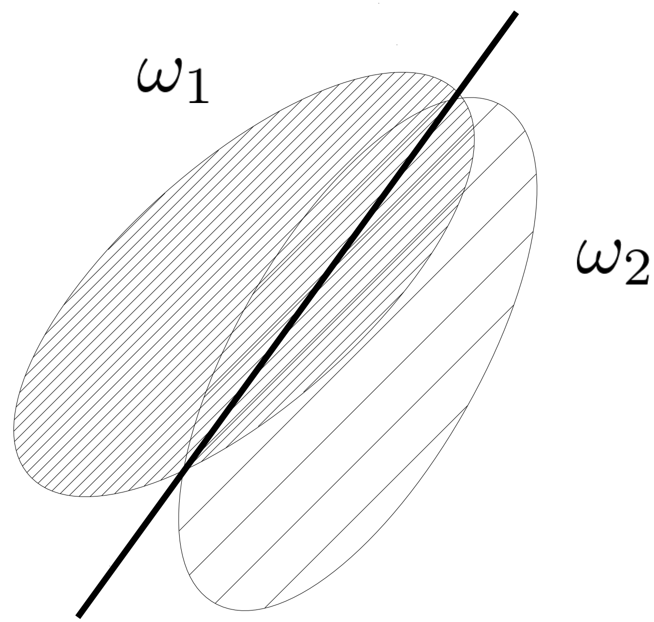
5. 誤差をできるだけ小さくしよう

- パーセプトロンの学習規則の欠点
  - 線形分離不可能である場合には利用できない
  - 一般に線形分離可能性を事前に確認するのは困難

- 評価関数最小化法
  - 線形分離不可能な場合にも適用可能



5.1　誤差評価に基づく学習とは

- 学習パターン $\chi = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$
- $\boldsymbol{x}_p \quad (1 \leq p \leq n)$ に対する c 個の識別関数の出力
  $$(g_1(\boldsymbol{x}_p), \ldots, g_c(\boldsymbol{x}_p))^T$$
- $\boldsymbol{x}_p$ に対する教師ベクトル（教師信号）
  $$(b_{1p}, \ldots, b_{cp})^T$$
  - 正解クラスの要素が１、他は０
- 入力パターン $\boldsymbol{x}_p$ に対する識別関数の出力と、教師信号との誤差 $\epsilon_{ip} \quad (i = 1, \ldots, c)$ が小さくなるように重みベクトル $\boldsymbol{w}$ を定める

5.1　誤差評価に基づく学習とは

- 誤差　$\epsilon_{ip} = g_i(\boldsymbol{x}_p) - b_{ip}$
- ϵ_{ip} の全クラスに対する二乗和を評価関数 J_p とする

$$
\begin{aligned}
J_p(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_c) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{c} \epsilon_{ip}^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{c} (g_i(\boldsymbol{x}_p) - b_{ip})^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{c} (\boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x}_p - b_{ip})^2
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{x}_p$ に対する誤差

5.1　誤差評価に基づく学習とは

- 全パターンに対する二乗誤差 J

$$J(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_c) = \sum_{p=1}^{n} J_p(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_c)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{n} \sum_{i=1}^{c} (g_i(\boldsymbol{x}_p) - b_{ip})^2$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{n} \sum_{i=1}^{c} (\boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x}_p - b_{ip})^2$$

この値を最小にする $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_c$ を求める

5.1　誤差評価に基づく学習とは

- 2クラス問題を考える場合
  - 識別関数を1つにできる

$$\mathrm{g}(\boldsymbol{x}) = g_1(\boldsymbol{x}) - g_2(\boldsymbol{x})$$

  - 教師信号はクラス1のとき1、クラス2のとき-1
  - 誤差関数

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{n}(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_p - b_p)^2$$

5.2 解析的な解法

- パターン行列

$$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n)^T$$

教師信号ベクトル

$$\boldsymbol{b} = (b_1, \ldots, b_n)^T$$

とすると

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{b}\|^2$$

$$\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{w}} = \underline{\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{b}) = 0}$$

解くべき式

5.2 解析的な解法

- 解くべき式

$$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{b}$$

$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$が正則であるとき

$$\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{b}$$

- 解が求まらない可能性
  - $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$が正則であるとは限らない
  - d が大きい場合は逆行列を求める計算が大変

正則：
　逆行列が存在すること
逆行列：
　$n \times n$ の正方行列Aに対して、
$AB = BA = I$ となるB

最小二乗法

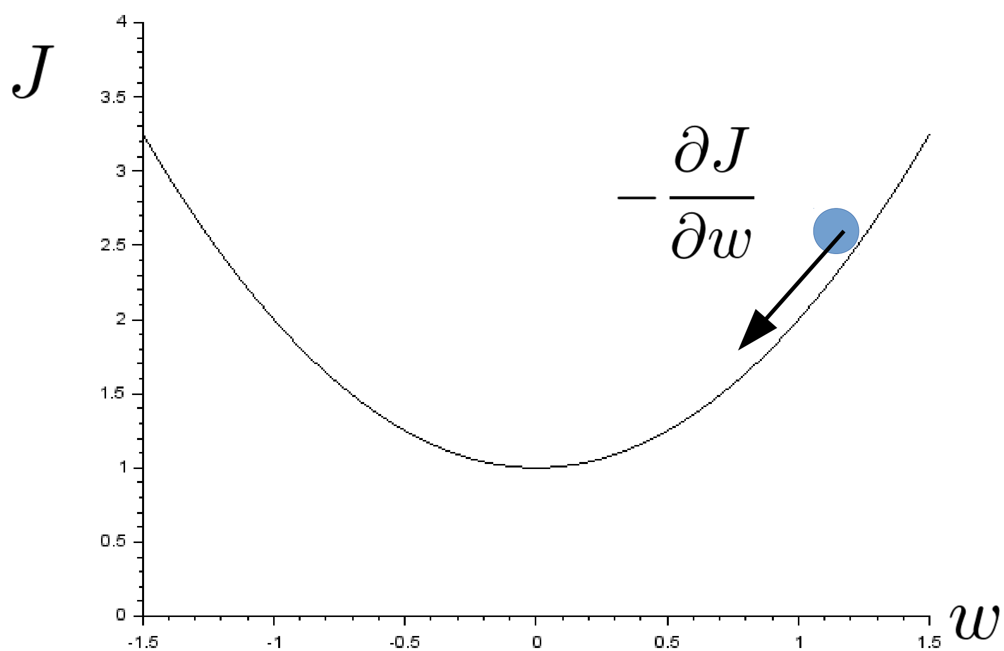
5.3 最急降下法

5.3.1 最急降下法による最適化

- $\boldsymbol{w}$ を J の傾きの方向に徐々に修正する

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \rho \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{w}}$$

- 最急降下法のイメージ



5.3.2 Widrow-Hoffの学習規則

- 勾配ベクトルの定義
  - 重みベクトル

$$\boldsymbol{w} = (w_0, \ldots, w_d)$$

の関数$J(\boldsymbol{w})$に対して、勾配ベクトルを

$$\nabla J = \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{w}} = (\frac{\partial J}{\partial w_0}, \ldots, \frac{\partial J}{\partial w_d})^T$$

と定義する

5.3.2 Widrow-Hoffの学習規則

- 修正式の導出

$$\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{w}} = \sum_{p=1}^{n} \frac{\partial J_p}{\partial \boldsymbol{w}}$$

$$= \sum_{p=1}^{n} (\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_p - b_p)\boldsymbol{x}_p$$

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \rho \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{w}}$$

$$= \underline{\boldsymbol{w} - \rho \sum_{p=1}^{n} (\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_p - b_p)\boldsymbol{x}_p}$$

重みの修正式

5.3.3 確率的最急降下法

- 最急勾配法の問題点
  - データ数やパラメータ数が多いと、重み更新に時間がかかる
- 確率的最急勾配法
  - 個々のデータの識別結果に基づき、重みを更新
  - データが来る毎に学習するオンライン学習が可能
  - 更新式

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \rho(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_p - b_p)\boldsymbol{x}_p$$

5.3.3 確率的最急降下法

- ミニバッチ法
  - Widorow-Hoffの学習規則のように、全データの誤差を用いて修正方向を決める方法をバッチ法とよぶ
  - 確率的最急降下法は1つのデータだけで修正方向を決める
  - これらの中間的手法として、数十～数百程度のデータで誤差を計算し、修正方向を決める方法を**ミニバッチ法**とよぶ
    - GPU (graphics processing unit) を用いた行列の一括演算と相性がよい

5.4 パーセプトロンの学習規則との比較

5.4.1 パーセプトロンの学習規則を導く

- 更新式の導出
  - オンラインの学習規則において
    - 教師信号を正解のときは1、不正解は0とする
    - 識別関数の後ろに閾値論理ユニットを置き、出力を0と1に制限する

誤識別のパターン

$$g(\boldsymbol{x}_p) = 0, \;\; b_p = 1$$

$$g(\boldsymbol{x}_p) = 1, \;\; b_p = 0$$

更新規則

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} + \rho \boldsymbol{x}_p$$

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \rho \boldsymbol{x}_p$$

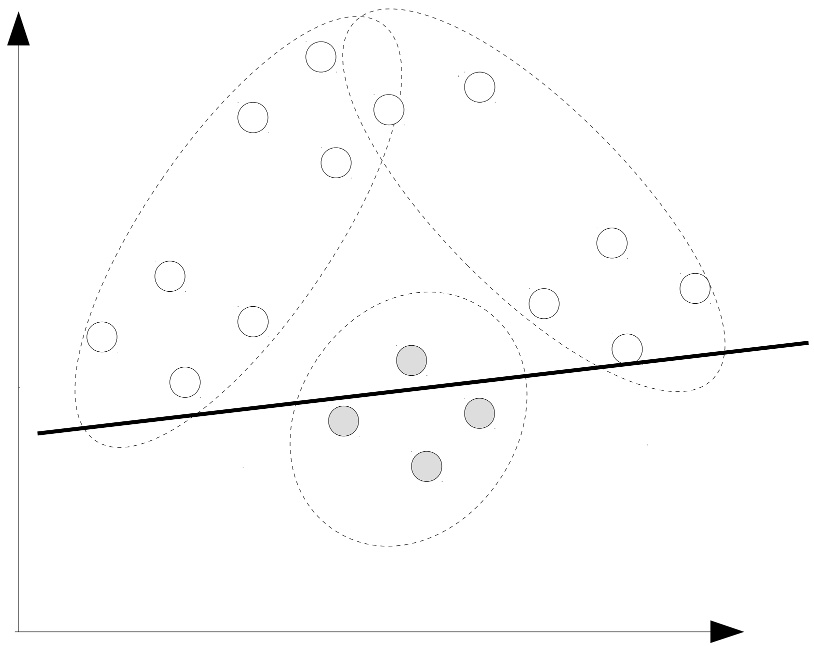
Widrow-Hoffの学習規則は、パーセプトロンの学習規則を特別な場合として含む

5.4.2　着目するデータの違い

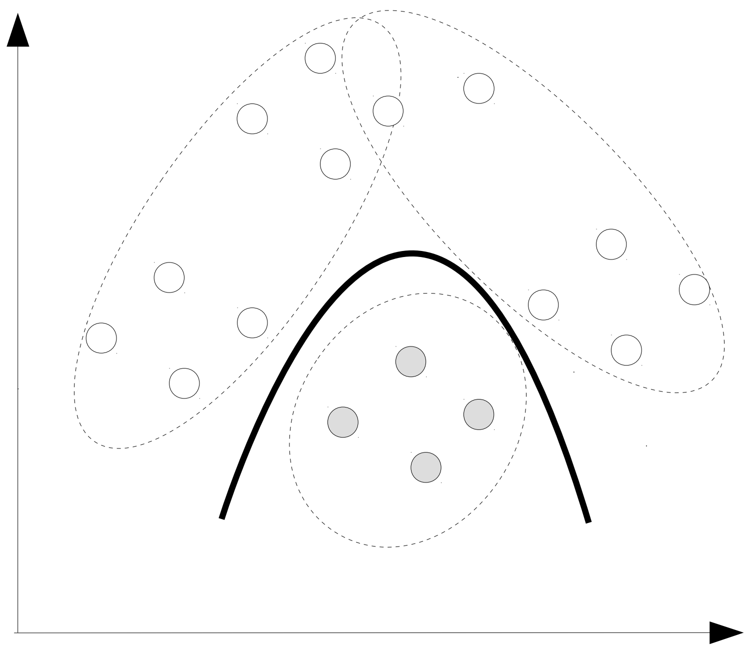
- パーセプトロンの学習規則
  - 識別関数、教師信号ともに２値
  - 全学習パターンに対して、識別関数の出力と教師信号が一致するまで重みの修正を繰り返す
  - 線形分離不可能な場合は収束しない
  - 誤識別を起こすデータに着目している
- Widrow-Hoffの学習規則
  - 識別関数の出力を連続値とし、教師信号との二乗誤差の総和を最小化
  - 線形分離不可能な場合でも収束が保証されている
  - 線形分離可能な場合でも誤識別０になるとは限らない
  - 全データの誤差に着目している

複雑な境界線は学習できないか

- 識別関数の次数を上げれば境界線は複雑にできる



線形分離不可能なデータ



2次関数を用いた場合

複雑な境界線は学習できないか

- 基底関数ベクトル

$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = (\phi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \phi_b(\boldsymbol{x}))^T$$

  – 例）$\boldsymbol{\phi}(x) = (1, x, \ldots, x^b)^T$

- 基底関数ベクトルを用いた識別関数の表現

$$g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})$$

  – 重みに関して線形であれば、最小二乗法の閉じた解による解法や、最急降下法による調整が適用可能