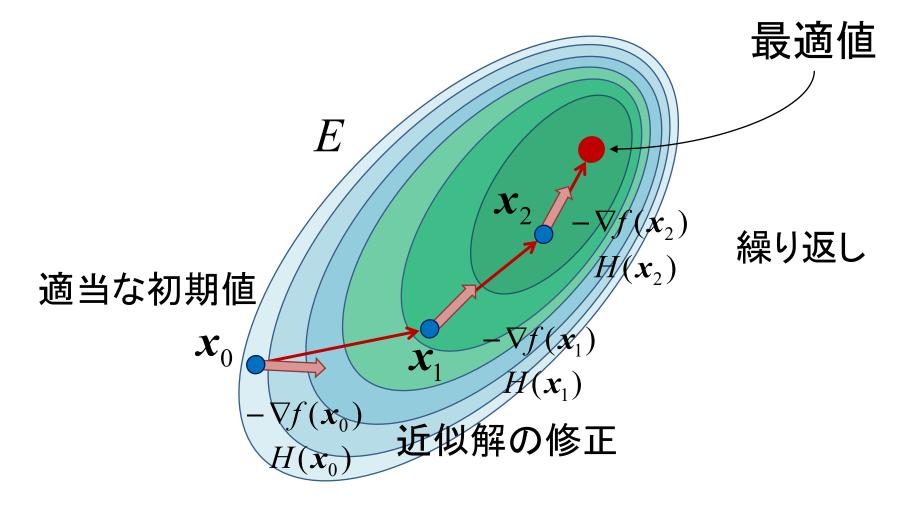
勾配法

最急降下法 共役勾配法 ニュートン法 正則化(L1,L2)



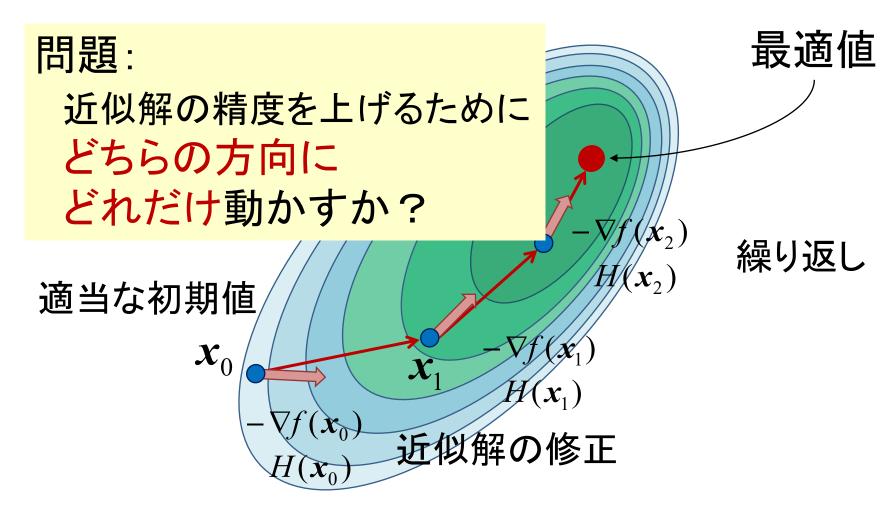
勾配法



勾配(, ヘシアン)(*Eのx*₀における1次(, 2次)の微分)



勾配法

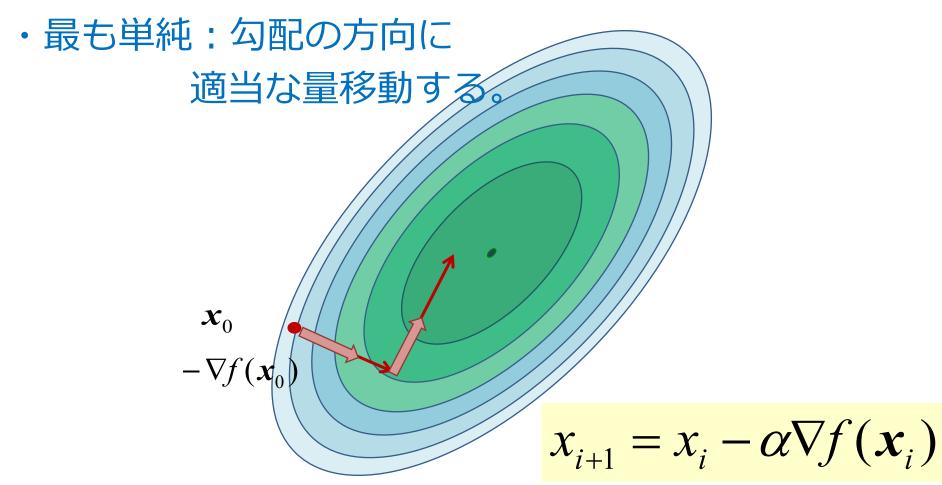


勾配(, ヘシアン)(Eの x_0 における1次(, 2次)の微分)



最急降下法

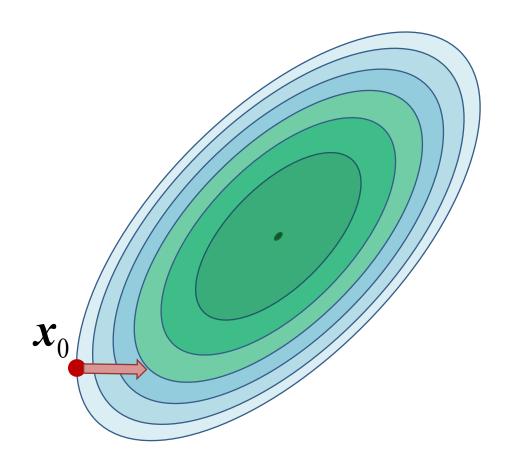
□ 最急降下法:





最急降下法

```
i=0, X_0を決める, 収束するまで繰り返し { x_{i+1} = x_i - \alpha \nabla f(x_i) i = i+1 }
```



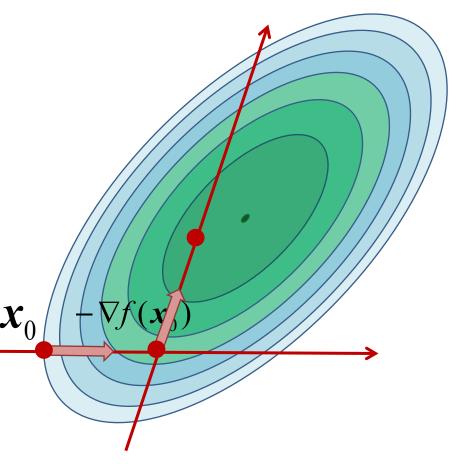


最急降下法

i=0, X_0 を決める, 収束するまで繰り返し { $x_{i+1} = x_i - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_i)$ i = i+1 }



- -∇*f*(*x*) の最適値まで移動 (解析的に求める,ラインサーチで求める)
- ・決まった量移動
- ・過去の勾配の大きさの履歴に応じて移動量を決定

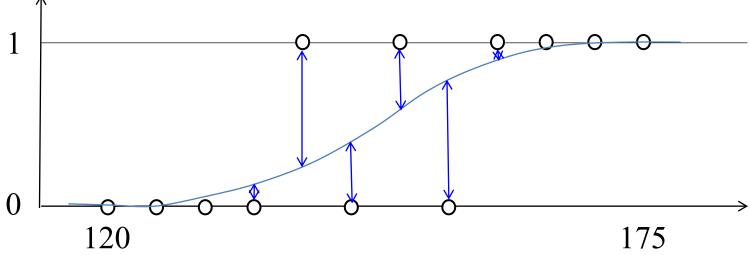




例題

下記の学習データに対し, ロジスティック関数 (シグモイド関数) を当てはめる。

```
(1.20, 0) (1.25, 0) (1.30, 0) (1.35, 0)
(1.40, 1) (1.45, 0) (1.50, 1) (1.55, 0)
(1.60, 1) (1.65, 1) (1.70, 1) (1.75, 1)
```





$$e_n^2 = \frac{1}{2} (\tilde{y}_n - y_n)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{w}^T \mathbf{x})} - y_n \right)^2$$

$$\frac{\partial e_n^2}{\partial \mathbf{w}} = (\tilde{y}_n - y_n) \tilde{y}_n (1 - \tilde{y}_n) \mathbf{x}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}} = \sum_{n=1}^{N} (\tilde{y}_n - y_n) \tilde{y}_n (1 - \tilde{y}_n) \mathbf{x}$$

■ On-line 学習: サンプル毎にパラメタを更新

$$\mathbf{w}_{new} = \mathbf{w}_{prv} - \alpha \frac{\partial e_n^2}{\partial \mathbf{w}}$$

□ バッチ学習:学習データー括でパラメタを更新

$$\mathbf{w}_{new} = \mathbf{w}_{prv} - \alpha \frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}}$$



疑似コーディングの例



プログラムの例 1

```
import numpy as np
from scipy import linalg as la
import matplotlib.pyplot as plt
import copy as cp
```

```
def sigm(z):
    return 1/(1+np.exp(-z))
```

```
trainingData = np.array([[1.20,0],[1.25,0],[1.30,0],[1.35,0],[1.40,1],[1.45,0],[1.50,1],[1.55,0],[1.60,1],[1.65,1],[1.70,1],[1.75,1]])
```

N,nd = trainingData.shape # N : number of samples

nd: dimension



```
true = trainingData[:,1]
                             # true value
D = cp.copy(trainingData)
D[:,nd-1] = np.ones(N)
                             # Data Matrix
TH = 1.0e-7 # threshold for iteration
alpha = 5.0 # learning rate
alpDec = 0.9999 # parameter for alpha decay
                                   # plot resolution
nPlot = 100
pltXaxis = np.linspace(1.1,1.8,nPlot)# x-data for plot
xx = np.ones((nPlot,nd))
                                   # data for plot
xx[:,0] = pltXaxis
                                   # data for plot
w = np.array([1.0,0.0]) # initial model parameters
plt.plot(pltXaxis, sigm(xx.dot(w)),color="r",linewidth=1)
```

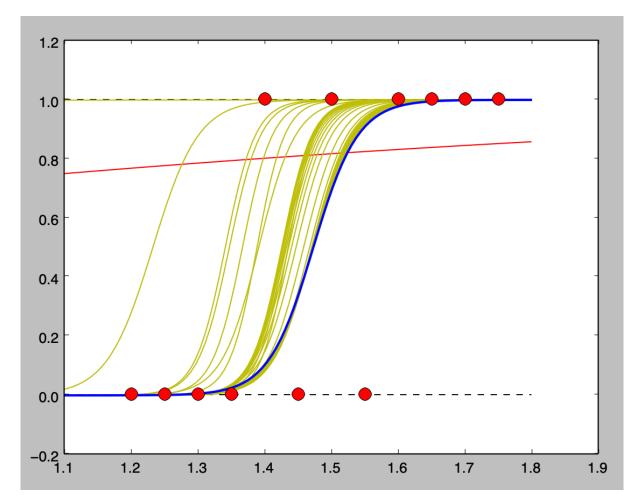


```
errPrv = 10.0
                                           \partial e_n^2
                                                  = (\tilde{y}_n - y_n)\tilde{y}_n(1 - \tilde{y}_n)x
for i in range(100000):
   for j in range(N):
      zj = sigm(D[j,:].dot(w))
      grad = (z_j-true[j])*z_j*(1-z_j)*D[j,:]
      w = w - alpha*grad
      alpha = alpha*alpDec
   estimate = sigm(D.dot(w))
   errNew = np.sqrt((true-estimate).dot((true-estimate)))
   if (abs(errNew-errPrv) < TH): break</pre>
   errPrv = errNew
   if (i\%100 == 0):
      plt.plot(pltXaxis, sigm(xx.dot(w)),color="y")
      print i,w,errNew
```



```
plt.plot(pltXaxis, sigm(xx.dot(w)),color="b",linewidth=2)
plt.ylim(-0.2, 1.2)
plt.hlines([0, 1], 1.1, 1.8, linestyles="dashed")
plt.plot(trainingData[:,0],true,"ro",markersize=10)
plt.show()
```

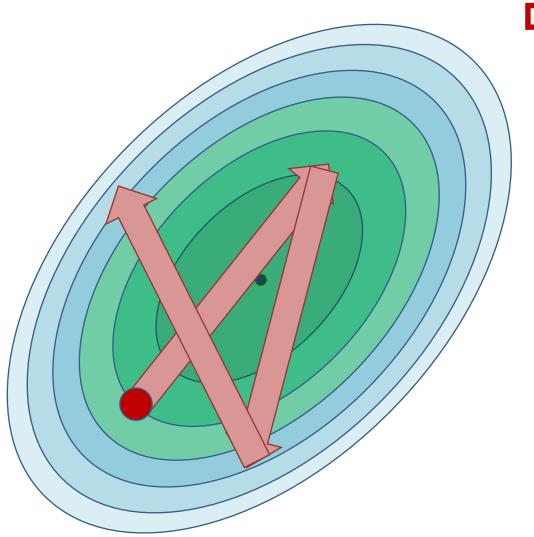




1.0 8.0 0.6 0.4 0.2 0.0 -0.2 L 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9

iteration:6901, error: 1.35668

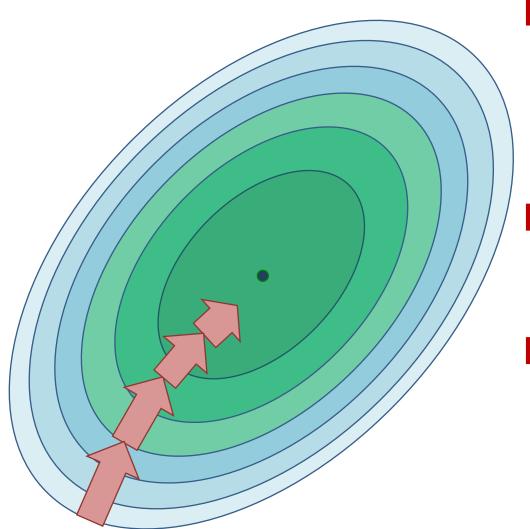
iteration:6162, error: 0.17588



- 学習率αが大きいと,解の近傍で振動する。
 - → 移動方向に 傾きの指数平滑移動平均 を用いる

$$g_{new} = \beta g_{prv} + (1 - \beta) \nabla E$$
$$\mathbf{w}_{new} = \mathbf{w}_{prv} - \alpha g_{new}$$





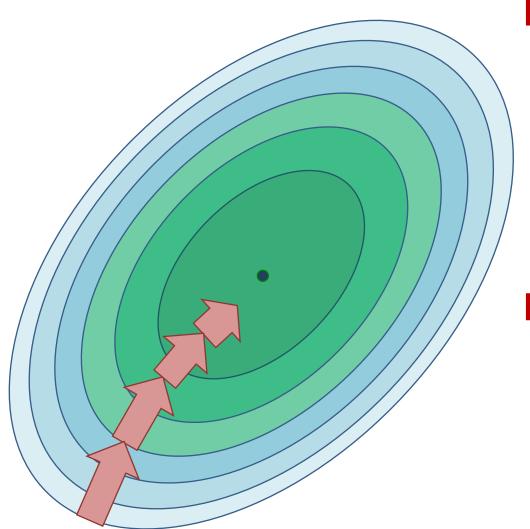
■更新式を

$$\mathbf{w}_{new} = \mathbf{w}_{prv} - \frac{\eta}{c} \frac{\nabla E}{\|\nabla E\|}$$

とおいて考える

- □ 傾きが小さくなってきたら、解は近い
 - ⇒ 更新量を小さくしたい
 - \Rightarrow c を大きくしたい
- □ 傾きが大きくなってきたら、解は遠い
 - ⇒ 更新量を大きくしたい
 - \Rightarrow c を小さくしたい





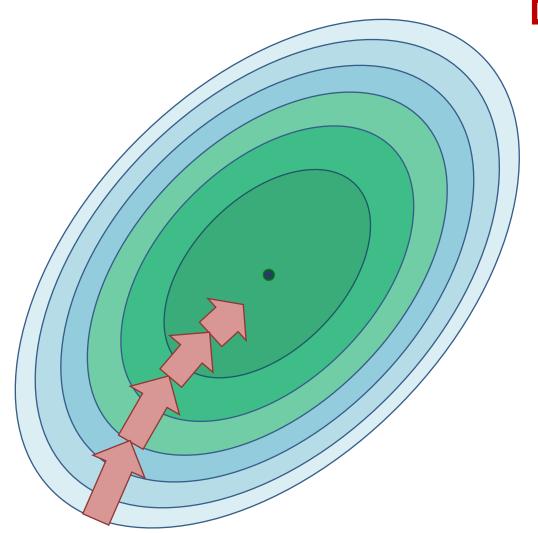
□ 更新式を

$$oldsymbol{w}_{new} = oldsymbol{w}_{prv} - rac{\eta \ VE}{\sqrt{S_{new}}}$$

 $m{w}_{new} = m{w}_{prv} - rac{\eta \; \nabla E}{\sqrt{s_{new}}}$ とおく。 ただし, s_{new} は傾きのノル ムの二乗の指数平滑移動平均とする

$$s_{new} = \gamma s_{prv} + (1 - \gamma) \|\nabla E\|^2$$

- □ 傾きが小さく(大きく)なってきたとき, 傾きはその移動平均より小さい(大きい)
 - $\Rightarrow \sqrt{s_{new}}$ で割ることは, 前頁の更新式の cを, 大きく(小さく)することと等価



□ 解決法1,2の組み合わせ

$$g_{new} = \beta g_{prv} + (1 - \beta) \nabla E$$

$$s_{new} = \gamma s_{prv} + (1 - \gamma) ||\nabla E||^2$$

$$\mathbf{w}_{new} = \mathbf{w}_{prv} - \eta \frac{g_{new}}{\sqrt{s_{new}}}$$



プログラムの例 2

import numpy as np from scipy import linalg as la import matplotlib.pyplot as plt import copy as cp

```
def sigm(z):
    return 1/(1+np.exp(-z))
```

```
trainingData = np.array([[1.20,0],[1.25,0],[1.30,0],[1.35,0],[1.40,1],[1.45,0],[1.50,1],[1.55,0],[1.60,1],[1.65,1],[1.70,1],[1.75,1]])
```

N,nd = trainingData.shape # N : number of samples

nd: dimension



```
true = trainingData[:,1]
                             # true value
D = cp.copy(trainingData)
D[:,nd-1] = np.ones(N)
                             # Data Matrix
TH = 1.0e-7 # threshold for iteration
eta = 1.0
                 # constant balancing update parameter
beta = 0.7
                 # weight for averaging v
gamma = 0.7 # weight for averaginf s
epsilon = 1.0e-4 # constant preventing zero divide
nPlot = 100
                                   # plot resolution
pltXaxis = np.linspace(1.1,1.8,nPlot)# x-data for plot
xx = np.ones((nPlot,nd))
                                  # data for plot
xx[:,0] = pltXaxis
                                   # data for plot
```

w = np.array([1.0,0.0]) # initial model parameters
plt.plot(pltXaxis, sigm(xx.dot(w)),color="r",linewidth=1)

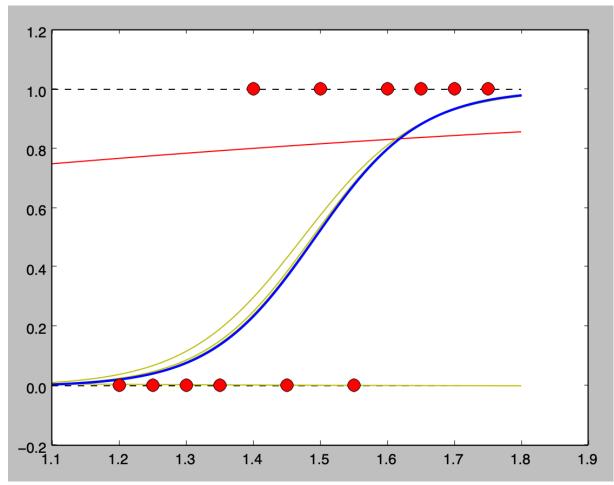


```
errPrv = 10.0
vPrv = np.array([0.0,0.0])
sPrv = 0
for i in range(100000):
  for j in range(N):
     zj = sigm(D[j,:].dot(w))
     qrad = (zj-true[j])*zj*(1-zj))*D[j,:]
     vNew = beta*vPrv + (1-beta)*grad
     sNew = gamma*sPrv + (1-gamma)*grad.dot(grad)
     w = w - eta*vNew/np.sqrt(sNew+epsilon)
     vPrv = vNew
     sPrv = sNew
  estimate = sigm(D.dot(w))
  errNew = np.sqrt((true-estimate).dot((true-estimate)))
  if (abs(errNew-errPrv) < TH): break</pre>
  errPrv = errNew
```

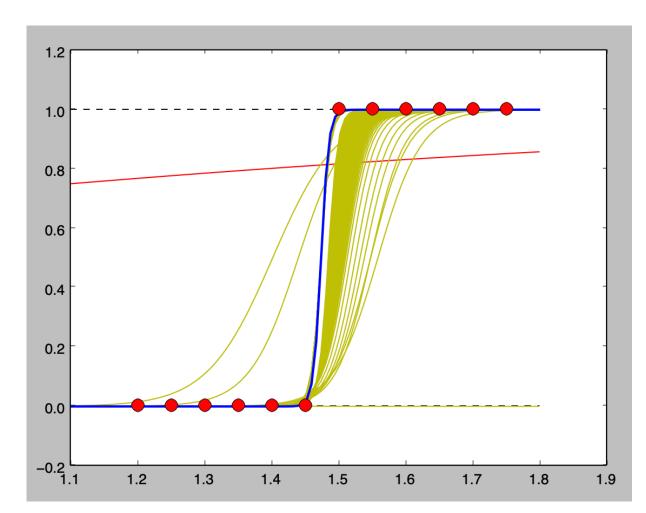


```
if (i\%100 == 0):
     plt.plot(pltXaxis, sigm(xx.dot(w)),color="y")
     print i,w,errNew
plt.plot(pltXaxis, sigm(xx.dot(w)),color="b",linewidth=2)
plt.ylim(-0.2, 1.2)
plt.hlines([0, 1], 1.1, 1.8, linestyles="dashed")
plt.plot(trainingData[:,0],true,"ro",markersize=10)
plt.show()
```





iteration:796, error: 1.22206

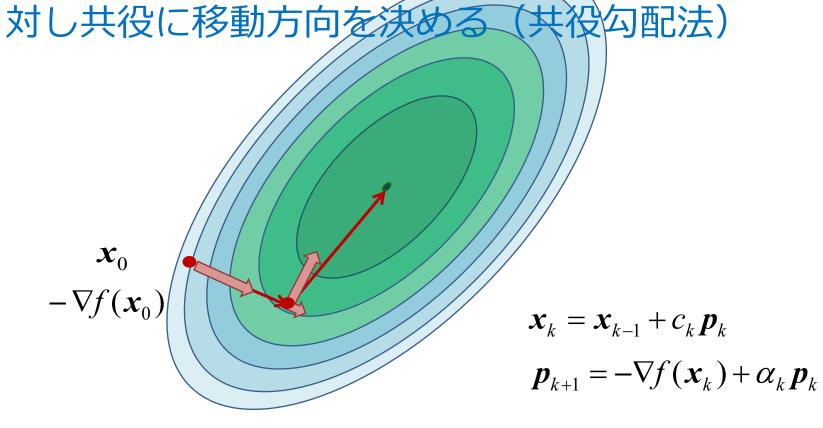


iteration:77548, error: 0.01725

8

共役勾配法

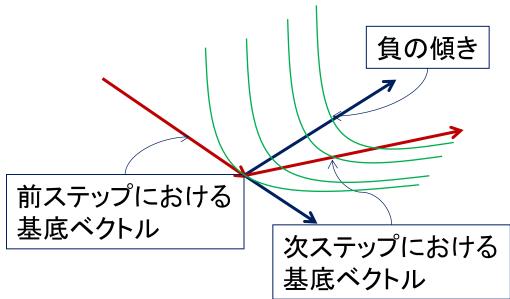
- □ 最急降下法では、直線的に最適解に向かわない
 - ⇒ 今まで進んできた方向に対し、共役な方向に





共役勾配法

- □ 共役勾配法とは?
 - 勾配法の一種
 - ・勾配だけでなく,今まで進んできた方向も考慮して探索方向を決める。⇒ 効率化
 - 「今までの進んできた方向の考慮」にあたり、ベクトルの「共役」という性質を利用する。
- ロ「共役」 とは? ベクトル x, y が $x^T Ay = \langle x, y \rangle_A = 0$ を満たすこと。





固有ベクトルによる対称行列の対角化

n 次対称行列 A は,

固有ベクトル v_1, v_2, \dots, v_n を並べて作る行列

$$V = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n \end{pmatrix}$$

を用いて $V^TAV = \Lambda$,

$$V^T A V = \Lambda$$
,

別で
$$V^TAV = \Lambda$$
,
$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \lambda_2 & \ddots \\ \mathbf{0} & \lambda_n \\ \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n \end{pmatrix}$$
は固有値は角化できる。

と対角化できる。



行列の分解

$$V^T A V = \Lambda$$

ここで,
$$V^TV = VV^T = I$$
 であるから,

$$VV^T A VV^T = V\Lambda V^T, \quad A = V\Lambda V^T$$

対称行列は, 固有値を対角要素に持つ行列 Λ と 固有ベクトル をならべて作る行列 V で表すことができる。



ベクトルの共役性

ベクトルの共役性:

定義:
$$\mathbf{x}_1^T A \mathbf{x}_2 = 0$$
 のとき, $\mathbf{x}_1 \ge \mathbf{x}_2$ は共役

角军釈:
$$\mathbf{x}_1^T A \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1^T V \Lambda V^T \mathbf{x}_2$$

$$= \boldsymbol{x}_{1}^{T} \left(\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{V}^{T}\right)^{T} \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{V}^{T} \boldsymbol{x}_{2} = \left(\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{V}^{T} \boldsymbol{x}_{1}\right)^{T} \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{V}^{T} \boldsymbol{x}_{2}$$

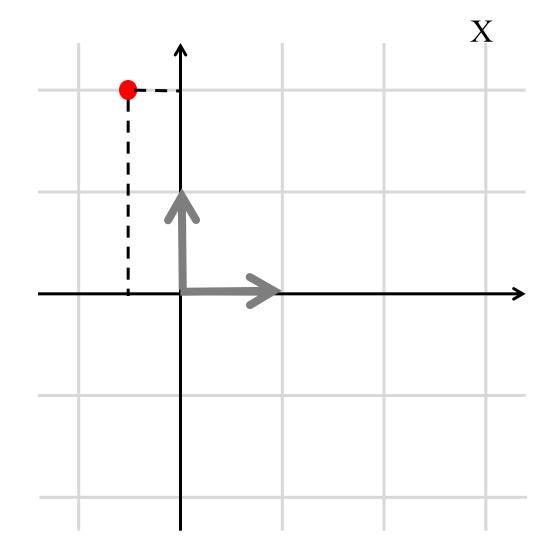
$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{V}^{T} \boldsymbol{x}$$

なる座標変換をした後のベクトルの内積

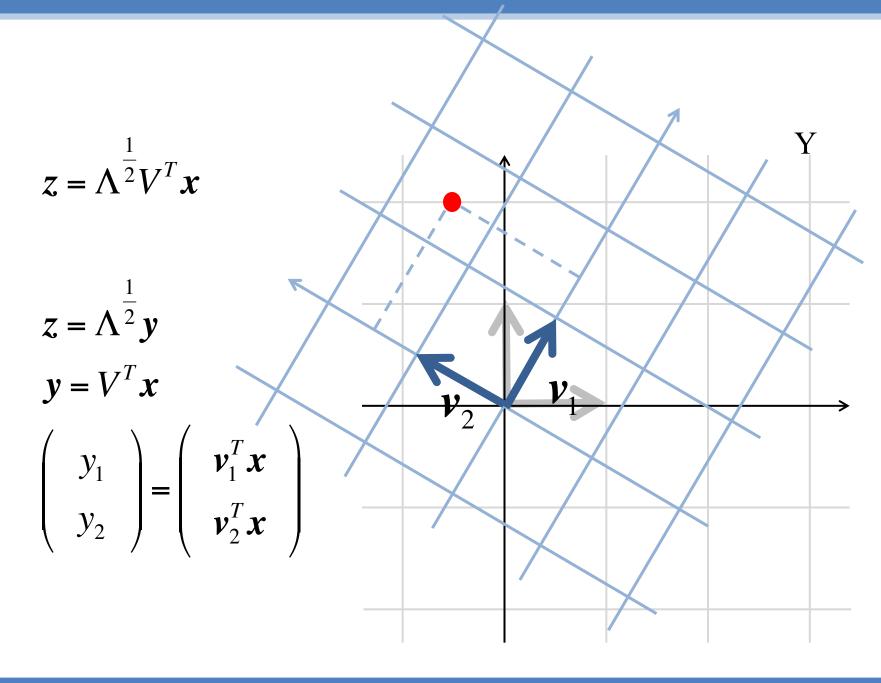


$$z = \Lambda^{\frac{1}{2}} V^T x$$

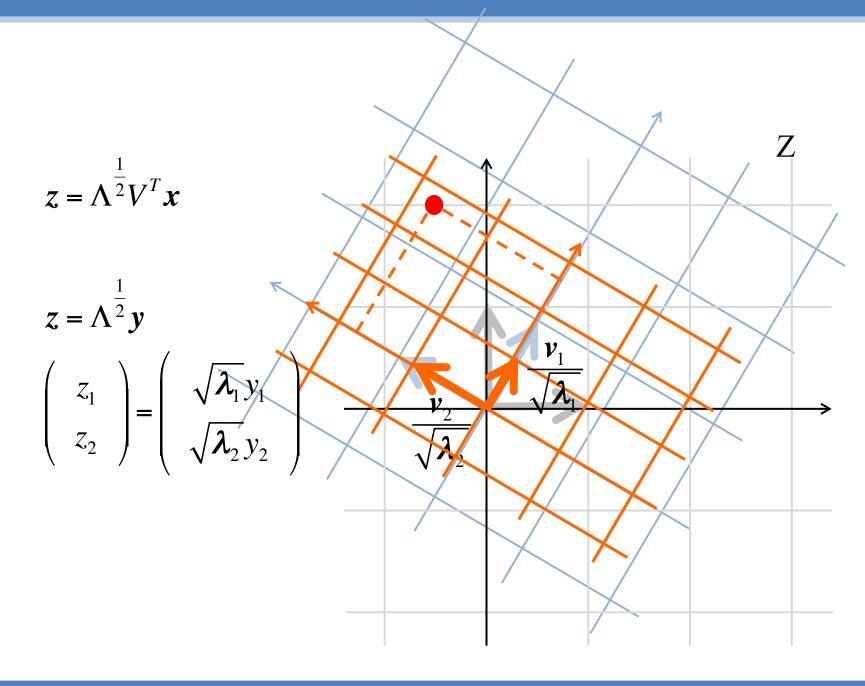
$$z = \Lambda^{\frac{1}{2}} y$$
$$y = V^T x$$





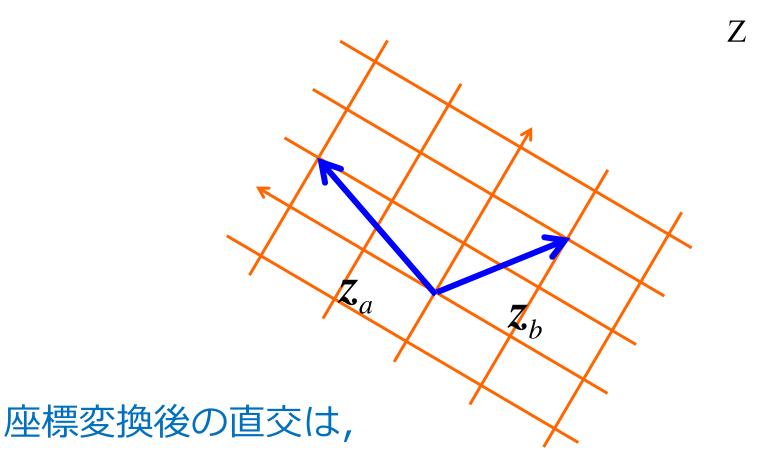








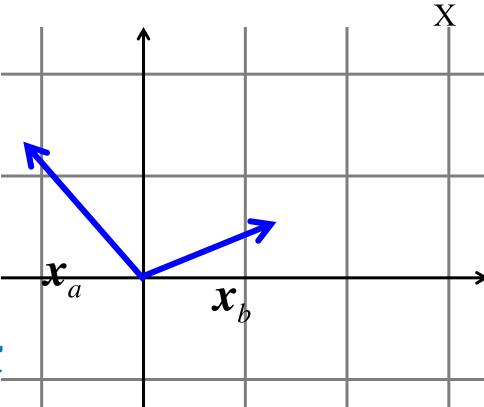
直交



$$\mathbf{z}_a^T \cdot \mathbf{z}_b = 0$$



共役

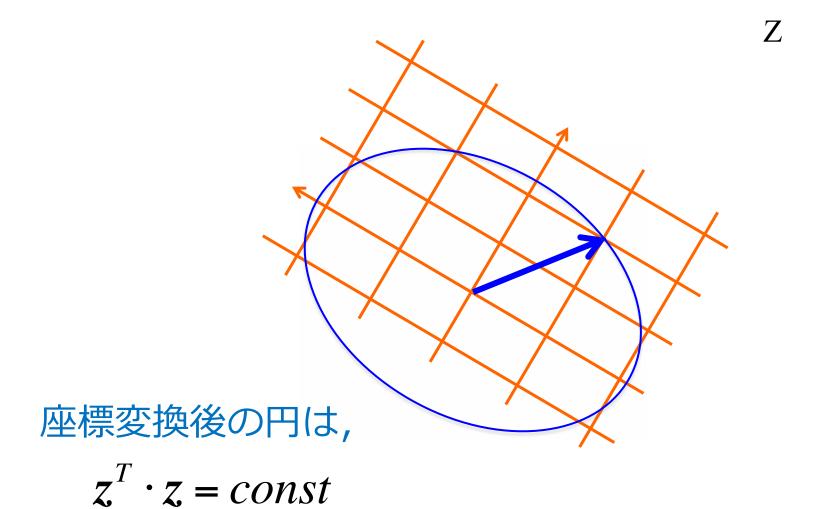


元の座標では共役

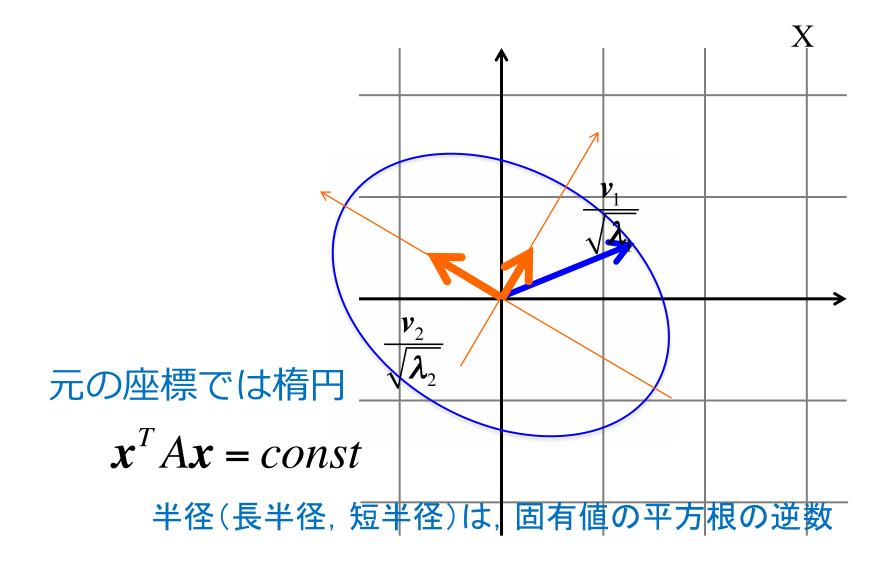
$$\boldsymbol{x}_a^T A \boldsymbol{x}_b = 0$$







楕円

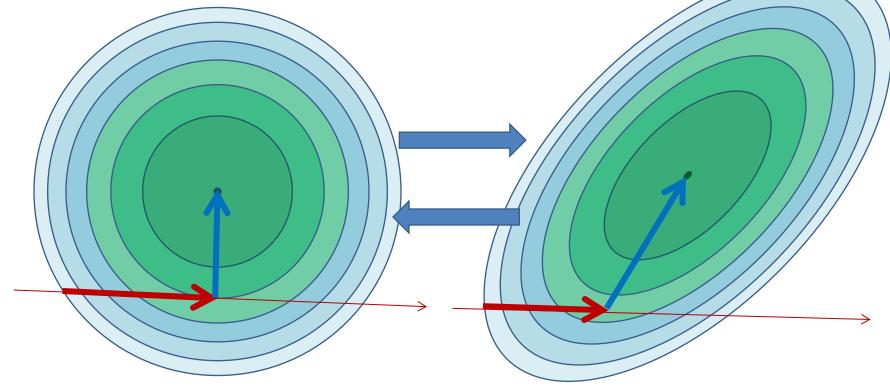




共役とは

共役の方向に近似解を更新することは、
楕円を円に変換したとき、

直交する方向に近似解を更新することに相当する。





共役なベクトルによる Ax = b の解の表現

互いに共役なベクトル p_1, p_2, \cdots, p_N を用いて,

$$Ax = b$$
 (1) (Aは, N次正定値対象行列)

の解 x^* を表現することを考える。

$$x^* = \sum_{i}^{N} c_i p_i$$
 p_1, p_2, \cdots, p_N (2) とおくと、 p_i は、 p_j ($i \neq j$) と共役であるから、 $p_i^T A x^* = p_i^T \sum_{k}^{N} c_k A p_k = c_i p_i^T A p_i = p_i^T b$ 共役なベクトル $\{p_i\}$ を用意すれば、

$$\boldsymbol{p}_i^T A \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T \sum_{k=1}^N c_k A \boldsymbol{p}_k = c_i \boldsymbol{p}_i^T A \boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}$$

$$c_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T A \boldsymbol{p}_i} \tag{3}$$

と c_i を定めることができる。

*Ax=b*の解は、それらを基底として 表現できる。

基底
$$p_i$$
の係数は, $c_i = \frac{p_i^T b}{p_i^T A p_i}$ となる。



2次形式
$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$$

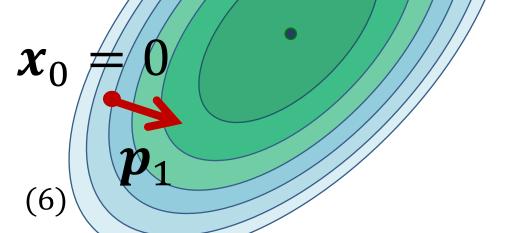
に対し、
$$\nabla f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b} = 0$$

(5)

即ち, Ax = b の解を求める。

 $x_0 = 0$ として初期値を定め,

$$x_k = \sum_{i=1}^k p_k = x_{k-1} + c_k p_k$$
 (6)



としながら,p, c, x を漸化的に求める。

最初の基底 p_1 に適当な値をあたえる。



共役勾配法

第k次の基底 p_k が定まったとする。

これを用いて, c_k, x_k を

$$c_k = \frac{\boldsymbol{p}_k^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_k^T A \boldsymbol{p}_k} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{x}_{k} = \boldsymbol{x}_{k-1} + c_{k} \boldsymbol{p}_{k} \qquad (6)$$

と求め,

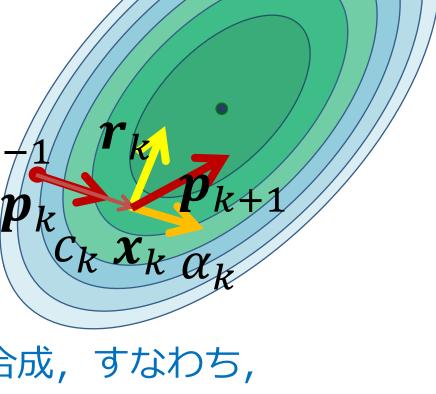
さらに, x_k での負の勾配 r_k を求める

$$\mathbf{r}_{k} = -\nabla f(\mathbf{x}_{k}) = -A\mathbf{x}_{k} + \mathbf{b} \quad (7)$$

第k+1次の基底 p_{k+1} を, r_k と p_k の合成, すなわち,

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k + \alpha_k \, \boldsymbol{p}_k \tag{8}$$

とおいて、これが p_k と共役になるように定める。





共役勾配法

$$\alpha_{k}(\mathbf{z}, \mathbf{p}_{k}^{T} A \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{p}_{k}^{T} A (\mathbf{r}_{k} + \alpha_{k} \mathbf{p}_{k}) = \mathbf{p}_{k}^{T} A \mathbf{r}_{k} + \alpha_{k} \mathbf{p}_{k}^{T} \mathbf{p}_{k} = 0$$

$$\alpha_{k} = -\frac{\mathbf{p}_{k}^{T} A \mathbf{r}_{k}}{\mathbf{p}_{k}^{T} A \mathbf{p}_{k}} \tag{9}$$

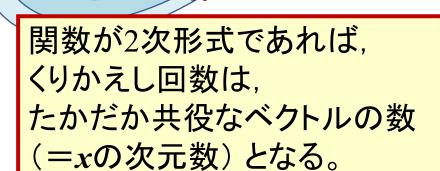
第k+1次の基底は,

$$+1$$
次の暴底は、
 $p_{k+1} = r_k + \alpha_k p_k = r_k - \frac{p_k^T A r_k}{p_k^T A p_k} p_k$ (10)

となる。

さらに、これを用いて、
$$x_{k+1}$$
 を、
$$c_{k+1} = \frac{p_{k+1}^T b}{p_{k+1}^T A p_{k+1}} \qquad x_{k+1} = x_k + c_{k+1} p_{k+1}$$
(11)

と求める。



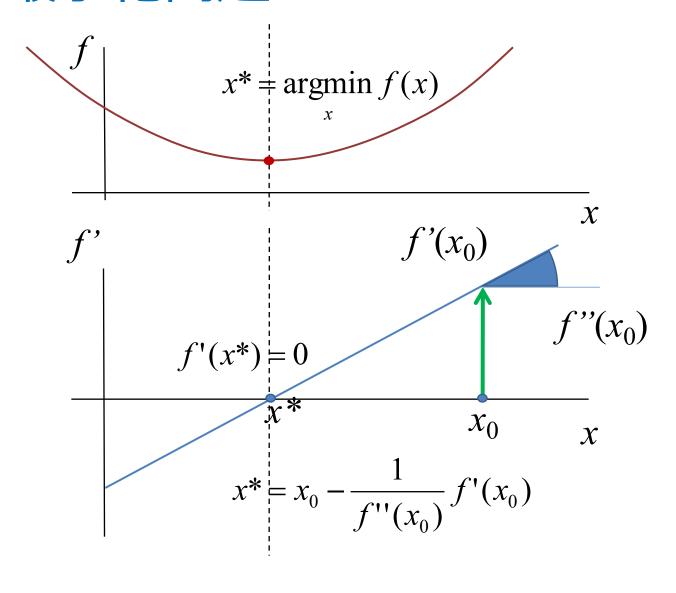


ニュートン法

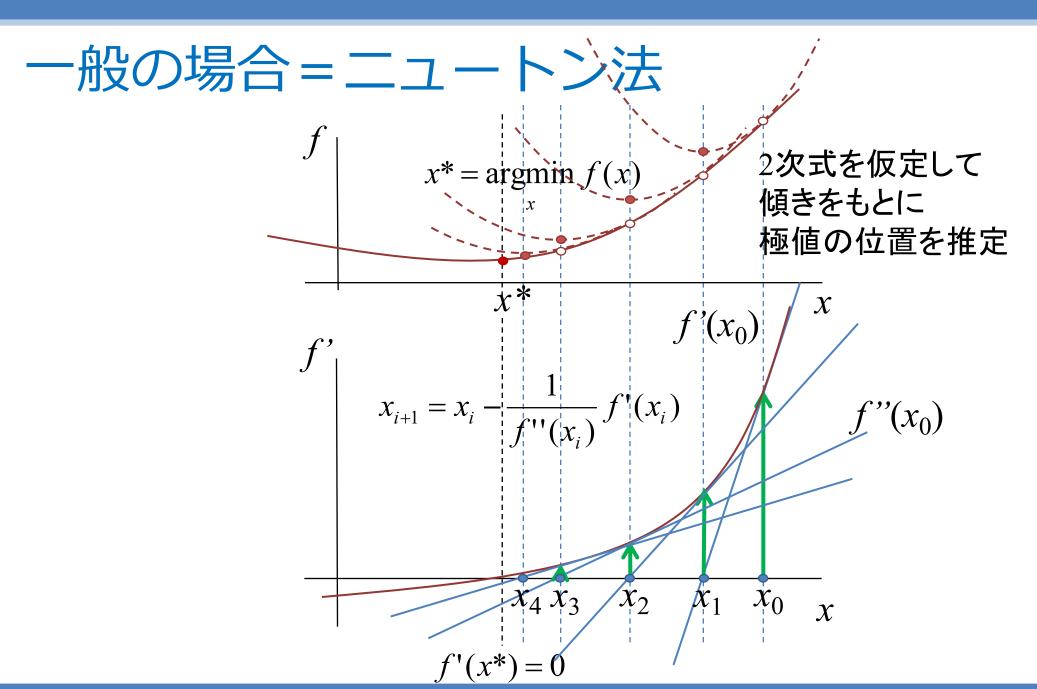
□ 勾配だけでなく, ヘシアン (スカラにおける2次微係数に相当する 量) も使って, 近似解の変更の方向と量を決定する。



2次式の最小化問題









多変数のニュートン法

$$H(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_2} \end{pmatrix}$$
:ヘッセ行列

: ヘッセ行列 (ヘシアン, ヘシアン行列)

$$\frac{\partial}{\partial x} f(\mathbf{x}_0 + \Delta \mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}_0) + H(\mathbf{x}_0) \Delta \mathbf{x} = 0$$

$$\Delta \mathbf{x} = -H(\mathbf{x}_0)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_0)$$

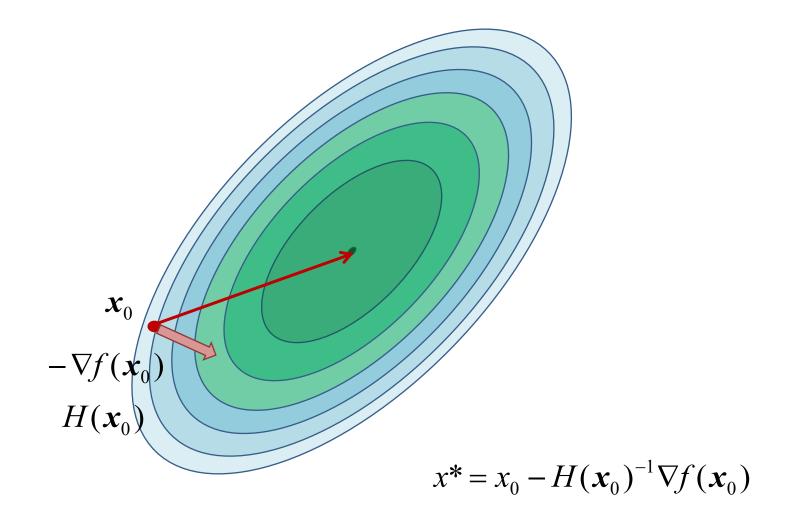
$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_0 - H(\mathbf{x}_0)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_0) \quad (2次系の場合は即最適解)$$

$$x_{i+1} = x_i - H(\mathbf{x}_i)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_i)$$

(一般の場合は漸化式とする)

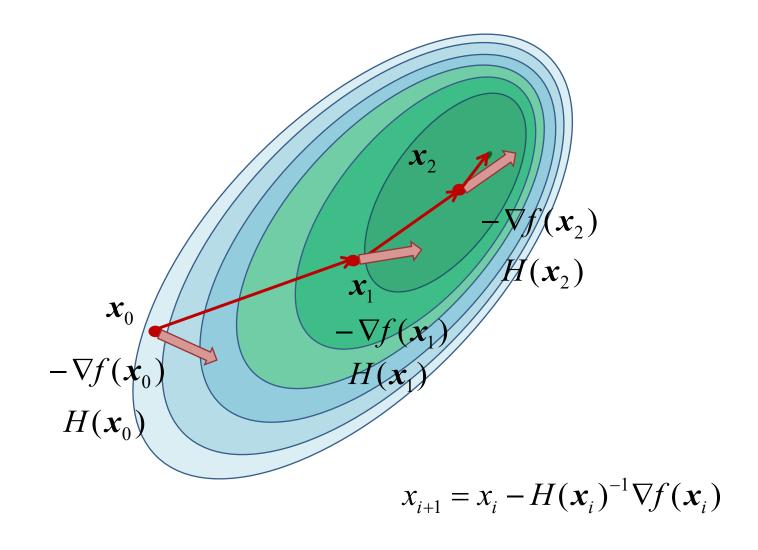


ニュートン法:2次系の場合





ニュートン法:一般の場合

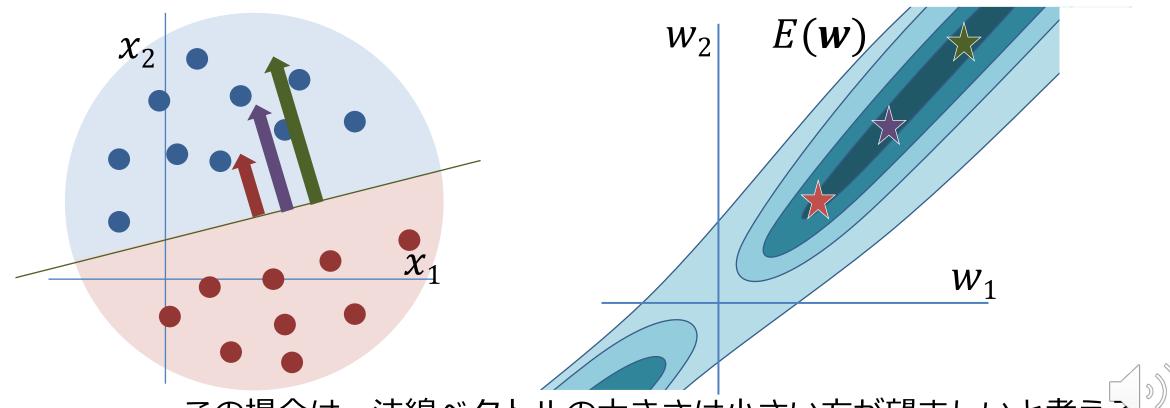




L2正則化

幾つかの問題で不定解になることがある。

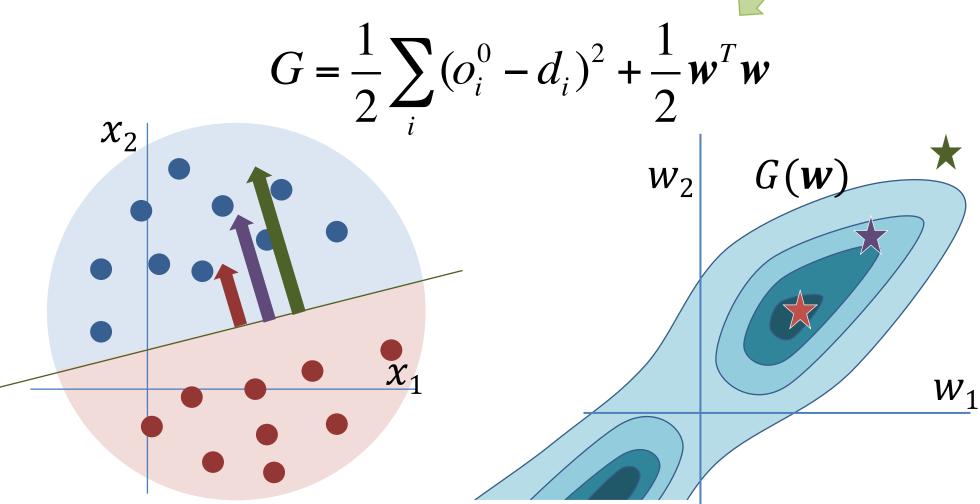
例) ある方向の法線ベクトルでデータが既に分離できているなら, その大きさは一定以上大きければ目的関数値に影響を与えない。



この場合は, 法線ベクトルの大きさは小さい方が望ましいと考える。

L2正則化

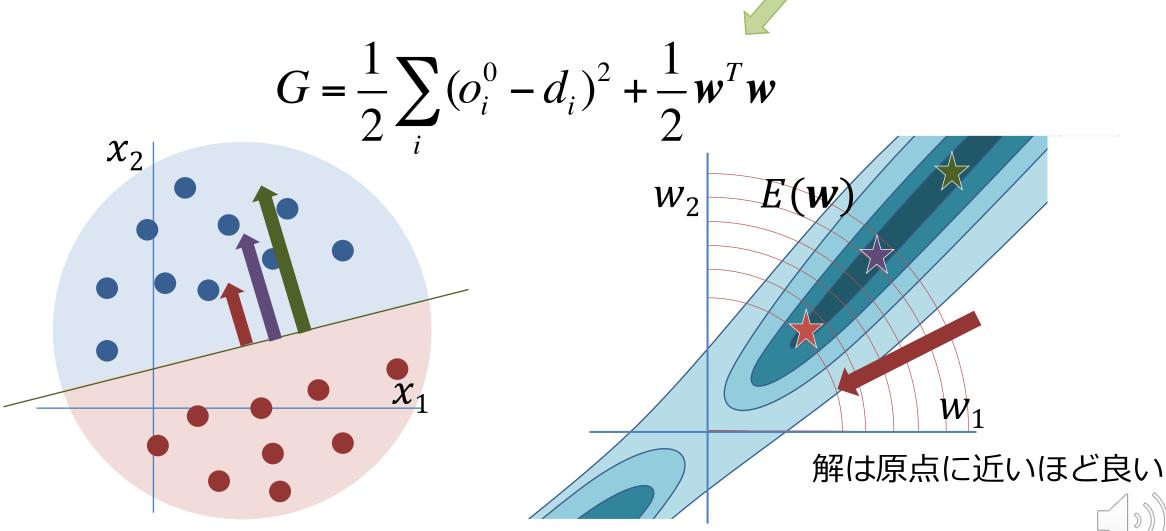




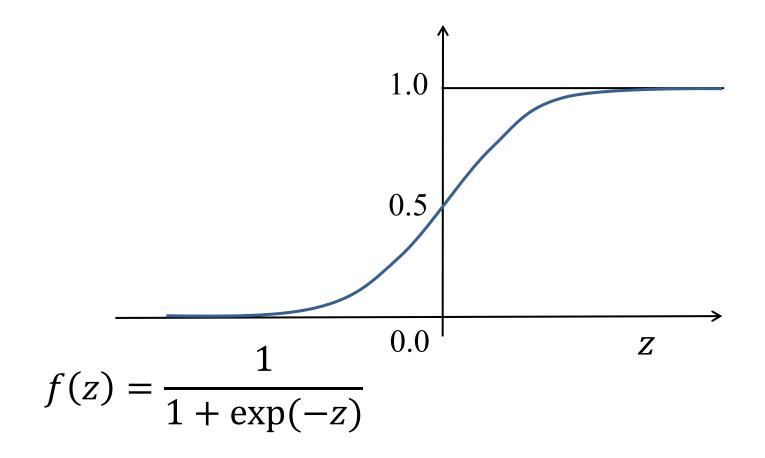


L2正則化



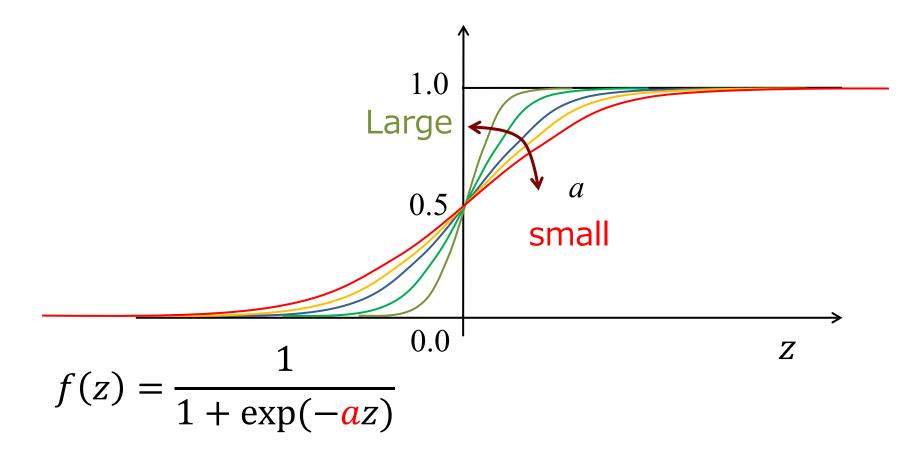


□シグモイド関数



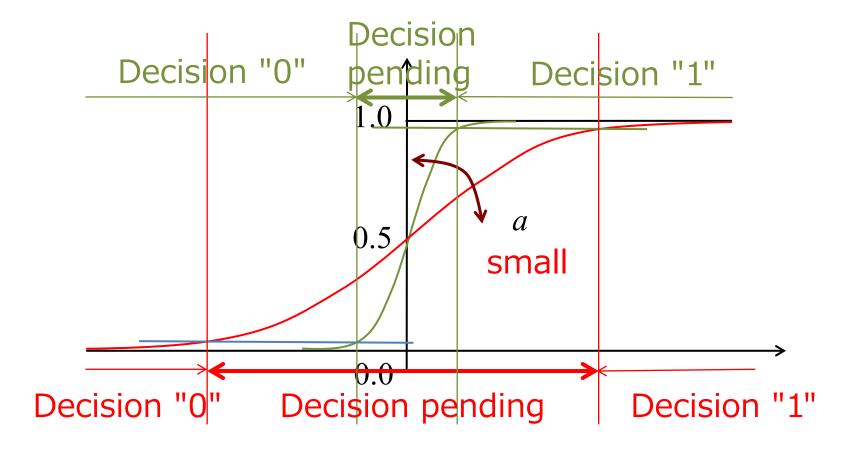


□ パラメタ a はシグモイド関数の立ち上がり部分の傾斜の深さ に関係する



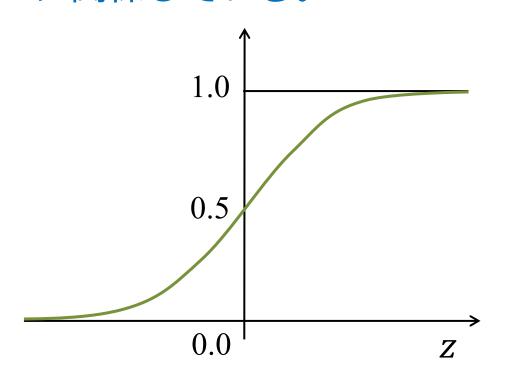


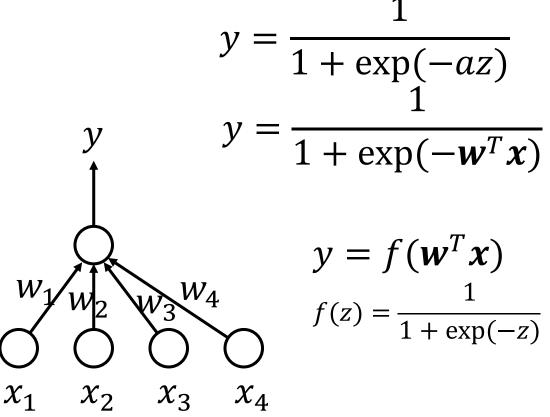
□ "a" が小さければゆるい傾斜 = 広い範囲で決定が保留される⇒ 慎重な識別器





□ 線形識別器の重みの大きさは、シグモイドの傾斜パラメタ a に関係している。

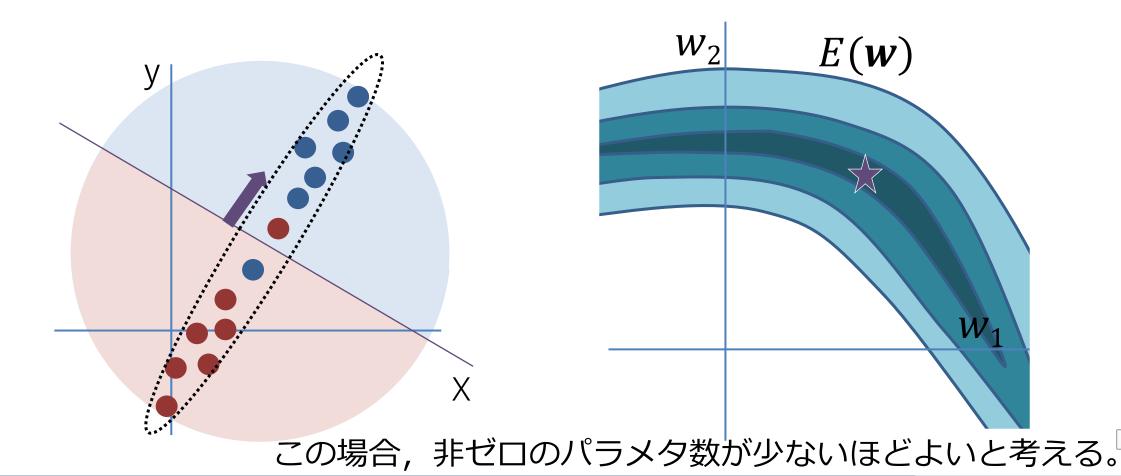






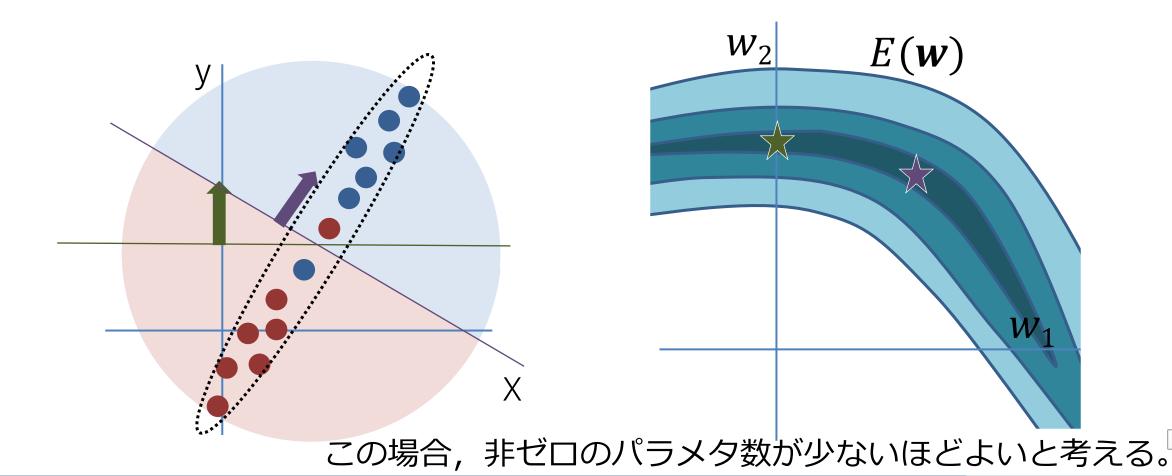
幾つかの問題で不定解になることがある。

例) 互いに従属なパラメタがあるとき, 不定解を生じる。



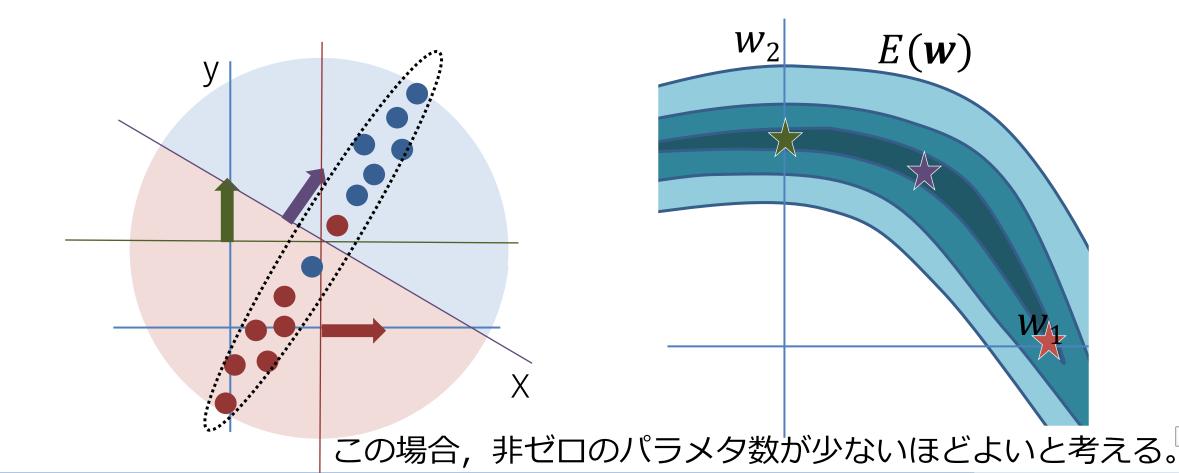
幾つかの問題で不定解になることがある。

例) 互いに従属なパラメタがあるとき, 不定解を生じる。

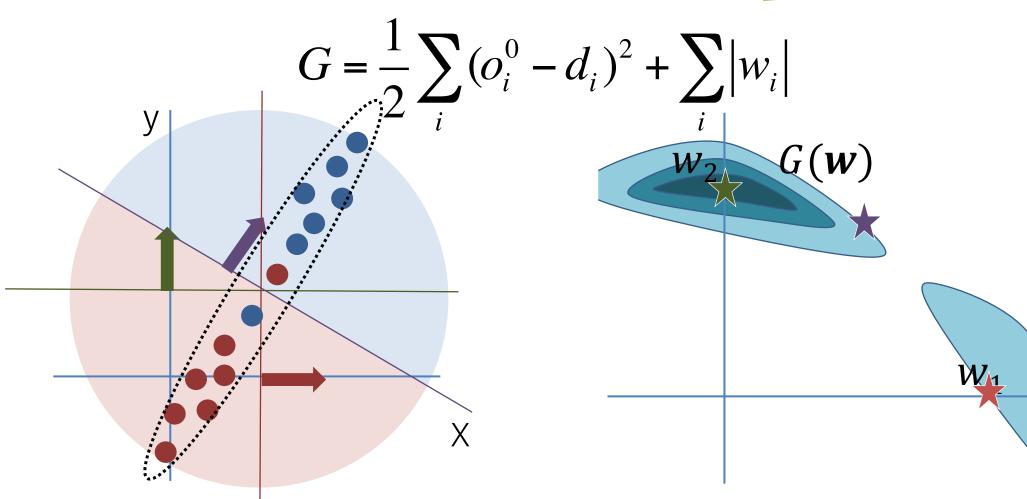


幾つかの問題で不定解になることがある。

例) 互いに従属なパラメタがあるとき, 不定解を生じる。

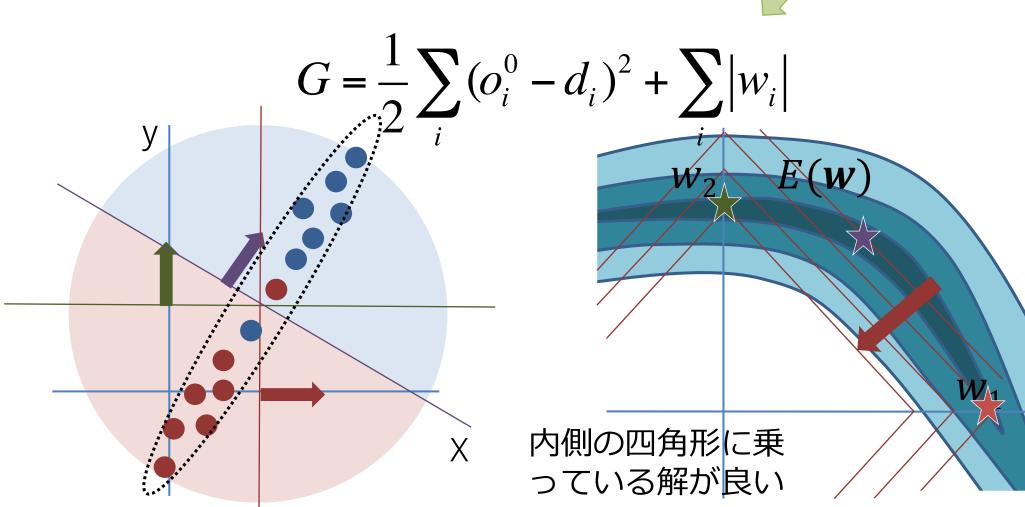








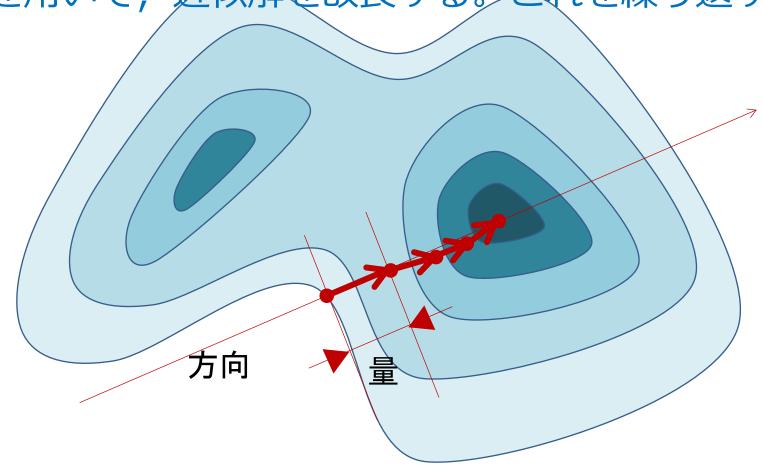






勾配法のまとめ

勾配法:まずある近似値を定め,この近似解の近傍の関数の勾配 (等)を用いて,近似解を改良する。これを繰り返す。



種々の勾配法の関係

修正ベクトルの

方向量

□ 最急降下法 (最適勾配法) 傾き 予め定めた量など

傾き 最適量 (ラインサーチなど)

□ 共役勾配法

共役性 最適量 (共役性)

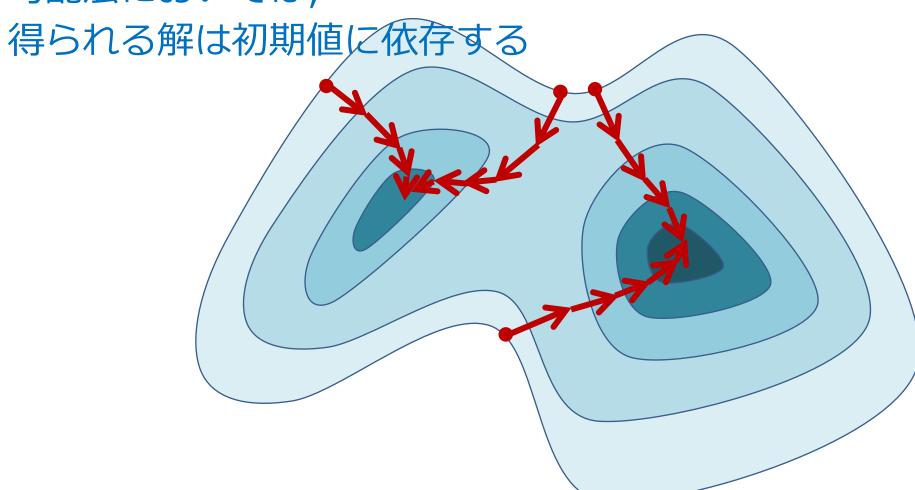
□ニュートン法

傾き+ヘシアン 最適量(2次系の仮定)



勾配法と初期値問題

勾配法においては,





演習問題

1. 関数

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \begin{pmatrix} 6 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \mathbf{x} - \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}^T \mathbf{x}$$

の 最小値を, 共役勾配法,ニュートン法のそれぞれで求めよ。



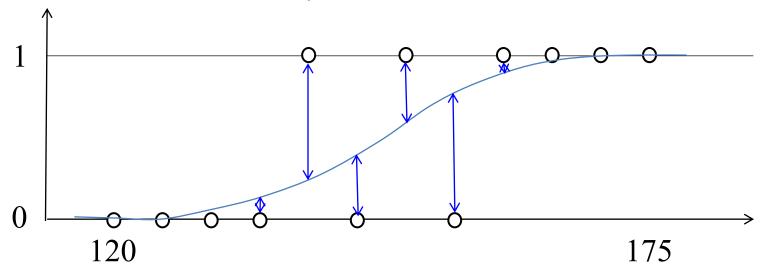
演習問題

下記の学習データに対し、ロジスティック関数(シグモイド関数)を当てはめることを考える。

```
(1.20, 0) (1.25, 0) (1.30, 0) (1.35, 0) (1.40, 1) (1.45, 0)
```

(1.50, 1) (1.55, 0) (1.60, 1) (1.65, 1) (1.70, 1) (1.75, 1)

- (1)二乗誤差最小化するパラメタを, 勾配法を用いて求めよ。
- (2)二乗誤差最小化するパラメタを, ニュートン法を用いて求めよ。





演習問題

3. 勾配法における,近似解の更新方法(更新ベクトルの定め方,学習率の定め方)には様々な方法がある。

授業で触れなかったものについて, どのような方法があるか各自調査せよ。

また、そのいくつかを実装し、先のロジスティック回帰の問題(演習問題2)に適用して、収束の様子を比べよ。

