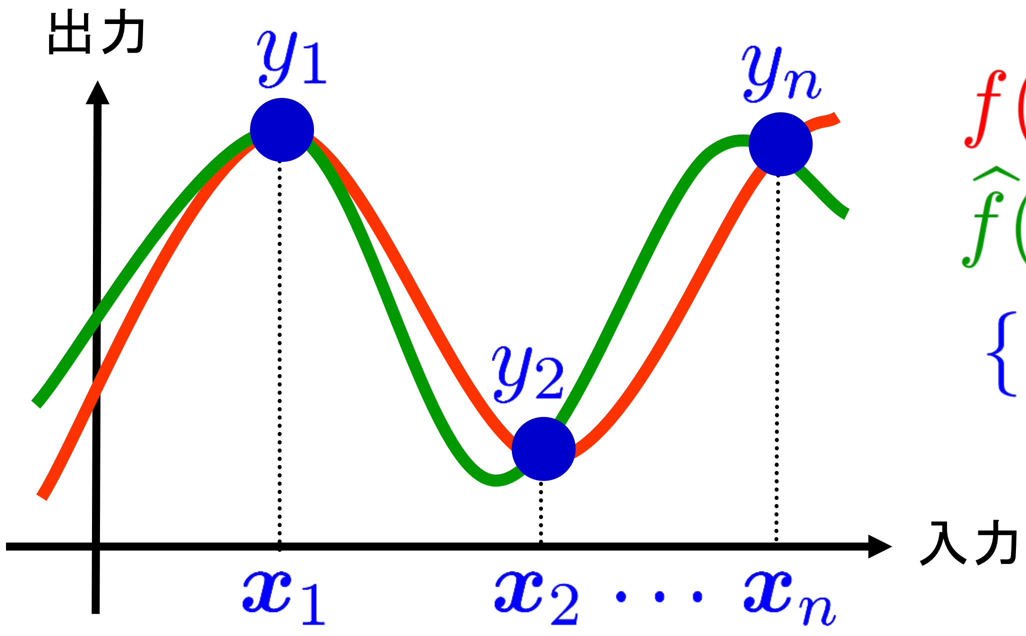
スパース回帰
（５章）

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

回帰 ＝ 関数近似



$f(\boldsymbol{x})$:学習したい真の関数

$\widehat{f}(\boldsymbol{x})$:学習結果の関数

$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$:訓練標本

$$y_i = f(\boldsymbol{x}_i) \ (+\text{noise})$$

訓練標本から真の関数にできるだけ近い関数を求める

パラメータに関する線形モデル

- **線形モデル**:

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

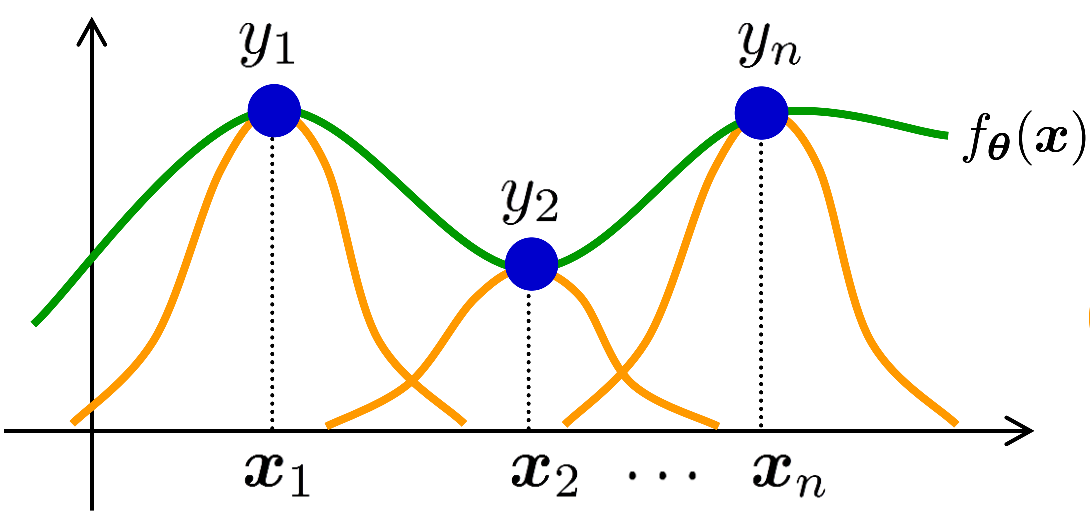
$\{\phi_j(\boldsymbol{x})\}_{j=1}^{b}$:基底関数

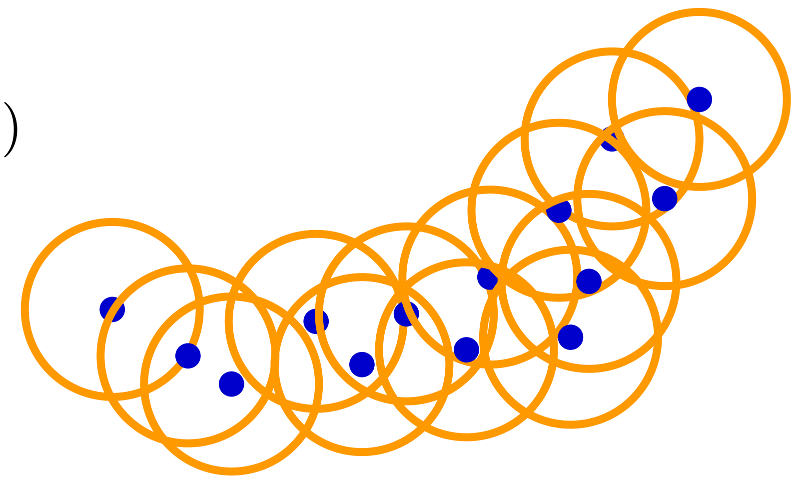
- **カーネルモデル**:

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$$

ガウスカーネル

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}\|^2}{2h^2}\right)$$

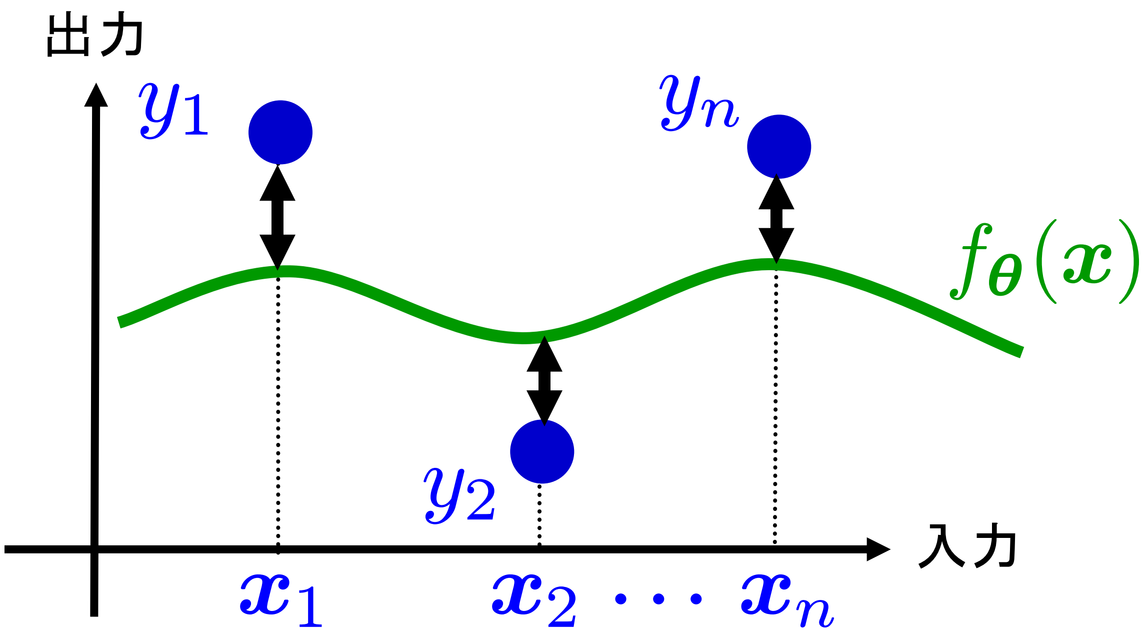




最小二乗回帰

- 訓練出力との二乗誤差を最小にする:

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{n} \left(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i \right)^2$$



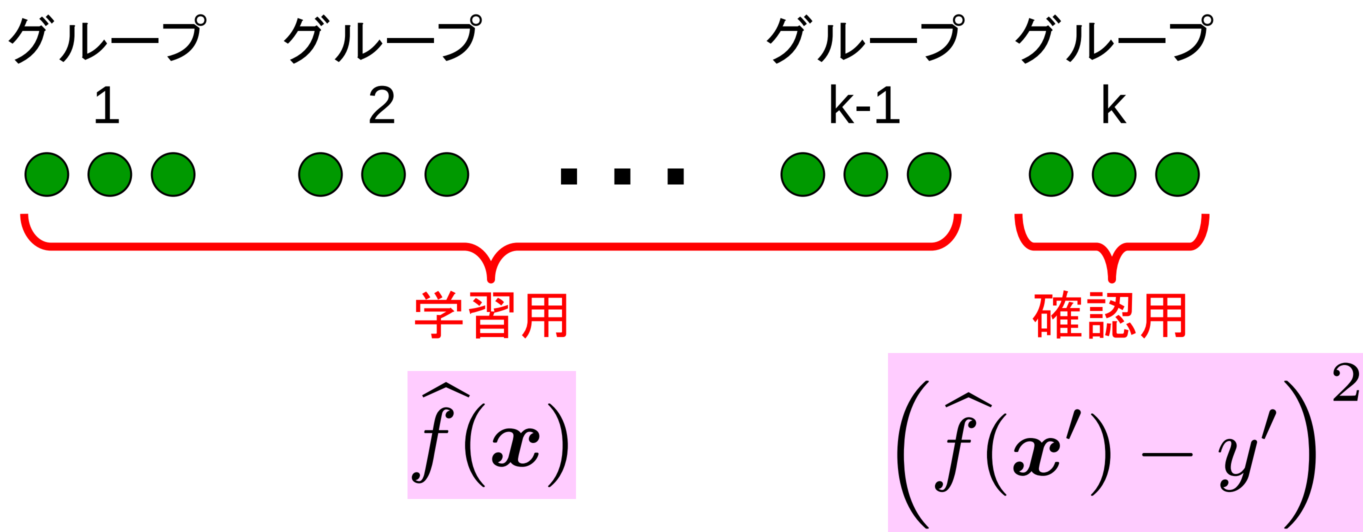
正則化

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \left[\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\Big(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i\Big)^2}_{\text{訓練出力に対する適合の良さ}} + \frac{\lambda}{2}\underbrace{\|\boldsymbol{\theta}\|^2}_{\text{パラメータの値が大きくなり過ぎることに対する罰則（正則化）}} \right]$$

- 訓練出力に対する適合のよさとパラメータの値の大きさをバランスよく小さくし，過適合を避ける

交差確認によるモデル選択

- 訓練標本 $\mathcal{Z}=\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$ をk分割する: $\{\mathcal{Z}_i\}_{i=1}^{k}$
- $\mathcal{Z}_i$ 以外を使って関数を学習する
- 残った $\mathcal{Z}_i$ を使ってテスト誤差を確認する
- これを全ての組み合わせに対して繰り返し，平均を出力する



モデルのスパース性

- パラメータ数が多いと推定値の計算が大変
  - 例えばカーネルモデルでは,

    パラメータ数 ＝ 訓練標本数

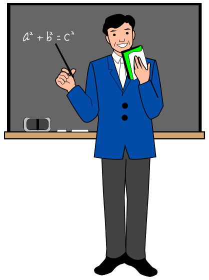
    なので訓練標本数が多いとき計算が大変

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$$

- 多くのパラメータ値がゼロになれば,
  出力値の計算が簡単になり, 解釈性も向上

モデルのスパース性

- ナイーブな方法1：
  - あらかじめいくつかのパラメータを使用しないことにする
  - パラメータが d 個ある時，選び方は 2^d 通り
  - d が大きい時はとても網羅しきれない
- ナイーブな方法2：
  - ℓ_2-正則化回帰で得られたパラメータのうち，絶対値の小さいものをゼロに丸めてしまう
  - 丸め誤差が発生する



講義の流れ

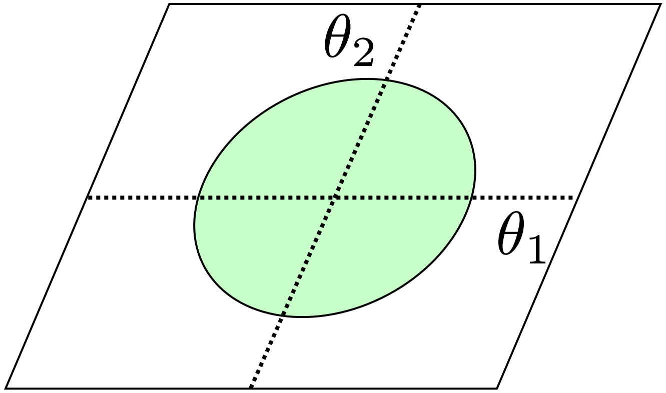
1. ℓ_1-制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張

ℓ_1-制約付き最小二乗回帰

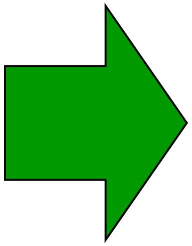
- モデルをℓ_1-超球に限定する

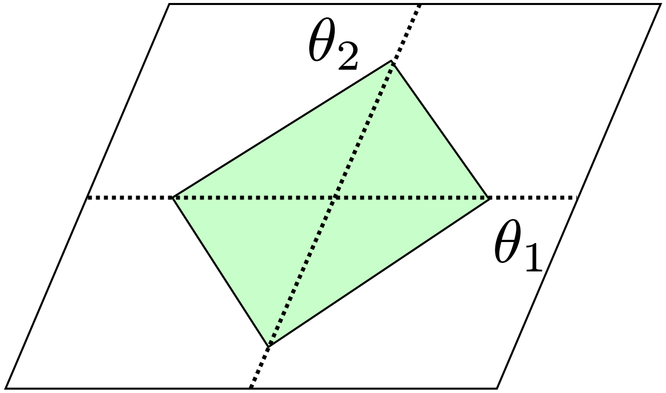
$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\Big(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i\Big)^2 \quad \text{subject to } \|\boldsymbol{\theta}\|_1 \le R$$

$$R \ge 0 \qquad \|\boldsymbol{\theta}\|_1 = \sum_{j=1}^{b} |\theta_j|$$



ℓ_2-制約付き最小二乗回帰

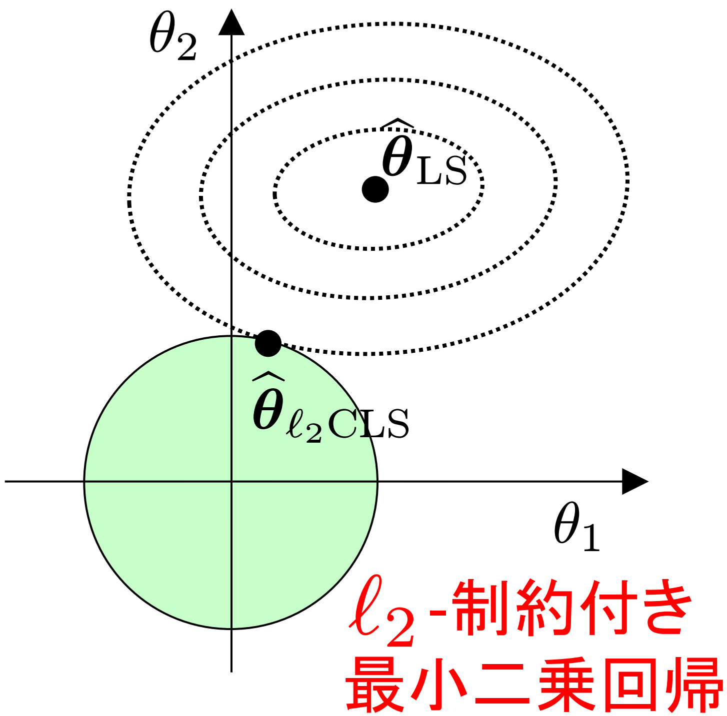


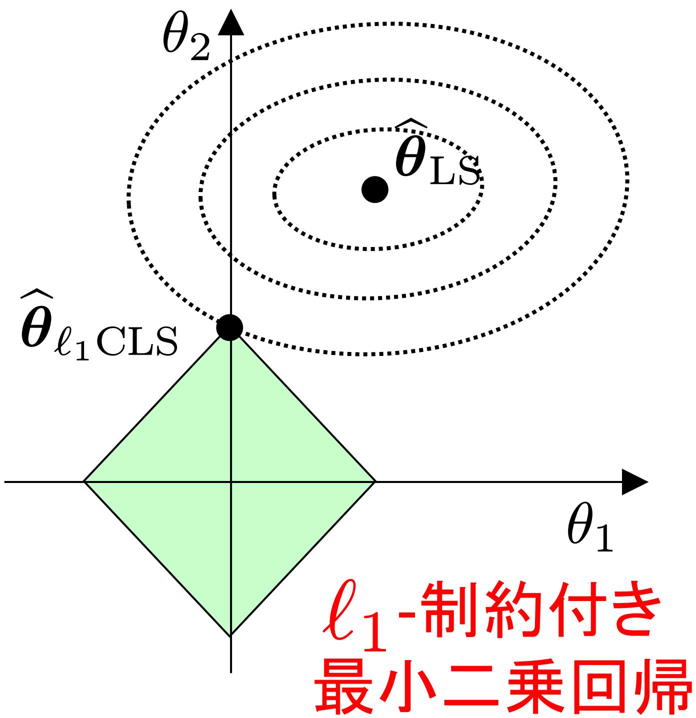


ℓ_1-制約付き最小二乗回帰

なぜスパースな解が得られるか？

- 解が軸の上に乗ることが多い

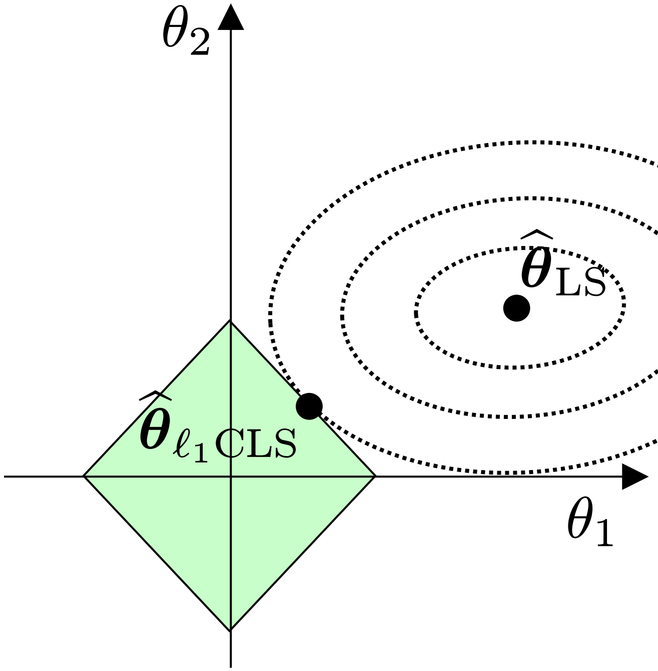




- スパース回帰あるいは LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) と呼んだりする

なぜスパースな解が得られるか？

- 両方の変数が本質的に必要な場合は
  軸の上に乗らない



例

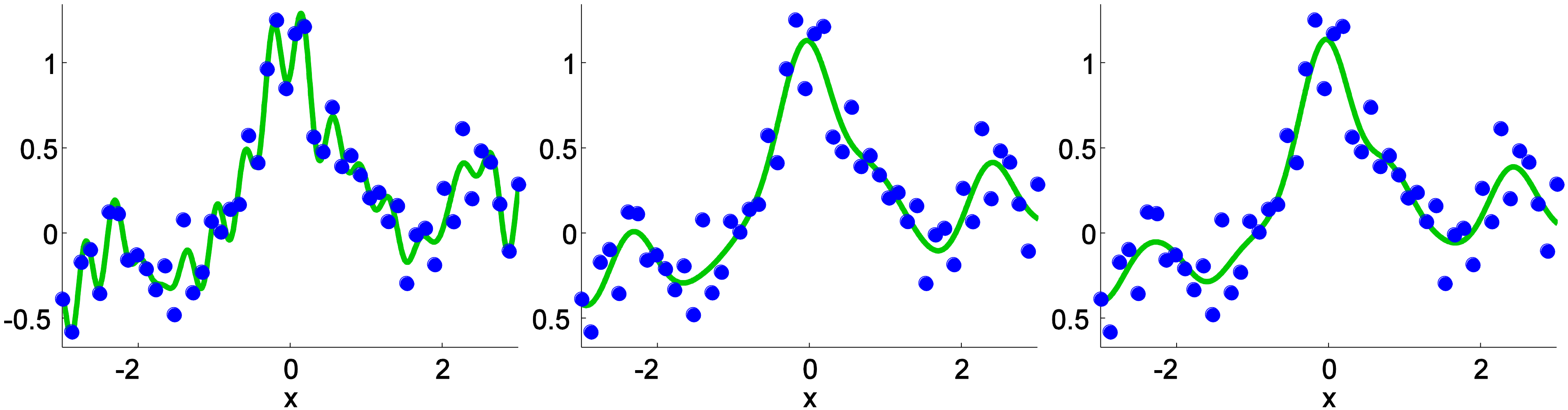
- ガウスカーネルモデル：

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$$

解の計算法は後述

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}\|^2}{2h^2}\right)$$

通常の最小二乗回帰　　ℓ_2-制約付き　　ℓ_1-制約付き



- ℓ_1-制約の結果はℓ_2-制約と見た目は大体同じ
- しかし，ℓ_1-制約は50個のパラメータのうち38個が0

特徴選択

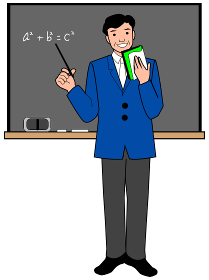
- 入力に関する線形モデル

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\theta}^\top \boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{x} = (x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})^\top$$

に対してスパース学習を行なうと，いくつかの入力変数が使われなくなる．

⇒ 予測に必要な特徴が自動的に選択される

- 例：重要な遺伝子の自動選択
- 通常は 2^d の組み合わせを調べる必要があるが，スパース学習では λ だけを決めればよい．



講義の流れ

1. ℓ_1-制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張

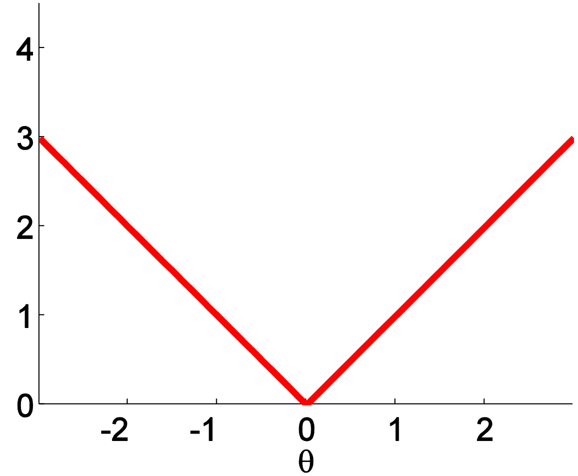
解の求め方

- ℓ_1-超球への制限と等価な表現:

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

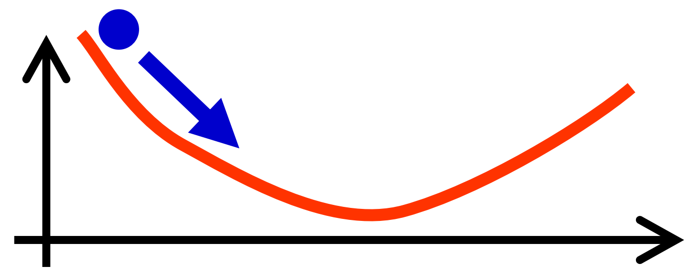
$\lambda\ (\geq 0)$: R から決まる定数

- 実際には R でなく λ を直接指定すればよい.
- しかし, 絶対値は原点で微分できないため, 上記の最適化問題は簡単には解けない

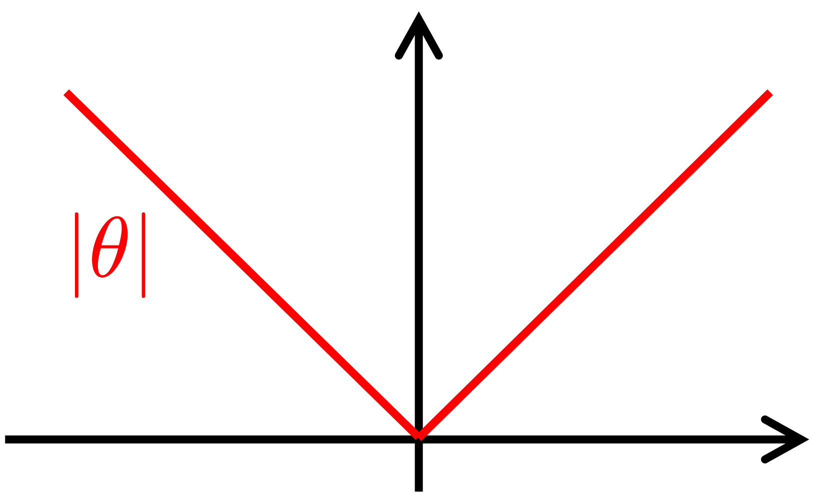


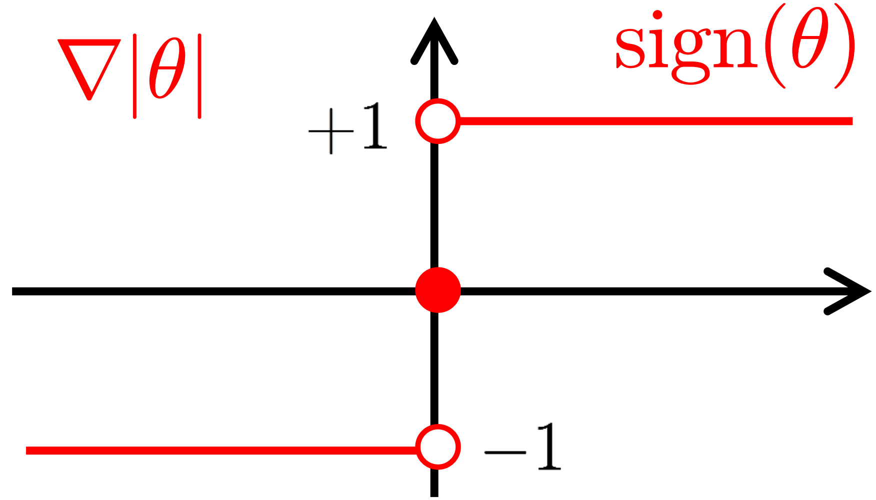
近似的勾配法

- $\boldsymbol{\theta} \longleftarrow \boldsymbol{\theta} - \varepsilon \nabla J(\boldsymbol{\theta})$



- 絶対値の微分を近似する





- しかし，多くの解がゼロになるため，実際には不安定でうまくいかない

交互方向乗数法

■ 最適化問題:
$$\min_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{z}} \left[f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z}) \right]$$
$$\text{subject to } \boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} = \boldsymbol{c}$$

■ 拡張ラグランジュ関数:
$$L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}) = f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{u}^\top (\boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} - \boldsymbol{c})$$
$$+ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} - \boldsymbol{c}\|^2$$

■ 解の更新式:

- $$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}^{(k)}, \boldsymbol{u}^{(k)})$$
- $$\boldsymbol{z}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{z}} L(\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}^{(k)})$$
- $$\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{A\theta}^{(k+1)} + \boldsymbol{Bz}^{(k+1)} - \boldsymbol{c}$$

交互方向乗数法

- 最適化問題: $\min_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{z}} [f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z})]$

  subject to $\boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} = \boldsymbol{c}$

- 拡張ラグランジュ関数:

$$L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}) = f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{u}^\top (\boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} - \boldsymbol{c})$$

$$+\frac{1}{2}\|\boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} - \boldsymbol{c}\|^2$$

等式制約を外れ過ぎると
大きくなる

- $\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}^{(k)}, \boldsymbol{u}^{(k)})$
- $\boldsymbol{z}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{z}} L(\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}^{(k)})$
- $\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{A\theta}^{(k+1)} + \boldsymbol{Bz}^{(k+1)} - \boldsymbol{c}$

交互方向乗数法

- 最適化問題: $\displaystyle \min_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{z}} \left[f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z}) \right]$

$$\text{subject to } \boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} = \boldsymbol{c}$$

- 拡張ラグランジュ関数:

$$L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}) = f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{u}^\top (\boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} - \boldsymbol{c})$$

$$+ \frac{1}{2} \| \boldsymbol{A\theta} + \boldsymbol{Bz} - \boldsymbol{c} \|^2$$

- 解の更新式:
  - $\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\mathrm{argm}}$
  - $\boldsymbol{z}^{(k+1)} = \underset{\boldsymbol{z}}{\mathrm{argm}}$
  - $\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{A\theta}^{(k+1)} + \boldsymbol{Bz}^{(k+1)} - \boldsymbol{c}$

等式制約を外れた方向へ
罰則を増やす

ℓ_1-制約付き回帰への適用

- 線形モデル $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{b} \theta_j \phi_j(\boldsymbol{x})$ における

  ℓ_1-正則化最小二乗法の目的関数:

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \left[\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|_1 \right]$$

$$\boldsymbol{\Phi} = \begin{pmatrix} \phi_1(\boldsymbol{x}_1) & \cdots & \phi_b(\boldsymbol{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\boldsymbol{x}_n) & \cdots & \phi_b(\boldsymbol{x}_n) \end{pmatrix}$$

ℓ_1-制約付き回帰への適用

- 線形モデル $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{b} \theta_j \phi_j(\boldsymbol{x})$ における

  ℓ_1-正則化最小二乗法の目的関数:

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \left[\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|_1 \right]$$

- これは以下と等価

$$\min_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}} \left[\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{z}\|_1 \right] \quad \text{subject to } \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{z}$$

演習

- 解の更新式:
  - $\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}^{(k)}, \boldsymbol{u}^{(k)})$
  - $\boldsymbol{z}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{z}} L(\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}^{(k)})$
  - $\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{z}^{(k+1)} - \boldsymbol{c}$

$$L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}) = f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{u}^\top(\boldsymbol{A}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{z} - \boldsymbol{c}) + \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{z} - \boldsymbol{c}\|^2/2$$

- $f(\boldsymbol{\theta}) = \|\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}\|^2/2,\ g(\boldsymbol{z}) = \lambda\|\boldsymbol{z}\|_1,\ \boldsymbol{A} = -\boldsymbol{B} = I$
  $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{0}$ に対して θ と u の更新式を導出せよ

解答＋宿題

- $$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\Phi}^\top(\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{u} + \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$$

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}^{(k)}, \boldsymbol{u}^{(k)})$$

$$= (\boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{I})^{-1}(\boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}^{(k)} - \boldsymbol{u}^{(k)})$$

- $\boldsymbol{z}$についての更新式(証明は宿題)：

$$\boldsymbol{z}^{(k+1)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{z}} L(\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{u}^{(k)})$$

$$= \max(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\theta}^{(k+1)} + \boldsymbol{u}^{(k)} - \lambda\boldsymbol{1})$$

$$+ \min(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\theta}^{(k+1)} + \boldsymbol{u}^{(k)} + \lambda\boldsymbol{1})$$

要素毎の
最大・最小

- また，$\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{\theta}^{(k+1)} - \boldsymbol{z}^{(k+1)}$

線形モデルを用いた ℓ_1-正則化最小二乗法に対する交互方向乗数法

■ 適当な初期値から，以下の更新を繰り返す：

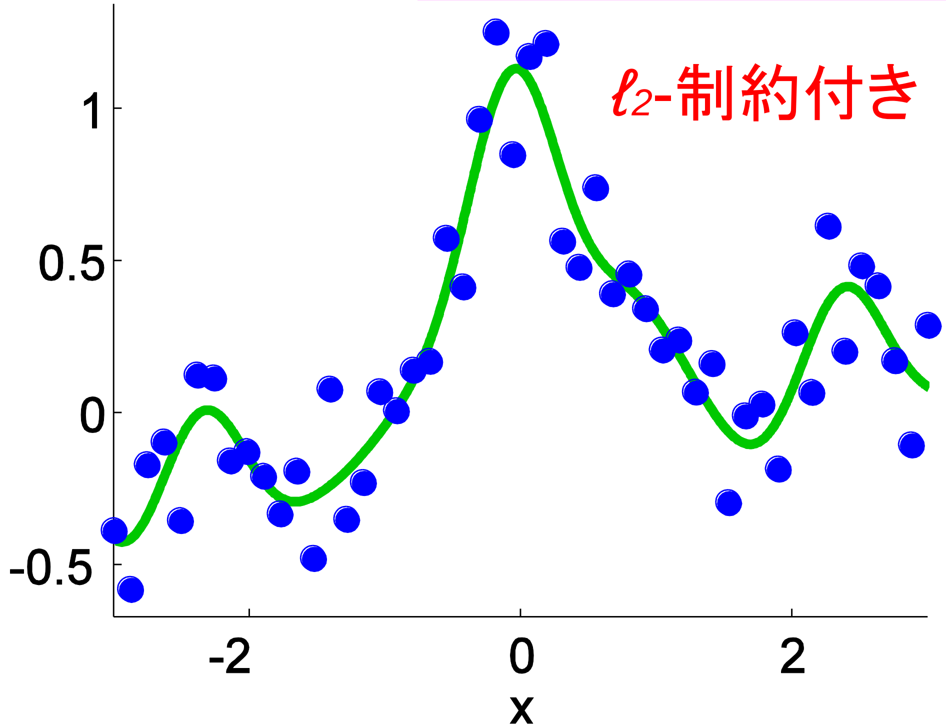
- $\boldsymbol{\theta} \longleftarrow (\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{I})^{-1}(\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} - \boldsymbol{u})$

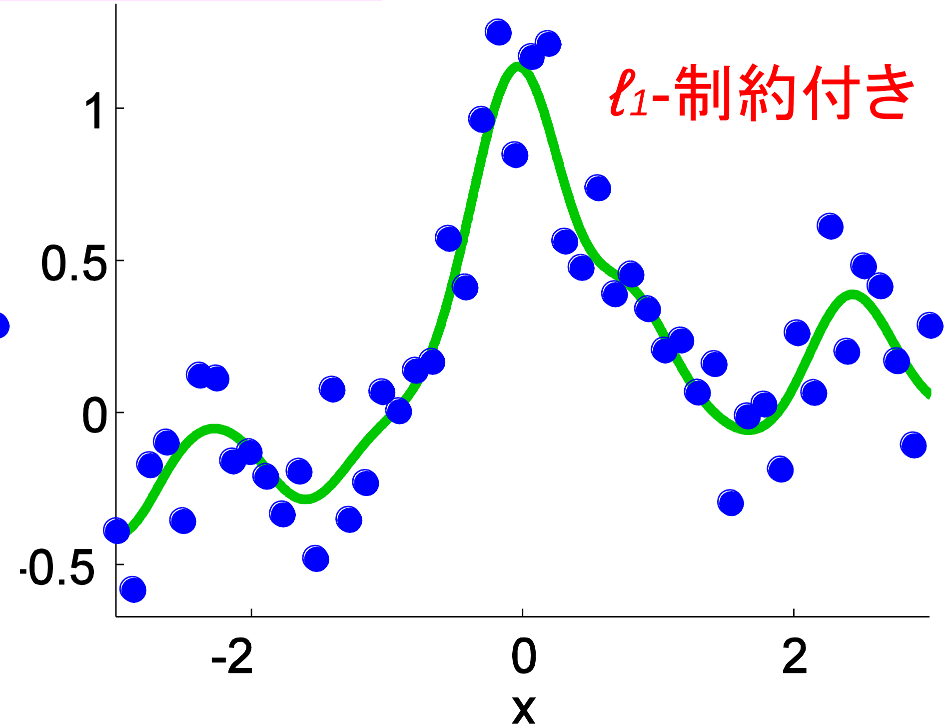
- $\boldsymbol{z} \longleftarrow \max(\mathbf{0}, \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{u} - \lambda \mathbf{1})$
  $- \max(\mathbf{0}, -\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{u} - \lambda \mathbf{1})$

- $\boldsymbol{u} \longleftarrow \boldsymbol{u} + \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{z}$

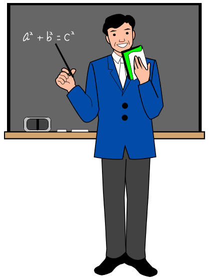
実行例

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j\|^2}{2h^2}\right)$$





- ℓ_1-制約の結果はℓ_2-制約と見た目は大体同じ
- しかし，ℓ_1-制約は**50個のパラメータのうち38個が0**



講義の流れ

1. ℓ_1 -制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張
   - A) オンライン学習
   - B) 一般化ℓ_1-ノルム
   - C) ℓ_p -ノルム
   - D) $\ell_1+\ell_2$-ノルム
   - E) $\ell_{1,2}$ -ノルム
   - F) トレースノルム

確率的勾配法によるオンライン学習（最小二乗法）

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\Big(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i\Big)^2$$

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

1. パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を適当に初期化
2. 標本 $(\boldsymbol{x}, y)$ をランダムに選び，勾配を少し降下

$$\boldsymbol{\theta} \longleftarrow \boldsymbol{\theta} - \varepsilon\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\frac{(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) - y)^2}{2}$$

$$= \boldsymbol{\theta} - \varepsilon\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})\Big(\boldsymbol{\theta}^\top\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) - y\Big)$$

ステップ幅

$\varepsilon > 0$

3. 収束するまで 2. を繰り返す

■どうやってℓ_1-制約条件を満たすか？

スパースオンライン学習

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\Big(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i\Big)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{b}|\theta_j|$$

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

1. パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を適当に初期化
2. 標本 $(\boldsymbol{x}, y)$ をランダムに選び，勾配を少し降下

$$\boldsymbol{\theta} \longleftarrow \boldsymbol{\theta} - \varepsilon\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})\Big(\boldsymbol{\theta}^\top\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) - y\Big)$$

ステップ幅

$\varepsilon > 0$

3. 解をスパースにする:

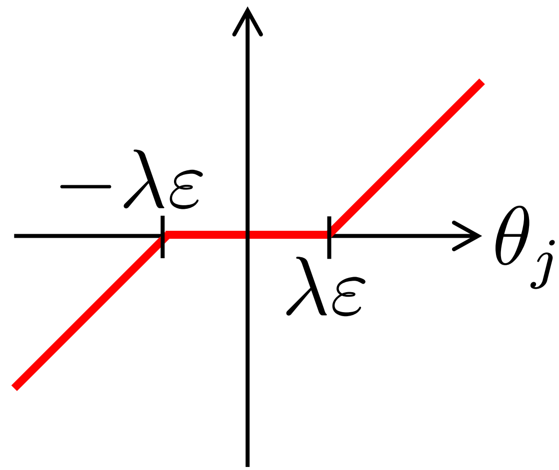
$$\forall j = 1, \ldots, b, \quad \theta_j \longleftarrow \begin{cases} \max(0, \theta_j - \lambda\varepsilon) & (\theta_j > 0), \\ \min(0, \theta_j + \lambda\varepsilon) & (\theta_j \leq 0). \end{cases}$$

4. 収束するまで 2, 3 を繰り返す

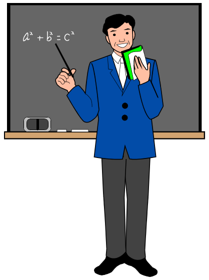
スパース化のイメージ

$$\theta_j \longleftarrow \begin{cases} \max(0, \theta_j - \lambda\varepsilon) & (\theta_j > 0), \\ \min(0, \theta_j + \lambda\varepsilon) & (\theta_j \leq 0). \end{cases}$$

$$\max(0, \theta_j - \lambda\varepsilon) + \min(0, \theta_j + \lambda\varepsilon)$$



- 正則化により原点に引き寄せられる
- このように確率的勾配法に対して正則化項に対応した補正を行う手法を近接勾配法という



講義の流れ

1. ℓ_1-制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張
   A) オンライン学習
   B) 一般化ℓ_1-ノルム
   C) ℓ_p-ノルム
   D) $\ell_1+\ell_2$-ノルム
   E) $\ell_{1,2}$-ノルム
   F) トレースノルム

一般化ℓ_1–ノルム

$$\|\boldsymbol{F}\boldsymbol{\theta}\|_1 = \sum_j \left| \sum_{j'} F_{j,j'} \theta_{j'} \right|$$

■ 例：隣接要素間の差分のノルム：

$$\sum_j |\theta_{j+1} - \theta_j|$$

$$F_{j,j'} = \begin{cases} 1 & (j' = j+1) \\ -1 & (j' = j) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

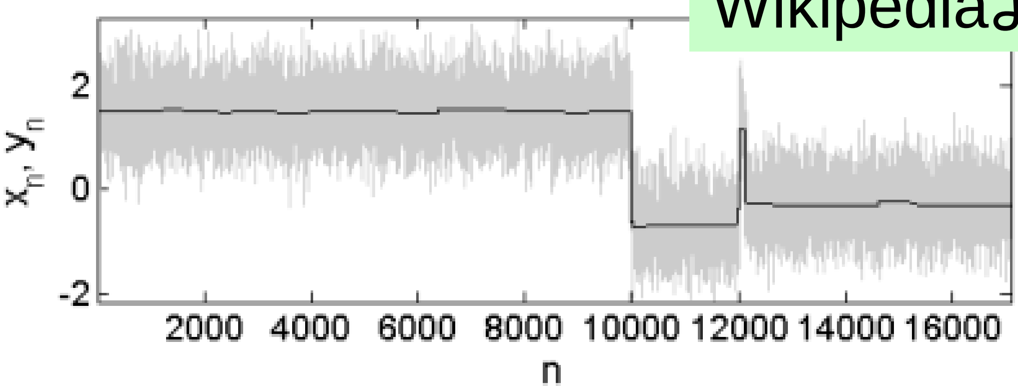
一般化ℓ_1-制約付き最小二乗回帰

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\Big(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i\Big)^2 \quad \text{subject to } \|\boldsymbol{F}\boldsymbol{\theta}\|_1 \leq R$$

$$R \geq 0$$

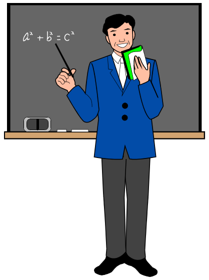
■ 例: 全変動ノイズ除去

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}\|^2 \quad \text{subject to } \sum_{j}|\theta_{j+1} - \theta_j| \leq R$$



Wikipediaより

$$F_{j,j'} = \begin{cases} 1 & (j' = j+1) \\ -1 & (j' = j) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$



講義の流れ

1. ℓ_1 -制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張
   A) オンライン学習
   B) 一般化ℓ_1-ノルム
   C) ℓ_p -ノルム
   D) $\ell_1+\ell_2$-ノルム
   E) $\ell_{1,2}$ -ノルム
   F) トレースノルム

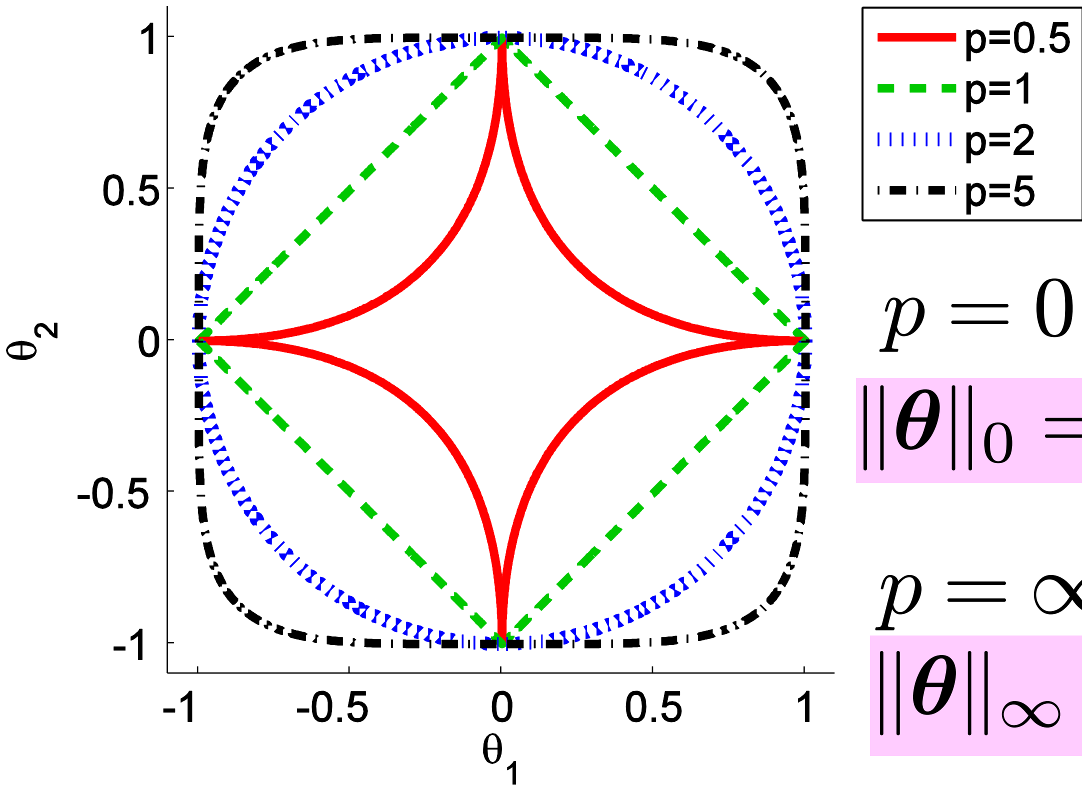
ℓ_p-ノルム

$$\|\boldsymbol{\theta}\|_p = \left(\sum_{j=1}^{b} |\theta_j|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

$$p \geq 1$$

$$\|\boldsymbol{\theta}\|_p = \sum_{j=1}^{b} |\theta_j|^p$$

$$p \leq 1$$



$$p = 0$$

$$\|\boldsymbol{\theta}\|_0 = \#\ \text{non-zero elements}$$

$$p = \infty$$

$$\|\boldsymbol{\theta}\|_\infty = \max\{|\theta_1|, \ldots, |\theta_b|\}$$

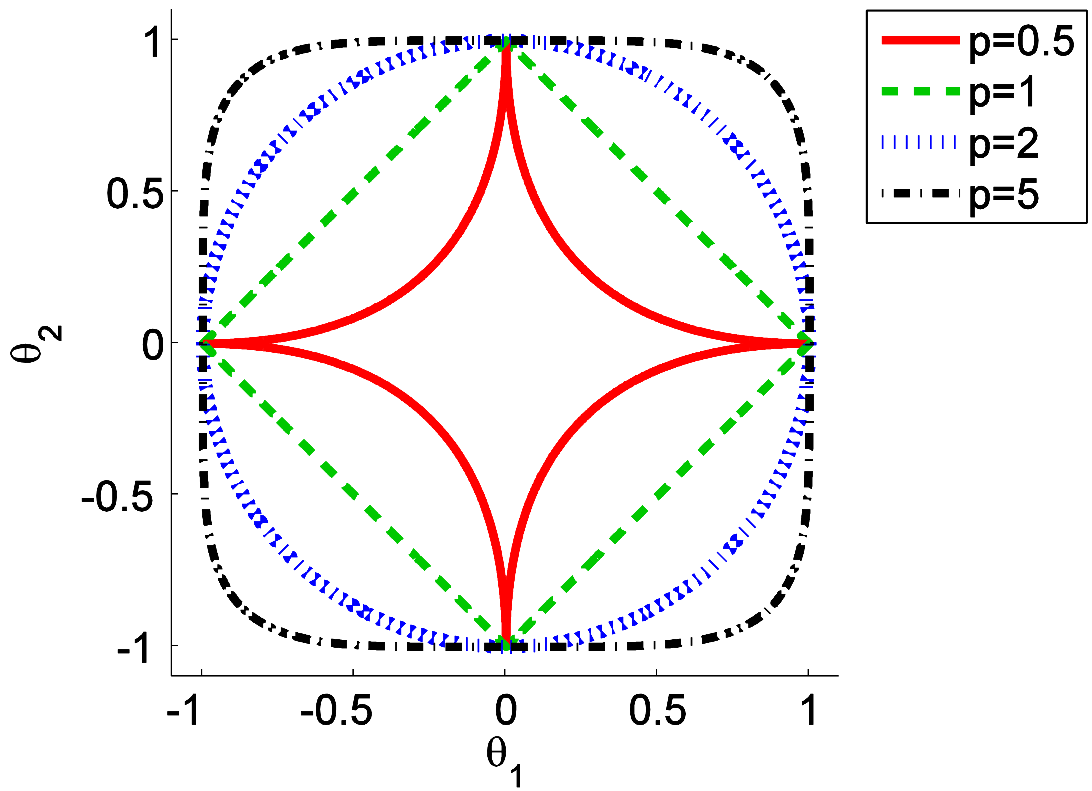
ℓ_p-制約付き最小二乗回帰

- モデルをℓ_p-超球に限定する

$p \geq 0$

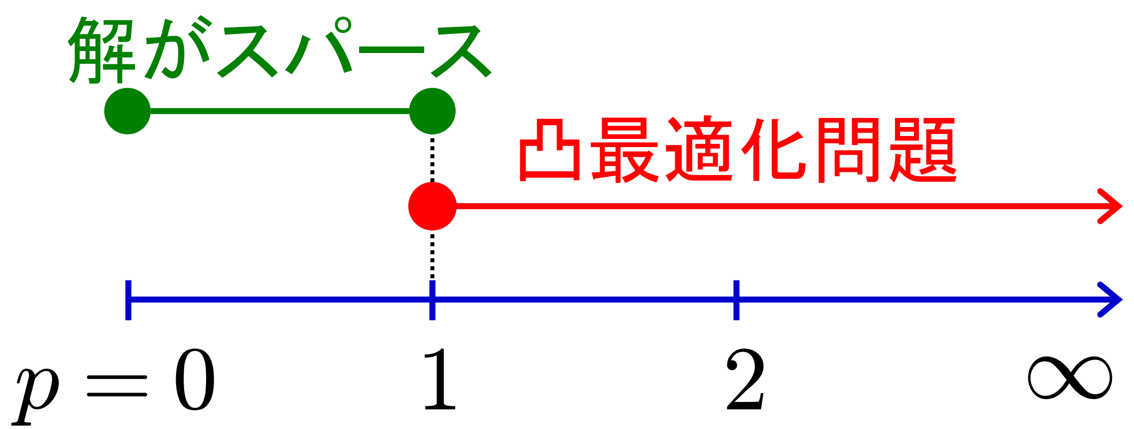
$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \Big(f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i) - y_i \Big)^2 \quad \text{subject to } \|\boldsymbol{\theta}\|_p \leq R$$

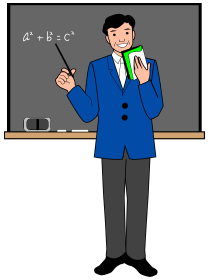
$R \geq 0$



ℓ_p-制約付き最小二乗回帰

- 解がスパースになる: $0 \leq p \leq 1$
- 最適化問題が凸: $p \geq 1$
  (大域的最適解が容易に求まる)
- 両方を満たすのは $p = 1$ のみ！





講義の流れ

1. ℓ_1 -制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張
   - A) オンライン学習
   - B) 一般化ℓ_1-ノルム
   - C) ℓ_p -ノルム
   - D) $\ell_1+\ell_2$-ノルム
   - E) $\ell_{1,2}$ -ノルム
   - F) トレースノルム

ℓ_1 -制約付き最小二乗回帰の問題点

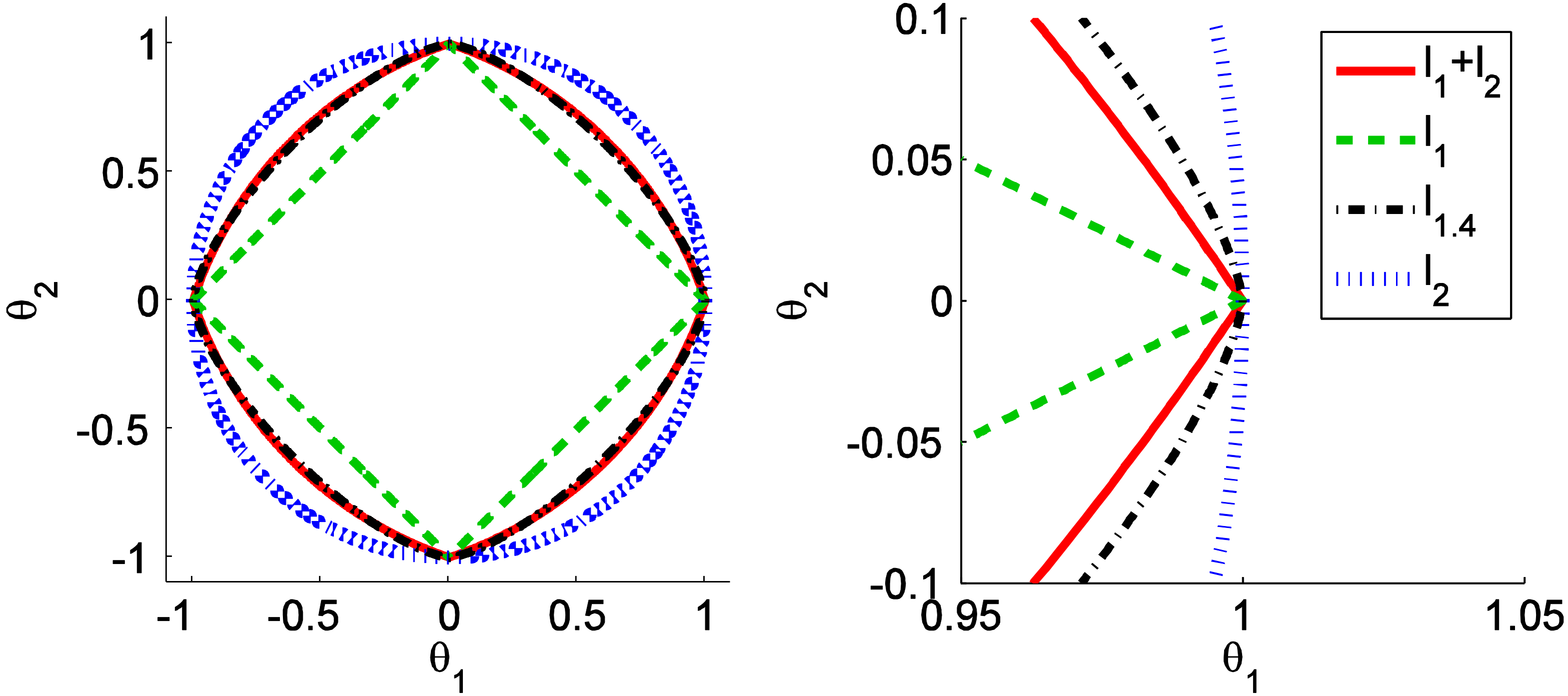
$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{b}\theta_j\phi_j(\boldsymbol{x}_i)-y_i\right)^2 \quad \text{subject to} \sum_{j=1}^{b}|\theta_j| \leq R$$

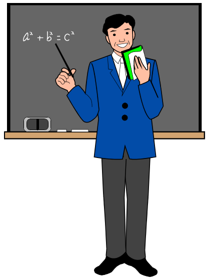
- いくつかの基底関数 $\{\phi_j(\boldsymbol{x})\}_{j=1}^{b}$ が似ている時，それらの一つしか選ばれない
- $b < n$ の時，ℓ_2-制約付き最小二乗回帰より性能がやや劣ると言われている

$\ell_1+\ell_2$ -制約付き最小二乗回帰

$$(1-\tau)\sum_{j=1}^{b}|\theta_j| + \tau\sum_{j=1}^{b}\theta_j^2 \leq R \qquad 0 \leq \tau < 1$$

- $\ell_{1.4}$-球と似ているが，$\ell_1+\ell_2$ -球は尖っている





講義の流れ

1. ℓ_1-制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張
   - A) オンライン学習
   - B) 一般化ℓ_1-ノルム
   - C) ℓ_p-ノルム
   - D) $\ell_1+\ell_2$-ノルム
   - E) $\ell_{1,2}$-ノルム
   - F) トレースノルム

$\ell_{1,2}$-ノルム

- 設定：似た性質の変数グループがあるが，それらが役に立つかはわからない
- パラメータ $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_b)^\top$ が

$$\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}^{(1)\top}, \ldots, \boldsymbol{\theta}^{(t)\top})^\top \qquad \boldsymbol{\theta}^{(j)} \in \mathbb{R}^{b_j}$$

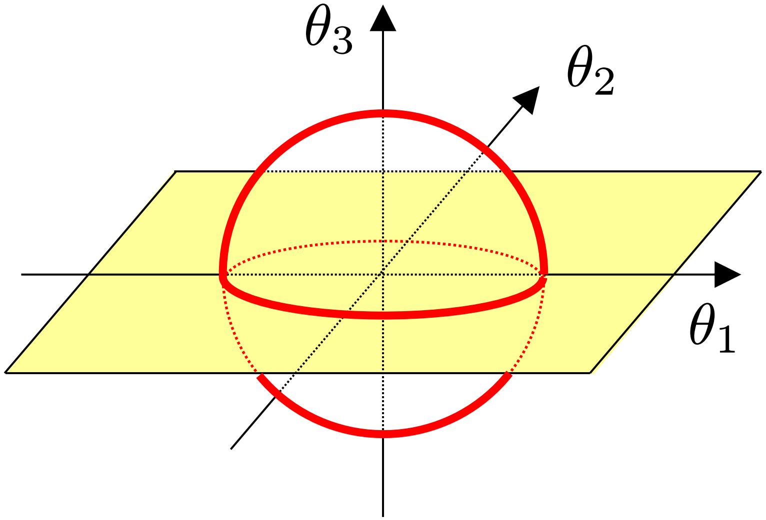
というグループ構造を持っているとき，

$$\|\boldsymbol{\theta}\|_{1,2} = \sum_{j=1}^{t} \|\boldsymbol{\theta}^{(j)}\|_2$$

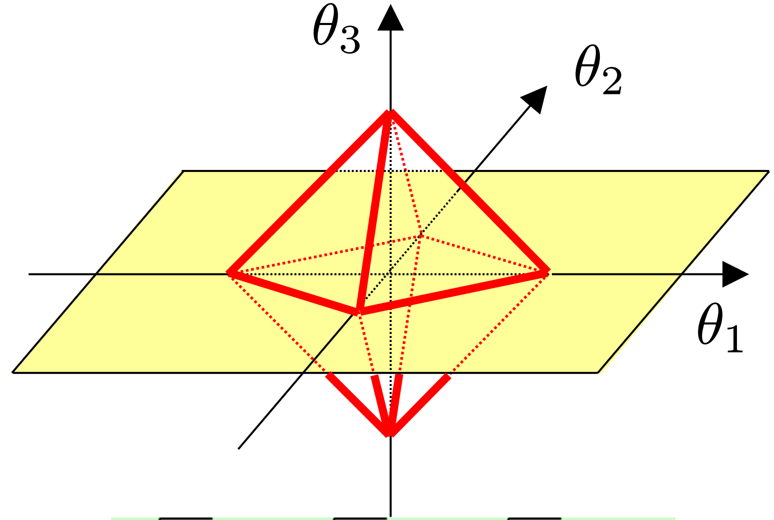
を$\ell_{1,2}$-ノルムとよび，このようなノルムで正則化することをグループ正則化という

演習

- 3次元のℓ_2-ノルムとℓ_1-ノルムの制約条件は, 以下のように図示できる.



$$\sqrt{\theta_1^2+\theta_2^2+\theta_3^2} \le R$$

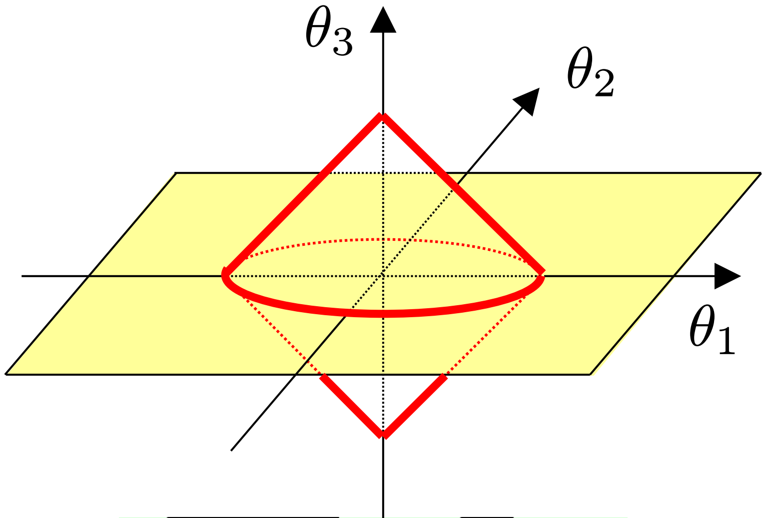


$$\sqrt{\theta_1^2}+\sqrt{\theta_2^2}+\sqrt{\theta_3^2} \le R$$

- 同様に以下の$\ell_{1,2}$-ノルム制約を満たす領域を図示し, どのようなスパース解が得られるか説明せよ

$$\sqrt{\theta_1^2+\theta_2^2}+\sqrt{\theta_3^2} \le R$$

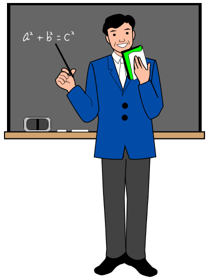
解答例



$$\sqrt{\theta_1^2+\theta_2^2}+\sqrt{\theta_3^2} \leq R$$

- グループごとにスパースな解が得られる.

$$\sum_{j=1}^{t} \|\boldsymbol{\theta}^{(j)}\| \leq R$$



講義の流れ

1. ℓ_1 -制約付き最小二乗回帰
2. 解の計算法
3. 様々な拡張
   - A) オンライン学習
   - B) 一般化ℓ_1-ノルム
   - C) ℓ_p -ノルム
   - D) $\ell_1+\ell_2$-ノルム
   - E) $\ell_{1,2}$ -ノルム
   - F) トレースノルム

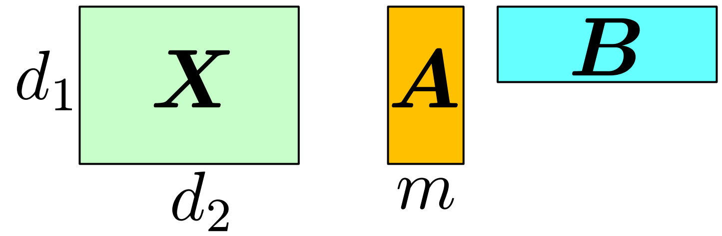
低ランク行列補完

- 推薦システムにおいて未知の評価を補完したい

	映画1	映画2	映画3	映画4	$\cdots$
ユーザ1	1	4	*	*	
ユーザ2	*	3	5	2	
ユーザ3	2	*	4	3	
$\vdots$					

- 仮定:各ユーザの評価 $(X_{i,1}, X_{i,2}, \dots, X_{i,d_2})$ は m 人の仮想ユーザの評価$(B_{k,1}, B_{k,2}, \dots, B_{k,d_2})$ の線形結合で近似可能(=低ランク表現可能)

$$X_{i,\cdot} = \sum_{k=1}^{m} A_{i,k} B_{k,\cdot}$$



低ランク行列補完

- $\boldsymbol{X}$のうち観測されている要素を $\{X_{i_k,j_k}\}_{k=1}^{n}$ とすると, ランクが m 以下という制約のもとでの最小二乗行列補完は

$$\min_{\boldsymbol{\Theta}\in\mathbb{R}^{d_1\times d_2}} \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\left(X_{i_k,j_k}-\boldsymbol{\Theta}_{i_k,j_k}\right)^2 \ \text{subject to } \operatorname{rank}(\boldsymbol{\Theta})\leq m$$

- この最適化問題は一般に計算困難

トレースノルム

- 行列 $\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{R}^{d_1 \times d_2}$ に対するトレースノルム:

$$\|\boldsymbol{\Theta}\|_{\mathrm{tr}} = \sum_{k=1}^{\min(d_1,d_2)} \sigma_k$$

$\sigma_k \geq 0$: 行列 $\boldsymbol{\Theta}$ の特異値

  - 特異値: $\boldsymbol{\Theta}^\top \boldsymbol{\Theta}$ の固有値の平方根
    （正方行列なら $\boldsymbol{\Theta}$ の固有値の絶対値）
  - トレースノルム: 特異値に対するℓ_1-ノルム
- 行列のランクは特異値の非ゼロ要素の数に等しい

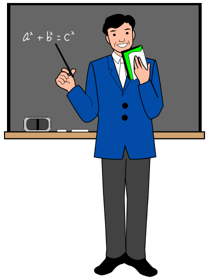
トレースノルム制約付き最小二乗回帰

$$\min_{\boldsymbol{\Theta}\in\mathbb{R}^{d_1\times d_2}} \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\left(X_{i_k,j_k}-\boldsymbol{\Theta}_{i_k,j_k}\right)^2 \quad \text{subject to } \|\boldsymbol{\Theta}\|_{\mathrm{tr}} \le R$$

- トレースノルム制約は,
  特異値に対するℓ_1-ノルム制約
  →特異値がスパースになる
  →行列 $\boldsymbol{\Theta}$ が低ランクになる！

スパース回帰：まとめ

- ℓ_1-正則化学習により解をスパースにする
- 解析的に解は求まらない
- スパース回帰の学習アルゴリズムは盛んに研究されており，最新の手法を用いれば，ℓ_2-正則化学習よりも高速に解ける
  - ゼロを初期値として，非零になる要素を見つけながら学習すれば，最終的に零になる要素をほぼ見ることなく学習できる



次回の予告

- ロバスト回帰（6章）

宿題1

- 次式を証明せよ

$$\operatorname*{argmin}_{z} T(z) = \max(0, \theta + u - \lambda) + \min(0, \theta + u + \lambda)$$

（この式はソフト閾値処理とよばれる）

$$\lambda \geq 0$$

$$T(z) = \lambda |z| + u(\theta - z) + \frac{1}{2}(\theta - z)^2$$

宿題2

- ガウスカーネルモデル

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$$

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}'\|^2}{2h^2}\right)$$

に対して，スパース回帰の交互方向乗数法による反復式を求め，適当なデータとモデル（例えば前回の三角多項式基底による回帰）に対してスパース回帰を実行せよ