\begin{aligned} L_{dual}(\gamma^+, \gamma^-) = & (-1/2\lambda) \sum_{i,j} (\gamma_i^+ - \gamma_i^-)(\gamma_j^+ - \gamma_j^-) K_{ij} \\ & - \sum_{i=1} \gamma_i^- (y_i + \varepsilon) - \sum_{i=1}^n \gamma_i^+ (-y_i + \varepsilon) \quad \dots[3] \end{aligned}$$

の**最大化問題**に帰着。

4.2 サポートベクトル問題(6)

[3]には β_i が依存しない…

→制約条件： $0 \leq \gamma_i^+ + \gamma_i^- \leq 1$ … [4]

結果、[3]を[4]の条件下で最大化

→ γ_i^+, γ_i^- を求める！

サポートベクトル回帰で求めたい

$$f(x) = \frac{1}{\lambda} \sum_{\mathbf{x}^{(i)} \in SV} (\gamma_i^+ - \gamma_i^-) k(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x})$$

を得る。

4.2 サポートベクトル問題(7)

(c) サポートベクトル回帰のスパース性

サポートベクトル回帰の場合

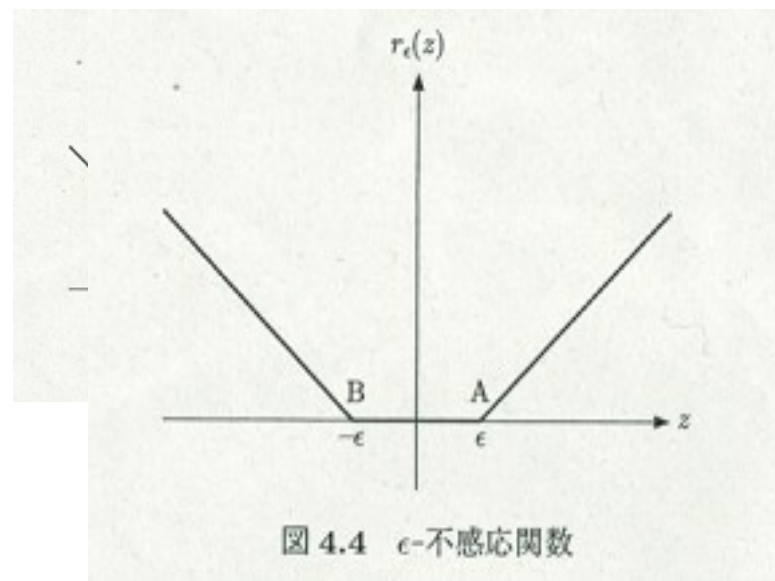
y_i^+, y_i^- のどちらかは必ず0になる。

→ 相補正条件から示す。

y_i^+ が 0 になる場合

y_i^- が 0 になる場合

y_i^+, y_i^- が 0 になる場合



4.2 サポートベクトル問題(8)

(d) 損失関数の一般化

\mathcal{Y}_{hinge} , \mathcal{Y}_ε 関数を使う代わりに → **2乗**を損失として使う

ここでは \mathcal{Y}_{hinge} に関して考える。

-スラック変数: $\xi_i = \mathcal{Y}_{hinge}(y^{(i)} f(\mathbf{x}^{(i)}))$
損失関数が増加

$$\rightarrow \min_{\xi, \alpha} \sum_{i=1}^n \xi_i^2 + \frac{\lambda}{2} \alpha^T K \alpha$$

凸2次計画問題

しかし、二乗しても誤識別関数に近づく訳ではない！
あまり意味が無い…

4.3 損失関数も最適化する： ν トリック(1)

(1) 区分線形関数の位置パラメータ

$$y_\rho(yf(\mathbf{x})) = \max\{0, \rho - yf(\mathbf{x})\}$$

→ サポートベクトルマシンの損失関数を平行移動したパラメータ $\rho > 0$ を持つ関数を誤差に

これは ρ が小さければ小さいほど誤差が 0 になる範囲が大きくなる。→ 自由に決めてはいけない！

防ぐために最適化関数に $-\rho$ に比例した罰金項を加えて ρ が小さくなりすぎないように！

4.3 損失関数も最適化する： ν トリック (2)

(2) ν -サポートベクトルマシン

最適化問題として書き出す。

$$\text{制約条件： } \xi_i > 0, \quad \xi_i \geq \rho - y_i \sum_{j=1}^n \alpha_j K_{ij}, \quad \rho \geq 0$$

$$\text{最小化問題： } \min_{\xi, \alpha, \rho} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i + \frac{1}{2} \alpha^T K \alpha - \nu \rho$$

※ ν は正の定数で正則化パラメータの役割を果たす。

ν トリック： 区分線形の損失関数の傾きが変化する
点のパラメータを最適化する方法

4.3 損失関数も最適化する： ν トリック (3)

$$\text{最大化問題： } L_{dual}(\boldsymbol{y}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y^{(i)} y^{(j)} \gamma_i \gamma_j K_{ij}$$

$$\text{制約条件： } 0 \leq y \leq \frac{1}{n}, \quad \nu \leq \sum_{i=1}^n \gamma_i$$

の問題を解けば良い。

最終的に識別関数

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{x}^{(i)} \in SV} \gamma_i y^{(i)} k(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x})$$

4.3 損失関数も最適化する： ν トリック(4)

(3) ν -サポートベクトルマシンの特徴

- ν によってサポートベクトルの個数や誤りを大まかに制御できる。

(4) ν -サポートベクトル回帰

- ν トリック：サポートベクトルマシンに限らず
区分線形関数を用いた最適化問題なら
適用可能！

4.3 損失関数も最適化する： ν トリック (5)

サポートベクトル回帰

$$\min_{\xi, \alpha, \varepsilon} \sum_{i=1}^n \xi_i + \lambda \nu \alpha^T K \alpha + \nu \varepsilon$$

もとのサポートベクトル回帰と同じ制約下で上記の関数の最小化問題を解く事になる！