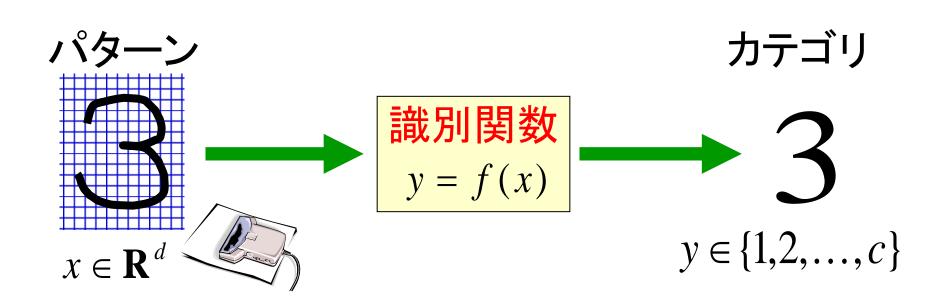
サポートベクトル 分類(8章)

杉山将•本多淳也

sugi@k.u-tokyo.ac.jp, jhonda@k.u-tokyo.ac.jp http://www.ms.k.u-tokyo.ac.jp

パターン認識

- ■入力パターンをカテゴリに割り当てる 識別関数を構成する問題
 - 問題に合わせて人間が識別関数を設計
 - データから自動的に識別関数を学習



統計的パターン認識

■訓練標本:属するカテゴリが既知のパターン

$$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$$

$$x_i \in \mathbf{R}^d$$
$$y_i \in \{1, 2, \dots, c\}$$

- ■統計的パターン認識:訓練標本の統計的な 性質を利用して識別関数を学習する
- ■仮定:

$$(x_i, y_i) \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} p(x, y)$$

i.i.d. (independent and identically distributed) 独立に同一の分布に従う

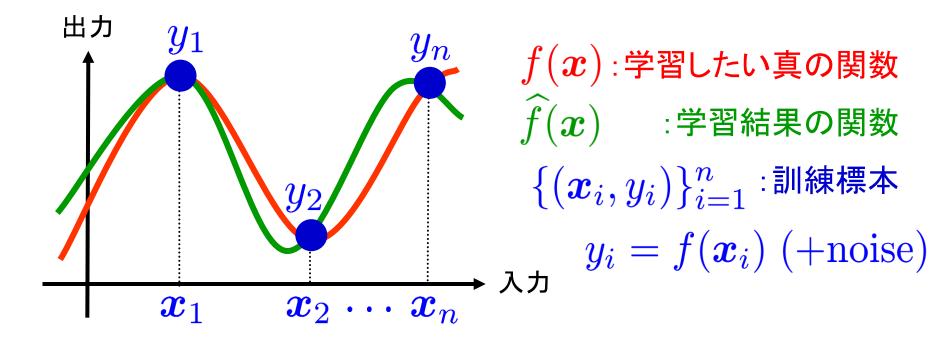
生成モデルに基づくパターン認識 4

- 事後確率 p(y|x): 与えられたパターン x が クラス y に属する確率
- 事後確率を最大にするカテゴリにパターンを 分類すれば、パターンの誤識別率が最小に なる.

$$f(x) = \arg\max_{y} \ p(y \mid x)$$

■実際には事後確率は未知なので、訓練標本から推定する.

識別モデルによるパターン識別



関数 $\widehat{f}(x)$ の「良さ」を何らかの規準で定量化し、それを最適化するものを直接求める

パラメータに関する線形モデル

■線形モデル:
$$f_{m{ heta}}(m{x}) = \sum_{j=1}^{b} heta_j \phi_j(m{x})$$

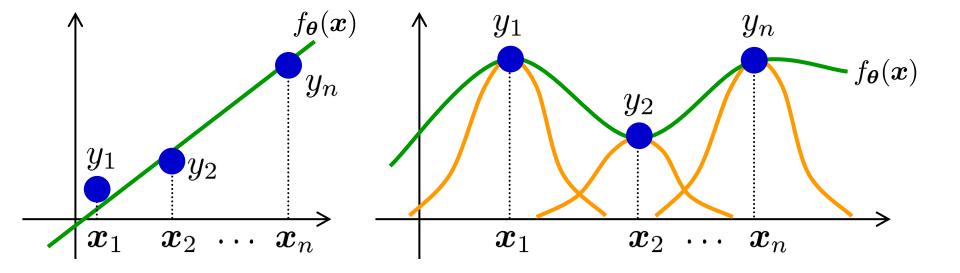
 $\{\phi_j(\boldsymbol{x})\}_{j=1}^b$:基底関数

■カーネルモデル:

ガウスカーネル

$$f_{\boldsymbol{ heta}}(oldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} heta_{j} K(oldsymbol{x}, oldsymbol{x}_{j})$$

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_{j} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_{j}) K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}\|^{2}}{2h^{2}}\right)$$



2クラスの分類問題

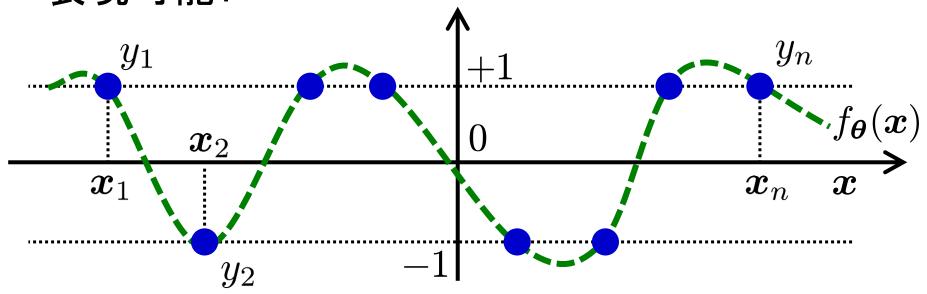
- ■ラベル付き訓練データ: $\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\}_{i=1}^n$
 - $oldsymbol{\circ}$ 入力 $oldsymbol{x}$ はd次元の実ベクトル $oldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$
 - 出力yは2値のクラスラベル $y \in \{+1, -1\}$

分離境界

■クラス間の分離境界を求めたい

2クラスの分類問題

■2クラス分類問題は2値関数の近似問題として 表現可能:



■回帰における学習手法が分類にも使える!

回帰学習による分類

■パラメータを正則化最小二乗回帰で学習

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}} \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i \right)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}\|^2 \right]$$

 $\lambda (\geq 0)$: 正則化パラメータ

■テストパターンの分類:

$$\widehat{y} = \operatorname{sign} \left(f_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}}(\boldsymbol{x}) \right) = \begin{cases} +1 & (f_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}}(\boldsymbol{x}) > 0) \\ 0 & (f_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}}(\boldsymbol{x}) = 0) \\ -1 & (f_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}}(\boldsymbol{x}) < 0) \end{cases}$$

0/1-損失関数とマージン

■分類問題では、学習した関数の符号だけが必要

$$\widehat{y} = \operatorname{sign}\left(f_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}}(\boldsymbol{x})\right)$$

■ℓ2-損失でなく, 0/1-損失の方が自然

$$l_{0/1}(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i), y_i) = \begin{cases} 0 & \text{if sign} (f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i)) = y_i \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$= \frac{1 - \operatorname{sign}(m_i)}{2} \quad \mathbf{マージン}$$

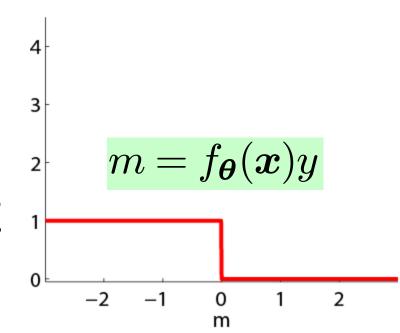
$$m_i = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i$$

 $J_{0/1}(\theta) = \sum_{i=1}^{n} l_{0/1}(f_{\theta}(x_i), y_i)$ は誤分類数に相当

0/1-損失関数とマージン

$$J_{0/1}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (1 - \text{sign}(m_i))$$

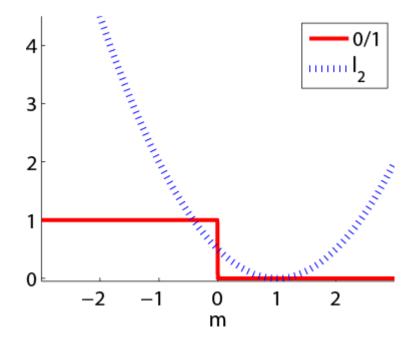
- ■0/1-損失は誤分類標本数に対応
 - マージンが正なら誤差O
 - マージンが負なら誤差1
- ■分類の損失としては理想的
 - ただし傾きゼロかつ非連続な 関数
- ■0/1-損失の最小化はNP困難
 - 現実的な時間では不可能



12-損失とマージン

$$\frac{1}{2} \left(f_{\theta}(x) - y \right)^2 = \frac{1}{2} (1 - m)^2$$

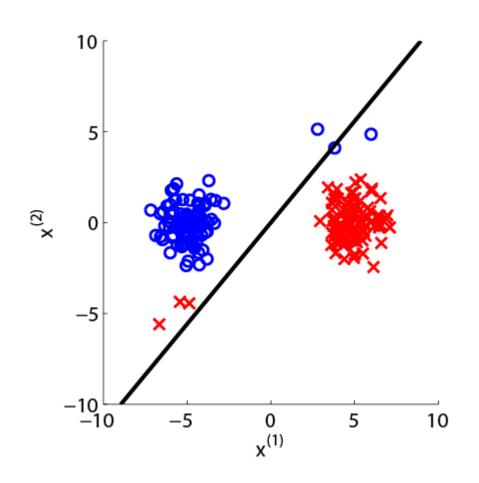
$$m = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x})y$$



- ■ℓ2-損失関数は連続関数で扱いやすい
- ■負のマージンを正(+1)にしようとする
- ■正の大きいマージンを+1に減らそうとする

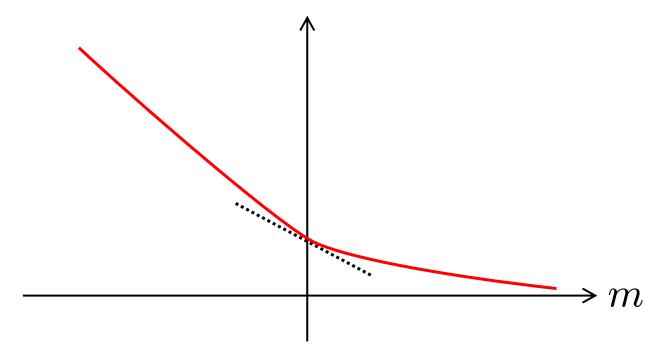
化2-損失の問題点

正の大きいマージンを+1に減らそうとすることにより、下記のデータを正しく分離できない



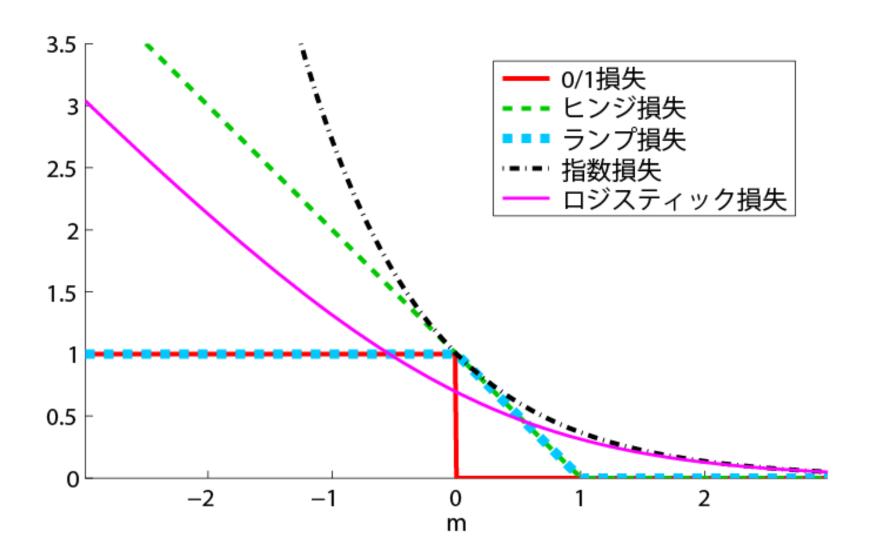
代理損失

- = 0/1 損失の代理として使う損失は、 単調非増加で <math>m = 0 での傾きが 負のものがよい
 - 負のマージンを正にしようとする
 - 正のマージンは減らさない



代理損失

■機械学習では、様々な代理損失が用いられる





講義の流れ

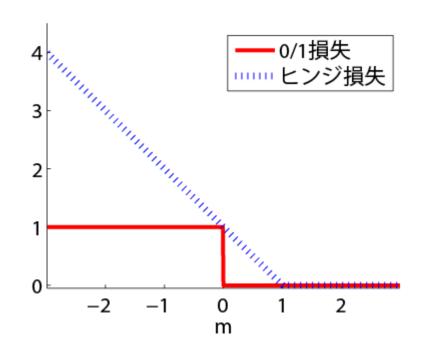
- 1. ヒンジ損失(8章)
- 2. サポートベクトル分類の元々の導出(8章)
- 3. サポートベクトル分類の解の性質(8章)

ヒンジ損失

■0/1-損失の代理としてヒンジ損失を用いる

$$\sum_{i=1}^{n} \max(0, 1 - m_i) \quad m_i = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i$$

$$m_i = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i$$





サポートベクトル分類

■ヒンジ損失とℓ2-制約の和を最小にする

$$\min_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^b} \left[\sum_{i=1}^n \max \left(0, 1 - f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i \right) + \frac{\lambda}{2} \boldsymbol{\theta}^\top \boldsymbol{R} \boldsymbol{\theta} \right]$$

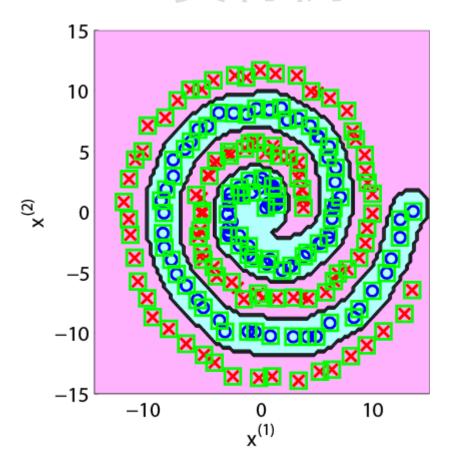
■特に以下の場合をサポートベクトル分類器とよぶ

$$\bullet f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_{j} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_{j}) + \theta_{0}$$

•
$$\mathbf{R} = \mathbf{K}$$
 $K_{i,j} = K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$

■優れたソフトウェアが多数公開されている: http://www.support-vector-machines.org/

実行例



■複雑なデータもきちんと分離できている

劣勾配法

■凸関数fのx'での劣勾配(sub-gradient)とは,全ての $x \in \mathbb{R}^d$ に対して次式を満たす ξ :

$$f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}') + \boldsymbol{\xi}^{\top}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')$$

- ullet が微分可能なとき, $oldsymbol{\xi} =
 abla f(oldsymbol{x}')$
- 上式を満たす ξ 全体を $\partial f(x')$ で表し 劣微分(sub-differential)とよぶ

■劣勾配法:

勾配法において, 微分不可能な点では, 劣微分のどれかの 値を用いる

$$f(x) = \max(0, 1 - x)$$

$$\partial f(1) = [-1, 0]$$

数学演習

$$\min_{oldsymbol{ heta} \in \mathbb{R}^b} \left[\sum_{i=1}^n \max\left(0, 1 - f_{oldsymbol{ heta}}(oldsymbol{x}_i) y_i
ight) + rac{\lambda}{2} oldsymbol{ heta}^ op oldsymbol{R} oldsymbol{ heta}
ight]$$

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{b} \theta_{j} \phi_{j}(\boldsymbol{x})$$

■ヒンジ損失の各 θ_i に関する劣微分

$$\partial_j \max \left(0, 1 - f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i\right)$$

を求めよ

$$\partial \max (0, 1 - z) = \begin{cases} \{-1\} & z < 1 \\ [-1, 0] & z = 1 \\ \{0\} & z > 1 \end{cases}$$

解答例

$$t_j = \partial_j \max\left(0, 1 - f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i)y_i\right) f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) = \sum_{j=1}^o \theta_j \phi_j(\boldsymbol{x}_i)$$

- $-1 f_{\theta}(x_i)y_i > 0$ のとき $t_j = \{-y_i\phi_j(x_i)\}$
- $egin{aligned} lacksquare 1 f_{m{ heta}}(m{x}_i) y_i = 0 \end{array}$ かつ $y_i \phi_j(m{x}_i) > 0$ のとき $t_j = [-y_i \phi_j(m{x}_i), 0]$
- $y_i \phi_j(\boldsymbol{x}_i) y_i = 0$ かつ $y_i \phi_j(\boldsymbol{x}_i) \leq 0$ のとき $t_j = [0, -y_i \phi_j(\boldsymbol{x}_i)]$
- $-1 f_{\theta}(x_i)y_i < 0$ のとき $t_i = \{0\}$

劣勾配アルゴリズム

$$oldsymbol{ heta} \leftarrow oldsymbol{ heta} - arepsilon \left(\sum_{i=1}^n \partial \max\left(0, 1 - f_{oldsymbol{ heta}}(oldsymbol{x}_i) y_i
ight) + \lambda oldsymbol{R} oldsymbol{ heta}
ight)$$

 $\varepsilon > 0$:ステップ幅

■劣勾配:

$$1 - f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i > 0$$

$$\ni -y_i \phi_j(\boldsymbol{x}_i)$$

$$1 - f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i \le 0 \qquad \qquad \partial_j \max \left(0, 1 - f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) y_i\right) \ni 0$$



講義の流れ

- 1. ヒンジ損失(8章)
- 2. サポートベクトル分類の元々の導出(8章)
- 3. サポートベクトル分類の解の性質(8章)

サポートベクトル分類器の 正統派の導出

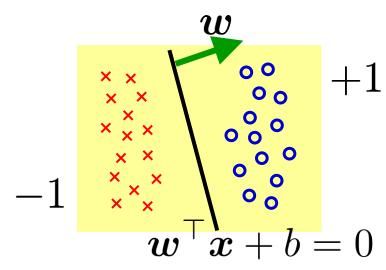
- ■超平面分類器
- ■マージン最大化
- ■ソフトマージン
- ■カーネルトリック

超平面分類器

■標本空間を超平面で分離する.

$$f_{oldsymbol{w},b}(oldsymbol{x}) = oldsymbol{w}^ op oldsymbol{x} + b$$

$$\boldsymbol{w} = (w^{(1)}, \dots, w^{(d)})^{\top}$$
$$\boldsymbol{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(d)})^{\top}$$



find \boldsymbol{w}, b

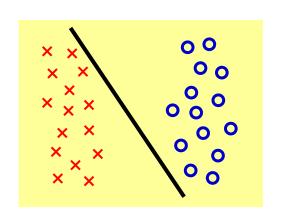
such that $y_i f_{\boldsymbol{w},b}(\boldsymbol{x}_i) > 0$ for $i = 1, \dots, n$.

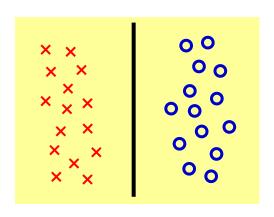
超平面分類器

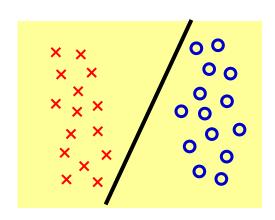
■これは適当なスケーリングのもと以下と等価.

最適な分離は?

■以下の3つの分け方で、将来与えられるテスト データに対する分類誤差(汎化誤差)を最小に するものはどれか?



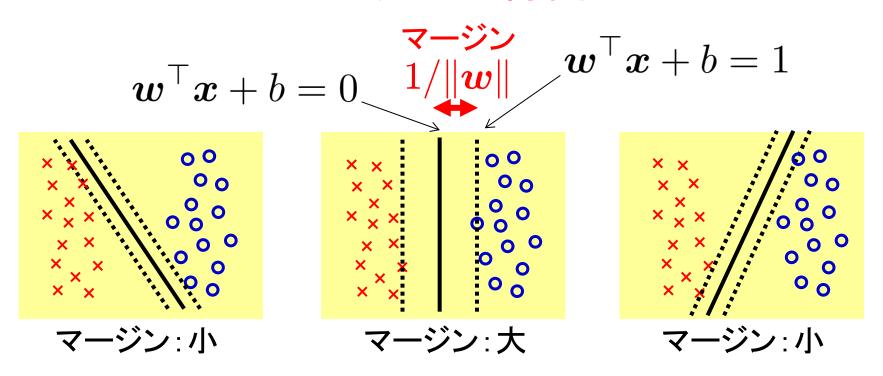




- ■3つとも、学習用データを全て正しく分離できるため、優劣をつけがたい。
- ■真ん中の分離平面が直感的にはよさそう

マージン

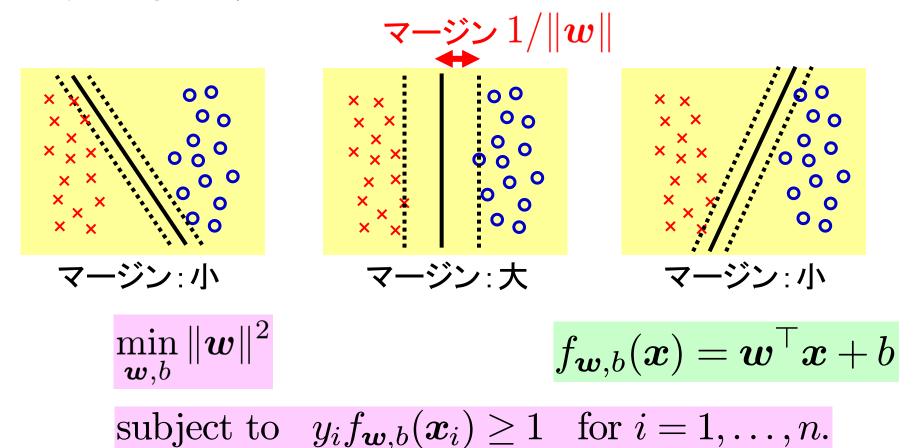
■マージン: 二つのクラスの"隙間"の大きさ



■マージンが大きい分類器は訓練データのずれに対して頑健→汎化誤差が小さくなりやすい (より詳細にはVC次元の理論等を用いる)

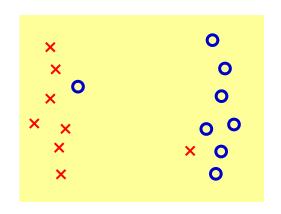
最適超平面分類器

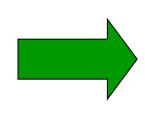
■マージンが最大になるように二つのクラスを 超平面で分ける.

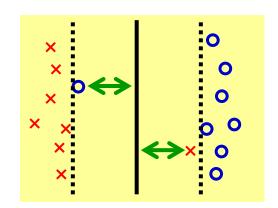


ソフトマージン

- ■標本が線形分離可能でないときは マージンが定義できない.
- \blacksquare 少しの誤差 ξ_i を許す.







$$\min_{oldsymbol{w},b,oldsymbol{\xi}} \|oldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$

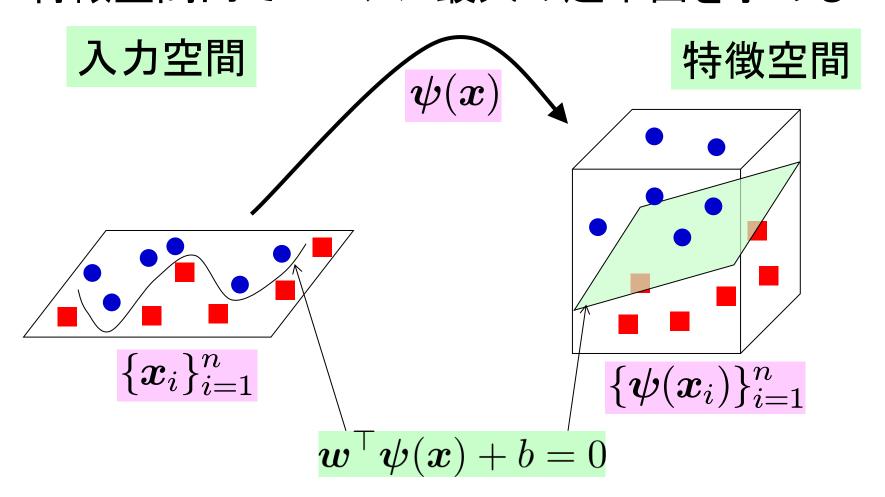
$$f_{oldsymbol{w},b}(oldsymbol{x}) = oldsymbol{w}^{ op}oldsymbol{x} + b$$

subject to $y_i f_{\boldsymbol{w},b}(\boldsymbol{x}_i) \geq 1 - \xi_i$

$$\xi_i \ge 0 \text{ for } i = 1, \dots, n.$$

非線形への拡張

■ 非線形関数 $\psi(x)$ で標本を特徴空間へ写像し、特徴空間内でマージン最大の超平面を求める.



カーネルトリック

■特徴空間内での内積をカーネル関数で計算:

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}_i)^{\top} \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}_j) = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$

$$\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \geq 0$$

例えばガウシアンカーネル

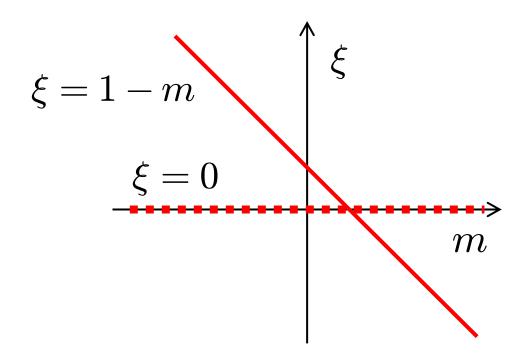
$$K(x, x') = \exp(-\|x - x'\|^2/(2h^2))$$

- ■内積のみで表される線形アルゴリズムは、 そのまま非線形に拡張できる.
 - 例: サポートベクトルマシン, 主成分分析, 線形判別分析, K平均クラスタリングなど

ヒンジ損失との関係

■ヒンジ損失は以下のように変形できる

$$\max\{0, 1 - m\} = \min_{\xi} \xi \text{ subject to } \xi \ge 1 - m, \ \xi \ge 0$$
$$= \min_{\xi} \xi \text{ subject to } m \ge 1 - \xi, \ \xi \ge 0$$



ヒンジ損失との関係

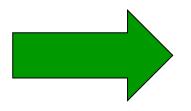
$$\max\{0, 1 - m\} = \min_{\xi} \xi \text{ subject to } m \ge 1 - \xi, \ \xi \ge 0$$

■ ξ_i を消去すると制約なし最適化問題に変形できる:

$$\min_{\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\xi}} \|\boldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$

subject to
$$y_i f_{\boldsymbol{w},b}(\boldsymbol{x}_i) \ge 1 - \xi_i$$

$$\xi_i \ge 0 \quad \text{for } i = 1, \dots, n$$



$$\min_{oldsymbol{w},b} \|oldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \max\left(0, 1 - y_i f_{oldsymbol{w},b}(oldsymbol{x}_i)
ight)$$

ヒンジ損失との関係

$$\min_{oldsymbol{w},b} \|oldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \max\left(0, 1 - y_i f_{oldsymbol{w},b}(oldsymbol{x}_i)
ight)$$

$$f_{oldsymbol{w},b}(oldsymbol{x}) = oldsymbol{w}^ op oldsymbol{\psi}(oldsymbol{x}) + b$$

$$oldsymbol{w} = \sum_{j=1}^n heta_j oldsymbol{\psi}(oldsymbol{x}_j)$$

 $oldsymbol{w} = \sum_{j=0}^{\infty} heta_j \psi(oldsymbol{x}_j)$ とおけばヒンジ損失最小化と等価

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \left[\sum_{i=1}^{n} \max \left(0, 1 - y_i f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) \right) + \lambda \boldsymbol{\theta}^{\top} \boldsymbol{K} \boldsymbol{\theta} \right]$$

$$C = 1/\lambda$$

$$\psi(\boldsymbol{x}_i)^{\top} \psi(\boldsymbol{x}_i) = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_i)$$

$$rac{C = 1/\lambda}{oldsymbol{\psi}(oldsymbol{x}_i)^{ op} oldsymbol{\psi}(oldsymbol{x}_j)^{ op} oldsymbol{\psi}(oldsymbol{x}_i)^{ op} oldsymbol{\psi}(oldsymbol{x}_i, oldsymbol{x}_j)} f_{oldsymbol{ heta}}(oldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^n heta_j K(oldsymbol{x}, oldsymbol{x}_j) + heta_0$$



講義の流れ

- 1. ヒンジ損失(8章)
- 2. サポートベクトル分類の元々の導出(8章)
- 3. サポートベクトル分類の解の性質(8章)

最適化問題の双対

■主問題(primal problem):

$$\min_{oldsymbol{x} \in \mathcal{X}} f(oldsymbol{x}) \quad ext{subject to } oldsymbol{g}(oldsymbol{x}) = oldsymbol{0}, \ oldsymbol{h}(oldsymbol{x}) \leq oldsymbol{0}, \ oldsymbol{g}(oldsymbol{x}) = (g_1(oldsymbol{x}), \dots, g_m(oldsymbol{x}))^{ op} \ oldsymbol{h}(oldsymbol{x}) = (h_1(oldsymbol{x}), \dots, h_n(oldsymbol{x}))^{ op}$$

■双対問題(dual problem):

- 主問題の最適値の下界を最大化する問題
- 制約条件から目的関数を作る
- 目的関数から制約条件を作る

ラグランジュ双対

$$f^* = \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} f(\boldsymbol{x})$$
 subject to $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \ \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0}$

■ラグランジュ関数(Lagrangian):

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\top} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}^{\top} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})$$

■ラグランジュ双対問題(Lagrange dual problem):

$$f^* = \max_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}} \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$$
subject to $\boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}$

- 凸最適化問題に対しては最適解が一致
- ・双対問題の方が制約が単純

ラグランジュ関数

$$\min_{m{w}, m{\xi}} rac{1}{2} \|m{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$
 $f_{m{w}}(m{x}) = m{w}^{ op} m{x}$ (単純化のため subject to $y_i f_{m{w}}(m{x}_i) \geq 1 - \xi_i$ +bを省略)

$$\xi_i \ge 0 \quad \text{for } i = 1, \dots, n$$

サポートベクトルマシンのラグランジュ関数は

$$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

$$-\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left(y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i - 1 + \xi_i \right) - \sum_{i=1}^{n} \beta_i \xi_i$$

数学演習

■サポートベクトルマシンの双対最適化問題

$$\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}\inf_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{\xi}}L(\boldsymbol{w},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

subject to $\alpha \geq 0$ and $\beta \geq 0$

から w, ξ, β を消去せよ

■ヒント:
$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{0}, \ \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{0}$$

$$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

$$-\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left(y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i - 1 + \xi_i \right) - \sum_{i=1}^{n} \beta_i \xi_i$$

解答例

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = 0 \implies \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0 \implies \alpha_i + \beta_i = C, \ \forall i = 1, \dots, n$$

これらより

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \underset{\boldsymbol{\alpha}}{\operatorname{argmax}} \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\top} \boldsymbol{x}_j \right]$$

subject to $0 \le \alpha_i \le C$ for $i = 1, \ldots, n$

双対最適化問題

■双対問題は二次計画(quadratic program; QP):

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \underset{\boldsymbol{\alpha}}{\operatorname{argmax}} \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\top} \boldsymbol{x}_j \right]$$

subject to $0 \le \alpha_i \le C$ for $i = 1, \ldots, n$

- 制約条件が等号で成り立たない要素さえ分かれば解析的に解ける
- ■主問題の解:

$$\widehat{oldsymbol{w}} = \sum_{i=1}^n \widehat{lpha}_i y_i oldsymbol{x}_i \qquad rac{\partial P}{\partial oldsymbol{v}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = 0 \implies \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i$$

最適性条件

$$\min_{oldsymbol{x} \in \mathcal{X}} f(oldsymbol{x}) \quad ext{subject to } oldsymbol{g}(oldsymbol{x}) = oldsymbol{0}, \ oldsymbol{h}(oldsymbol{x}) \leq oldsymbol{0}, \ oldsymbol{h}(oldsymbol{x}) = (g_1(oldsymbol{x}), \dots, g_m(oldsymbol{x}))^{\top} \ oldsymbol{h}(oldsymbol{x}) = (h_1(oldsymbol{x}), \dots, h_n(oldsymbol{x}))^{\top}$$

- ■最適解の必要条件(凸の場合は必要十分条件):
 - $\bullet \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \boldsymbol{\lambda}^{*\top} \nabla g(\boldsymbol{x}^*) + \boldsymbol{\mu}^{*\top} \nabla h(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$
 - $oldsymbol{g}(oldsymbol{x}^*) = oldsymbol{0}$

カルーシュ・キューン・タッカー

 $ullet h(oldsymbol{x}^*) \leq oldsymbol{0}$

(KKT)条件

 $ullet \mu^* \geq 0$

(Karush-Kuhn-Tucker conditions)

• $\mu_i^* h_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, ..., n \leftarrow \mathbf{n}$ — 相補性条件

相補性条件

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{\xi}} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i \qquad f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}$$
subject to $y_i f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}_i) \ge 1 - \xi_i$
$$\xi_i > 0 \quad \text{for } i = 1, \dots, n$$

■サポートベクトルマシンの双対最適化問題 の相補性条件は

$$\alpha_i(y_i \mathbf{w}^{\top} \mathbf{x}_i - 1 + \xi_i) = 0$$
 $\beta_i \xi_i = 0$ for $i = 1, \dots, n$

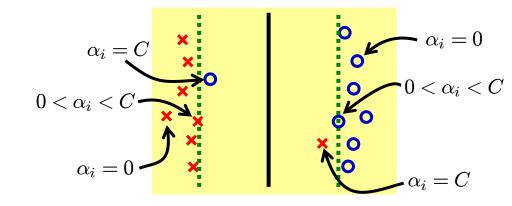
相補性条件(続き)

$$\alpha_i(y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i - 1 + \xi_i) = 0$$
 $\beta_i \xi_i = 0$

■相補性条件より,以下の性質が成り立つ:

- 1. $\alpha_i = 0 \implies y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \geq 1$
- 2. $0 < \alpha_i < C \implies y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i = 1$ サポートベクトル
- 3. $\alpha_i = C \implies y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \leq 1$
- 4. $y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i > 1 \implies \alpha_i = 0$
- 5. $y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i < 1 \implies \alpha_i = C$

導出は宿題



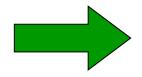


講義の流れ

- 1. ヒンジ損失(8章)
- 2. サポートベクトル分類の元々の導出(8章)
- 3. サポートベクトル分類の解の性質(8章)

まとめ

- ■0/1-損失の代理としてはヒンジ損失が適切
- ■サポートベクトル分類は、元々はマージン 最大化原理に基づいた学習法として導出
- ■分類問題:
 - 入力に関する線形モデル+最小二乗学習 =フィッシャーの線形判別分析
 - カーネルモデル+正則化ヒンジ損失最小化 =サポートベクトルマシン



良い方法には様々な解釈がある



次回の予告

- ■確率的分類(10章)
- ■系列データの分類(11章)

宿題1

相補性条件

$$\bullet \ \alpha_i(y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i - 1 + \xi_i) = 0$$

$$\bullet \ \beta_i \xi_i = 0$$

より、以下の性質を示せ

1.
$$\alpha_i = 0 \implies y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \geq 1$$

2.
$$0 < \alpha_i < C \implies y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i = 1$$

3.
$$\alpha_i = C \implies y_i \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \leq 1$$

4.
$$y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i > 1 \implies \alpha_i = 0$$

5.
$$y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i < 1 \implies \alpha_i = C$$

■ヒント:以下の条件を利用する

$$y_i \boldsymbol{w}^{\top} \boldsymbol{x}_i - 1 + \xi_i \ge 0 \qquad \xi_i \ge 0$$

$$\xi_i \ge 0$$

$$\alpha_i + \beta_i = C$$

■線形モデル

$$f_{oldsymbol{w},b}(oldsymbol{x}) = oldsymbol{w}^ op oldsymbol{x} + b$$

に対するサポートベクトルマシンの 劣勾配アルゴリズムを実装せよ

```
10
5
0
-5
-10
-10 -5 0 5 10
```

```
clear all; rand('state',0); randn('state',0);
n=200; x=[randn(1,n/2)-5 randn(1,n/2)+5; randn(1,n)]';
x(:,3)=1;
y=[ones(n/2,1);-ones(n/2,1)]; y(1:3)=-1; y(n/2+1:n/2+3,1)=1;
x(1:3,2)=x(1:3,2)-5; x(n/2+1:n/2+3,2)=x(n/2+1:n/2+3,2)+5;
<<< From x and y, learn 3-dimensional vector w >>>
figure(1); clf; hold on; axis([-10 10 -10 10]);
plot(x(y==1,1),x(y==1,2),'bo');
plot(x(y==-1,1), x(y==-1,2), rx');
plot([-10 \ 10], -(w(3)+[-10 \ 10]*w(1))/w(2), 'k-');
```