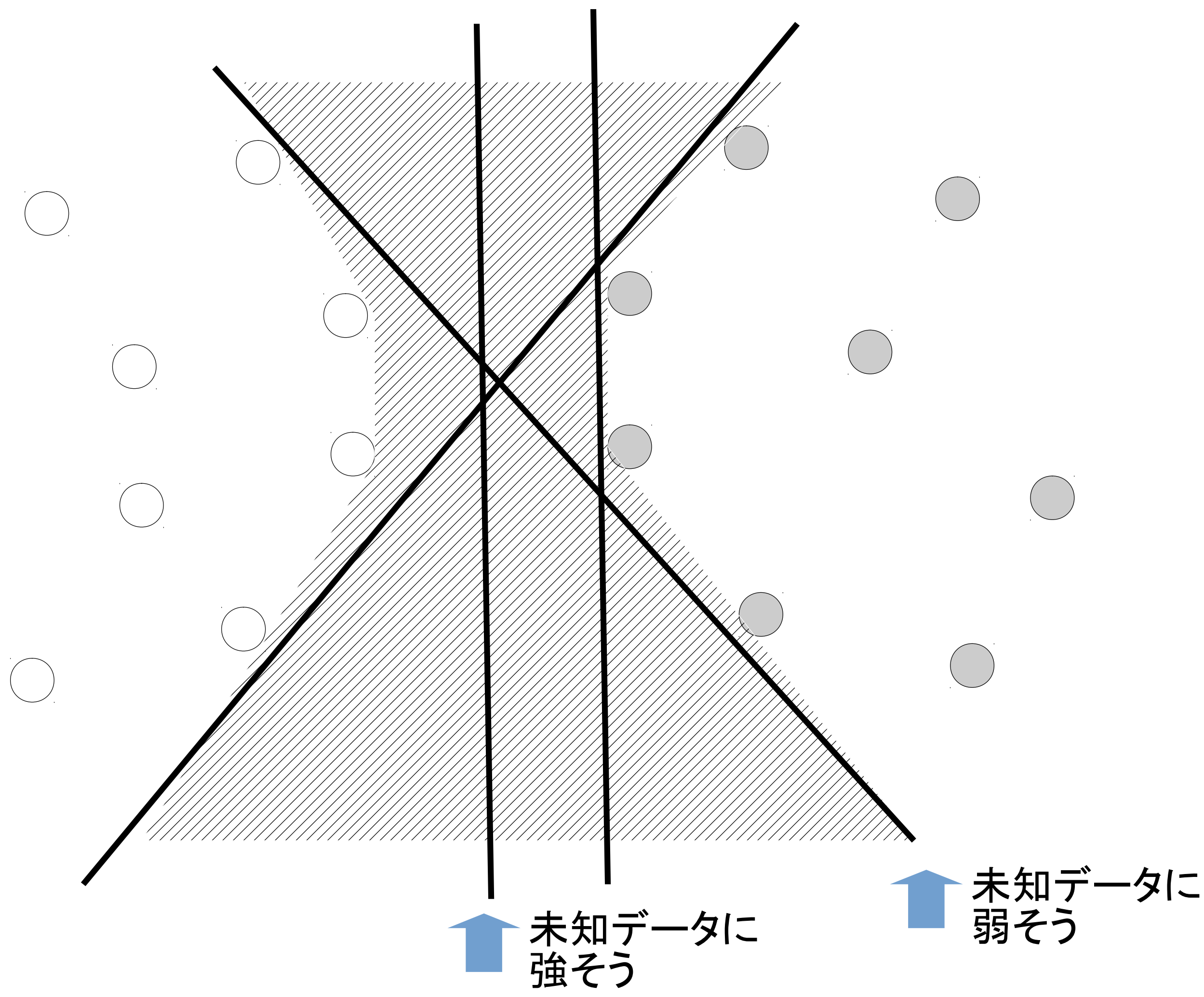
6. 限界は破れるか（１）
－　サポートベクトルマシン　－

- パーセプトロンの学習規則の限界
  - 学習パターンが線形分離可能である場合は識別面が見つかるが、信頼できる識別面とは限らない
  - 学習パターンが線形分離不可能である場合は、学習が停止しない

➡ サポートベクトルマシン（SVM）

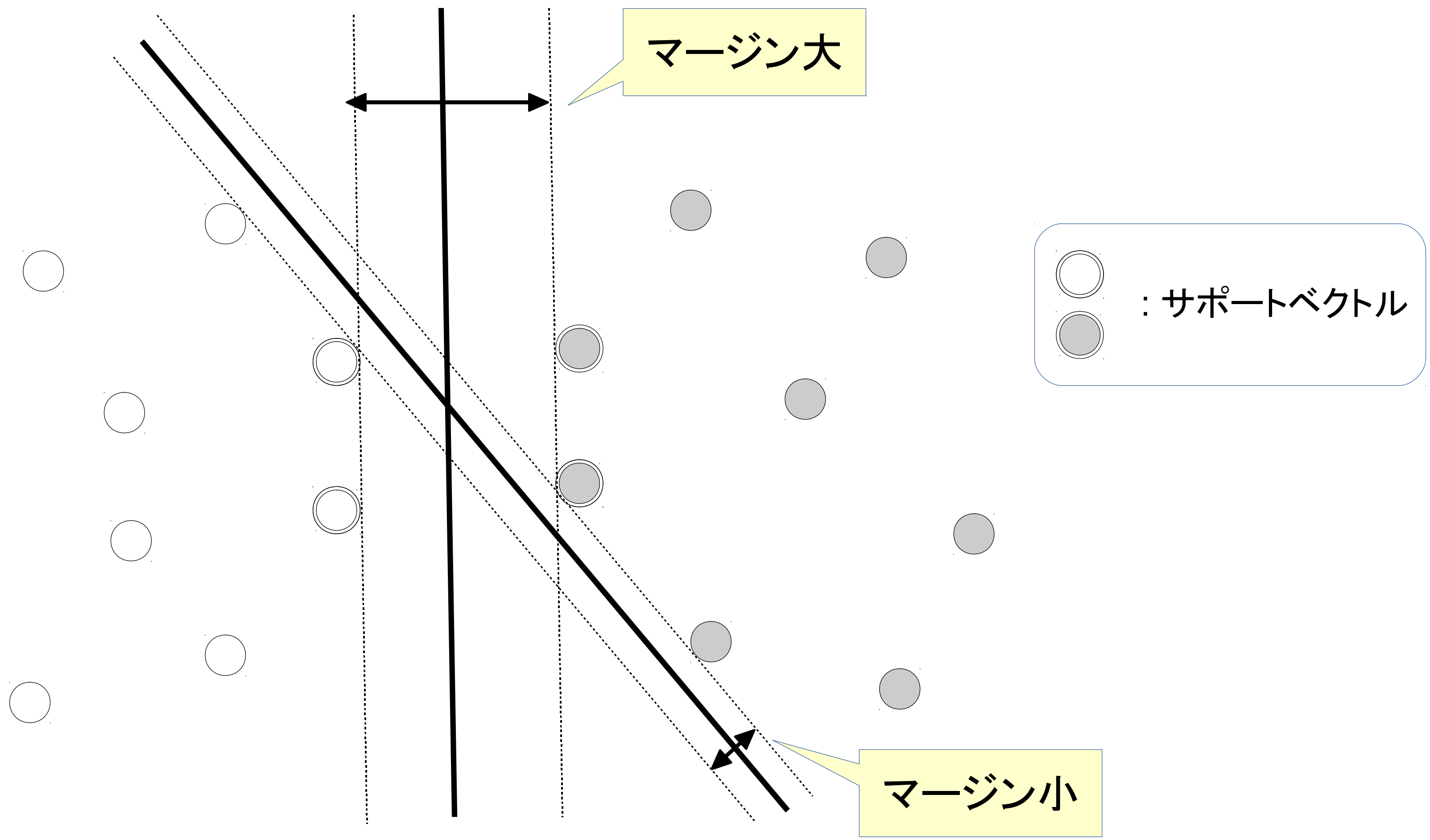
6.1 識別面は見つかったけれど

パーセプトロンの学習規則ではどれが見つかるかわからない



6.2 サポートベクトルマシンの学習アルゴリズム
6.2.1 サポートベクトル

- 線形SVM
  - マージン最大となる線形識別面を求める



6.2.2 マージンを最大にする

- 学習データ

$$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\} \quad i = 1, \ldots, n, \quad y_i = 1 \ or \ -1$$

- 線形識別面の式

$$\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + w_0 = 0$$

- 識別面の制約の導入（係数を定数倍しても平面は不変）

$$\min_{i=1,\ldots,n} |\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + w_0| = 1$$

- 学習パターンと識別面との最小距離（＝マージン）

$$\min_{i=1,\ldots,n} Dist(\boldsymbol{x}_i) = \min_{i=1,\ldots,n} \frac{|\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + w_0|}{||\boldsymbol{w}||} = \frac{1}{||\boldsymbol{w}||}$$

これを
最大化

点と直線の距離の公式

$$r = \frac{|ax + by + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

6.2.2 マージンを最大にする

- 目的関数の置き換え： $\min \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2$

極値が求めやすい２乗に

- 制約条件： $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + w_0) \geq 1 \quad i = 1, \ldots, n$
- 解法：ラグランジュの未定乗数法
  - 問題 $\min f(x) \quad s.t.\ g(x) = 0$
  - ラグランジュ関数 $L(x, \alpha) = f(x) - \alpha g(x)$
    - $\alpha \geq 0$
    - x, α で偏微分して0になる値が極値

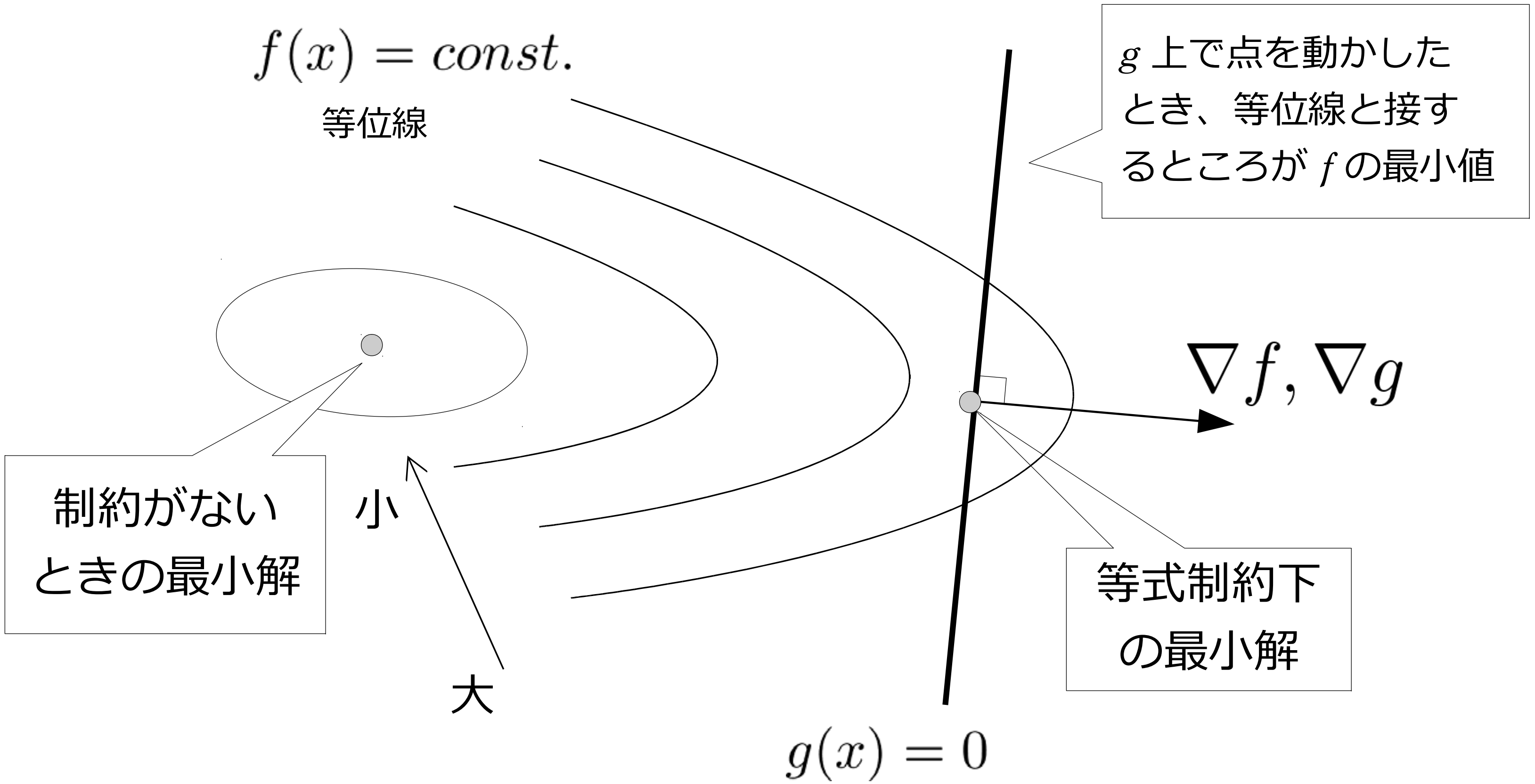
ラグランジュの未定乗数法（付録A.4）

$$\min f(x) \quad s.t. \ g(x) = 0$$

$$L(x, \alpha) = f(x) - \alpha g(x)$$

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{x}, \alpha)}{\partial \boldsymbol{x}} = \nabla f(\boldsymbol{x}) - \alpha \nabla g(\boldsymbol{x}) = 0$$

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{x}, \alpha)}{\partial \alpha} = -g(\boldsymbol{x}) = 0$$



6.2.2 マージンを最大にする

- 計算

$$L(\boldsymbol{w}, w_0, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + w_0) - 1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_0} = 0 \quad \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

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

⇩

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i$$

$$\alpha_i \geq 0$$

最大化2次計画問題
→ $\boldsymbol{\alpha}$ が求まる

6.2.2 マージンを最大にする

- 定数項の計算
  - 各クラスのサポートベクトルから求める

$$w_0 = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_{s1} + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_{s2})$$

- 識別関数

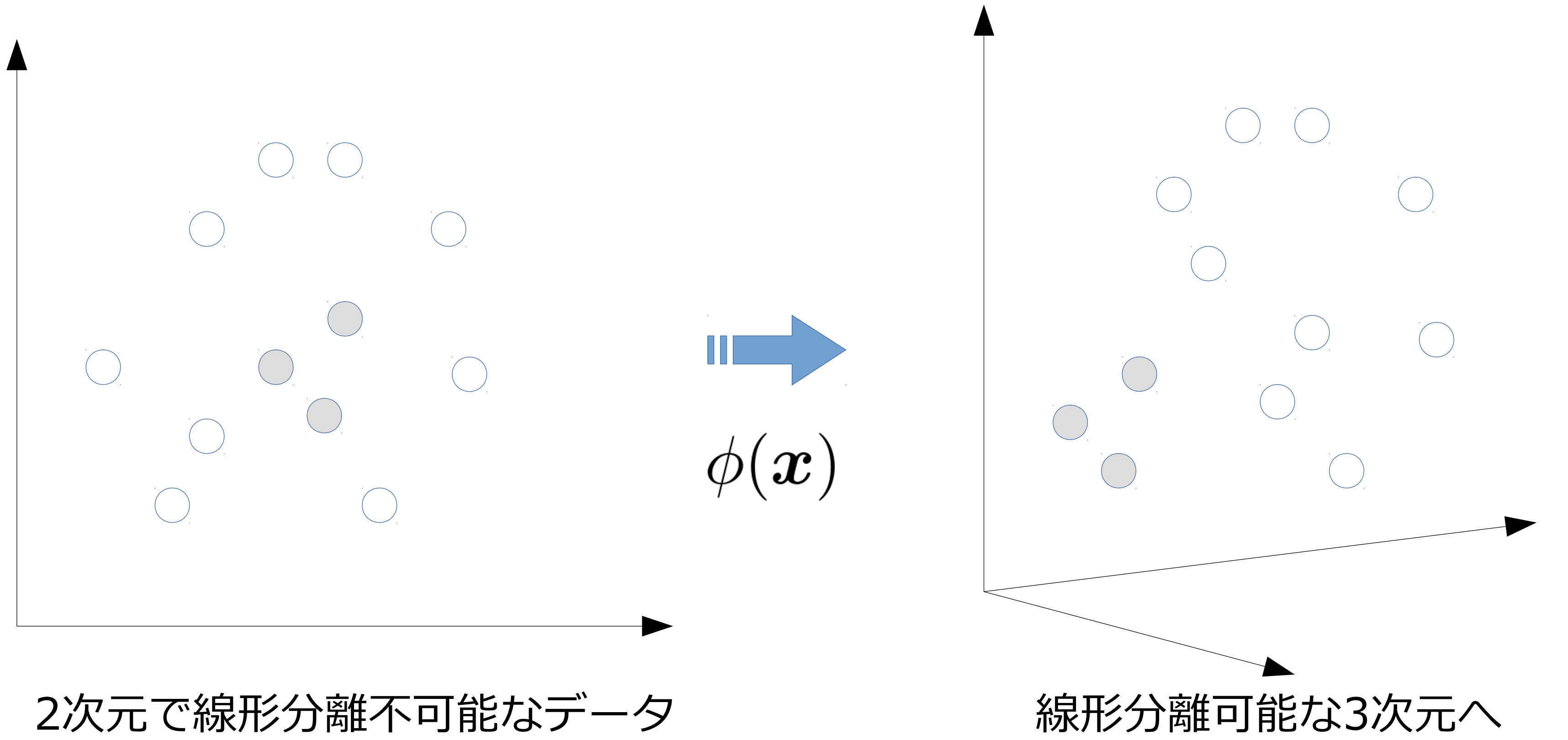
$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + w_0 \\ &= \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}_i + w_0 \end{aligned}$$

サポートベクトルに対応するα_iのみが0以上、残りは0

6.3　線形分離可能にしてしまう

6.3.1　高次元空間への写像

- 特徴ベクトルの次元数を増やす



ただし、元の空間でのデータ間の
距離関係は保持するように

6.3.2　カーネル法

- 非線形変換関数： $\phi(\boldsymbol{x})$
- カーネル関数
  - 元の空間での距離が変換後の空間の内積に対応

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \phi(\boldsymbol{x})^T \phi(\boldsymbol{x}')$$

  - カーネル関数の例
    - 多項式カーネル $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}' + 1)^p$
    - ガウシアンカーネル $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp(-\frac{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'||^2}{\sigma^2})$

線形カーネル
$(\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}')^p$
を用いる場合もある

これらの形であれば、対応する非線形変換が
存在することが数学的に保証されている

6.3.2　カーネル法

- 変換後の識別関数：　$g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}) + w_0$
- SVMで求めた $\boldsymbol{w}$ の値を代入

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \phi(\boldsymbol{x})^T \phi(\boldsymbol{x}_i) + w_0 \\
&= \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) + w_0
\end{aligned}
$$

非線形変換の
式は不要！！！

カーネルトリック

6.3.3　具体的なカーネル関数

- 線形カーネル（2次）の展開

$$
\begin{aligned}
K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') &= (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}')^2 \\
&= (x_1 x_1' + x_2 x_2')^2 \\
&= x_1^2 {x_1'}^2 + 2 x_1 x_2 x_1' x_2' + {x_2}^2 {x_2'}^2 \\
&= (x_1^2, \sqrt{2} x_1 x_2, x_2^2) \cdot ({x_1'}^2, \sqrt{2} x_1' x_2', {x_2'}^2)
\end{aligned}
$$

- 多項式カーネル（2次）の展開

$$
\begin{aligned}
K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') &= (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}' + 1)^2 \\
&= (x_1 x_1' + x_2 x_2 + 1')^2 \\
&= x_1^2 {x_1'}^2 + {x_2}^2 {x_2'}^2 + 2 x_1 x_2 x_1' x_2' + 2 x_1 x_1' + \ 2 x_2 x_2' + 1 \\
&= (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2} x_1 x_2, \sqrt{2} x_1, \sqrt{2} x_2, 1) \cdot \\
&\qquad (x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2} x_1' x_2', \sqrt{2} x_1', \sqrt{2} x_2', 1)
\end{aligned}
$$