

先端データ解析論レポート 第2回

荻野 聖也 (37-196323)

2019 年 4 月 21 日

課題 1

推定する真の関数 講義内でやったものと同様に

$$f(x) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi x} + 0.1x$$

とする。

訓練サンプル 訓練サンプル $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ も、講義と同様に

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$$

ただし、ノイズ ε_i は正規分布

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

に従うものとする。サンプル数 n は、 $n = 50$ とする。

ガウスカーネルモデル

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

に対して、 l_2 正則化の最小二乗回帰により学習させる。推定されるパラメータ $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (f_{\boldsymbol{\theta}}(x_i) - y_i)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}\|^2 \right\}$$

により求まる。ただし、 λ は正則化パラメータである。ここで、

$$J \equiv \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (f_{\boldsymbol{\theta}}(x_i) - y_i)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}\|^2$$

とするとき、

$$J = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n \theta_j \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - y_i \right)^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|^2 \right)$$
$$= \frac{1}{2} (\|\mathbf{K}\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|^2)$$

なので、

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J = \mathbf{K}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\theta} - \mathbf{K}^T \mathbf{y} + \lambda \boldsymbol{\theta}$$

なので、 $\boldsymbol{\theta}$ に関する停留点は、

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} J = \mathbf{0}$$

であたえられ、これを解くと、 \mathbf{K} が対称行列であることも考慮し、

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{K}^2 + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{K} \mathbf{y}$$

により、与えられる。

評価およびハイパーパラメータについて

交差確認法を用いる。ただし分割数 k は,

$$k = 10$$

とする。また、テスト誤差の平均値 e を

$$e = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \sum_{x', y' \in \text{group}(k_i)} \left(\hat{f}(x') - y' \right)^2$$

とし、誤差の小ささを評価する。また、ハイパーパラメータであるガウス幅 h と正則化パラメータ λ は

$$\begin{aligned} h &\in \{0.1, 0.3, 1\} \\ \lambda &\in \{0.05, 0.1, 0.5\} \end{aligned}$$

とし、総当たりに最適なパラメータを探索する。

結果

コードについては、付属の python ファイルが補填を参考にしてください。

各パラメータによる交差確認による誤差の結果を下に示す。

交差確認法による誤差

```
ガウス幅:0.10 正則化パラム:0.05 err:0.2802
ガウス幅:0.10 正則化パラム:0.10 err:0.2016
ガウス幅:0.10 正則化パラム:0.50 err:0.2245
ガウス幅:0.30 正則化パラム:0.05 err:0.0222
ガウス幅:0.30 正則化パラム:0.10 err:0.0239
ガウス幅:0.30 正則化パラム:0.50 err:0.0262
ガウス幅:1.00 正則化パラム:0.05 err:0.0440
ガウス幅:1.00 正則化パラム:0.10 err:0.0665
ガウス幅:1.00 正則化パラム:0.50 err:0.1221
```

これより、求めるべき正則化パラメータ λ およびガウス幅 h は,

$$(\lambda, h) = (0.05, 0.30)$$

に決定された。なおこの時の予測関数 $\hat{f}_{\theta}(x)$ のグラフを以下に示す。

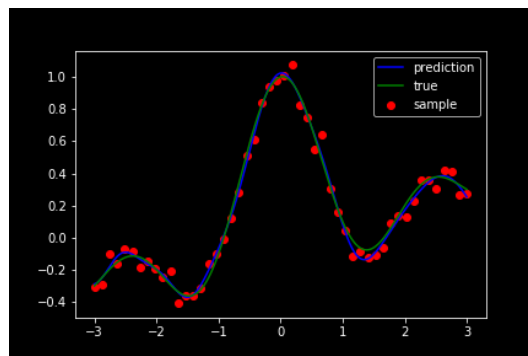


図1 12 正則化付き最小二乗回帰

課題 2

線形モデル

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

について、 l_2 正則化回帰によるパラメータ推定を行う。この時、学習により得られるパラメータ $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ について、LOOCV のために (\mathbf{x}_i, y_i) を除いて学習した時のパラメータを $\hat{\boldsymbol{\theta}}_i$ としたときに、これは

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_i = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}_i} \left[\frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (f_{\boldsymbol{\theta}_i}(\mathbf{x}_j) - y_j)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}_i\|^2 \right]$$

とあらわされる。以下、計画行列 Φ に対して、 (\mathbf{x}_i, y_i) を除く学習によるものを Φ_i とし、サンプル $\{z_i\}_{i=1}^n = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ に対し、 i 番目を除いた x および y のベクトル表記を $\mathbf{x}^{\{i\}} \in R^{n-1}$, $\mathbf{y}^{\{i\}} \in R^{n-1}$ とする。(表記ややこしくてすいません。) 講義内と同様に最小二乗回帰を解く。

$$J \equiv \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (f_{\boldsymbol{\theta}_i}(\mathbf{x}_j) - y_j)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}_i\|^2$$

とするとき、これを変形して、

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2} \|\Phi_i \boldsymbol{\theta}_i - \mathbf{y}^{\{i\}}\|^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}_i\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(\Phi_i \boldsymbol{\theta}_i - \mathbf{y}^{\{i\}} \right)^T \left(\Phi_i \boldsymbol{\theta}_i - \mathbf{y}^{\{i\}} \right) + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}_i\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\theta}_i^T \Phi_i^T \Phi_i \boldsymbol{\theta}_i - \boldsymbol{\theta}_i^T \Phi_i^T \mathbf{y}^{\{i\}} - \mathbf{y}^{\{i\}T} \Phi_i \boldsymbol{\theta}_i + \|\mathbf{y}^{\{i\}}\|^2 \right) + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}_i\|^2 \end{aligned}$$

J の $\boldsymbol{\theta}_i$ に関する停留点を求めると、

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} J = \Phi_i^T \Phi_i \boldsymbol{\theta}_i - \Phi_i^T \mathbf{y}^{\{i\}} + \lambda \boldsymbol{\theta}_i$$

なので、

$$\boldsymbol{\theta}_i = (\Phi_i^T \Phi_i + \lambda I)^{-1} \Phi_i^T \mathbf{y}^{\{i\}}$$

で与えられる。ここで、 $\Phi_i^T \Phi_i$ について、 Φ_i は $\{\phi_j\}_{j \neq i}$ で表されるので、

$$\begin{aligned} \Phi_i^T \Phi_i &= \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n \phi_1^2(\mathbf{x}_j) - \phi_1^2(\mathbf{x}_i) & \sum_{j=1}^n \phi_1(\mathbf{x}_j)\phi_2(\mathbf{x}_j) - \phi_1(\mathbf{x}_i)\phi_2(\mathbf{x}_i) & \dots & \sum_{j=1}^n \phi_1(\mathbf{x}_j)\phi_b(\mathbf{x}_j) - \phi_1(\mathbf{x}_i)\phi_b(\mathbf{x}_i) \\ \sum_{j=1}^n \phi_2(\mathbf{x}_j)\phi_1(\mathbf{x}_j) - \phi_2(\mathbf{x}_i)\phi_1(\mathbf{x}_i) & \sum_{j=1}^n \phi_2^2(\mathbf{x}_j) - \phi_2^2(\mathbf{x}_i) & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j=1}^n \phi_b(\mathbf{x}_j)\phi_1(\mathbf{x}_j) - \phi_b(\mathbf{x}_i)\phi_1(\mathbf{x}_i) & \dots & \dots & \sum_{j=1}^n \phi_b^2(\mathbf{x}_j) - \phi_b^2(\mathbf{x}_i) \end{pmatrix} \\ &= \Phi^T \Phi - \begin{pmatrix} \phi_1^2 & \phi_1\phi_2 & \dots & \phi_1\phi_b \\ \vdots & \phi_2^2 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \phi_b\phi_1 & \dots & \dots & \phi_b^2 \end{pmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_i} \\ &= \Phi^T \Phi - \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 & \phi_2 & \dots & \phi_b \end{bmatrix} \\ &= \Phi^T \Phi - \phi_i \phi_i^T \end{aligned}$$

また, $\Phi_i^T \mathbf{y}^{\{i\}}$ について, 同様にして

$$\begin{aligned}\Phi_i^T \mathbf{y}^{\{i\}} &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n y_j \phi_j \\ &= \sum_{j=1}^n y_j \phi_j - y_i \phi_i \\ &= \Phi^T \mathbf{y} - y_i \phi_i\end{aligned}$$

さらに, $(\Phi_i^T \Phi_i + \lambda I)^{-1}$ について,

$$\begin{aligned}(\Phi_i^T \Phi_i + \lambda I)^{-1} &= (\Phi^T \Phi - \phi_i \phi_i^T + \lambda I)^{-1} \\ &= \{(\Phi^T \Phi + \lambda I) - \phi_i \phi_i^T\}^{-1}\end{aligned}$$

$U = \Phi^T \Phi + \lambda I$ とすると, 講義資料の Sherman-Morrison-Woodbury の公式を用いて,

$$\begin{aligned}(\Phi_i^T \Phi_i + \lambda I)^{-1} &= (U - \phi_i \phi_i^T)^{-1} \\ &= U^{-1} + \frac{U^{-1} \phi_i \phi_i^T U^{-1}}{1 - \phi_i^T U^{-1} \phi_i}\end{aligned}$$

とあらわされるので, 以上のことを用いて, θ_i の学習されたパラメータ $\hat{\theta}_i$ は,

$$\theta_i = \left(U^{-1} + \frac{U^{-1} \phi_i \phi_i^T U^{-1}}{1 - \phi_i^T U^{-1} \phi_i} \right) (\Phi^T \mathbf{y} - y_i \phi_i)$$

以下, $\phi_i^T U^{-1} \phi_i = a_i$ ($\in R$) として.

$$\begin{aligned}\hat{\theta}_i &= \left(I + \frac{U^{-1} \phi_i \phi_i^T}{1 - \phi_i^T U^{-1} \phi_i} \right) U^{-1} (\Phi^T \mathbf{y} - y_i \phi_i) \\ &= \left(I + \frac{U^{-1} \phi_i \phi_i^T}{1 - a_i} \right) U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - \frac{(1 - a_i) I + U^{-1} \phi_i \phi_i^T}{1 - a_i} U^{-1} \phi_i y_i \\ &= \left(I + \frac{U^{-1} \phi_i \phi_i^T}{1 - a_i} \right) U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - \frac{y_i}{1 - a_i} ((1 - a_i) U^{-1} \phi_i + a_i U^{-1} \phi_i) \\ &= \left(I + \frac{U^{-1} \phi_i \phi_i^T}{1 - a_i} \right) U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - \frac{y_i}{1 - a_i} U^{-1} \phi_i\end{aligned}$$

よって, (x_i, y_i) を抜いて学習したパラメータからの y_i の推定値 $\phi_i^T \hat{\theta}_i$ は,

$$\begin{aligned}\phi_i^T \hat{\theta}_i &= \left(\phi_i^T + \frac{\phi_i^T U^{-1} \phi_i \phi_i^T}{1 - a_i} \right) U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - \frac{y_i}{1 - a_i} \phi_i^T U^{-1} \phi_i \\ &= \left(1 + \frac{a_i}{1 - a_i} \right) \phi_i^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - \frac{a_i}{1 - a_i} y_i \\ &= \frac{1}{1 - a_i} (\phi_i^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - a_i y_i)\end{aligned}$$

よって,

$$\phi_i^T \hat{\theta}_i - y_i = \frac{1}{1 - a_i} (\phi_i^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_i)$$

これより，LOOCV による 2 乗誤差 ε は，

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\phi_i^T \hat{\theta}_i - y_i \right)^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{1-a_i} (\phi_i^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_i) \right\}^2 \\ &= \frac{1}{n} \left\| \begin{pmatrix} \frac{1}{1-a_1} (\phi_1^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_1) \\ \frac{1}{1-a_2} (\phi_2^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_2) \\ \vdots \\ \frac{1}{1-a_n} (\phi_n^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_n) \end{pmatrix} \right\|^2\end{aligned}$$

ここでカッコ内について

$$\mathbf{Y} \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{1-a_1} (\phi_1^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_1) \\ \frac{1}{1-a_2} (\phi_2^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_2) \\ \vdots \\ \frac{1}{1-a_n} (\phi_n^T U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - y_n) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{Y} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{1-a_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{1-a_n} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} \phi_1^T \\ \vdots \\ \phi_n^T \end{pmatrix} U^{-1} \Phi^T \mathbf{y} - \mathbf{y} \right) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{1-a_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{1-a_n} \end{pmatrix} (\Phi U^{-1} \Phi^T - \mathbf{I}) \mathbf{y} \\ &= - \begin{pmatrix} \frac{1}{1-a_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{1-a_n} \end{pmatrix} (\mathbf{I} - \Phi U^{-1} \Phi^T) \mathbf{y}\end{aligned}$$

ここで，

$$\mathbf{H} = \mathbf{I} - \Phi U^{-1} \Phi^T$$

について，この対角成分 $D_j (j = 1, 2, \dots, n)$ は

$$D_j = 1 - a_j$$

なので，

$$\tilde{\mathbf{H}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1-a_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{1-a_n} \end{pmatrix}$$

となり，

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \|\tilde{\mathbf{H}}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{y}\|^2$$

よって題意は示された。

補遺

Listing 1 課題 1 のソースコード

```
1  ##Requirement
2  import numpy as np
3  import matplotlib.pyplot as plt
4  import random
```

```

5
6 def func(x, with_noise=True):
7     """基本方程式
8     〇〇〇〇Arg:
9     〇〇〇〇〇〇〇x(float)〇座標 x
10    〇〇〇〇〇〇〇with_noise(boolean)〇ノイズ入れるかどうか
11    〇〇〇〇Return:
12    〇〇〇〇〇〇〇fx(float)〇座標に対応する xy(with_noise?)
13    〇〇〇〇"""
14    noise = 0.05 * np.random.normal(loc=0., scale=1.) if with_noise else 0
15    return np.sin(np.pi*x)/np.pi/x+0.1*x + noise
16
17 def get_sample(x_min=-3., x_max=3., num_sample=50):
18     """サンプル生成
19     〇〇〇〇Arg:
20     〇〇〇〇〇〇〇x_min(float)〇座標の最小値 x〇default=-3.
21     〇〇〇〇〇〇〇x_max(float)〇座標の最大値 x〇default=3.
22     〇〇〇〇〇〇〇num_sample(int)〇サンプルの生成数 (=dim(theta))〇default=50
23
24     〇〇〇〇Return:
25     〇〇〇〇〇〇〇x_lst(list(float))〇座標の集合 x
26     〇〇〇〇〇〇〇fx_lst(list(float))〇座標の集合 y
27     〇〇〇〇"""
28     x_lst = np.linspace(x_min, x_max, num_sample)
29     fx_lst = np.array([func(x, with_noise=True) for x in x_lst])
30     return x_lst, fx_lst
31
32 def calc_least_squared_parameter(x_lst, fx_lst, h, lam, num=1000):
33     """正則化付きで最小二乗回帰を解く 12
34     〇〇〇〇Arg:
35     〇〇〇〇〇〇〇x_lst(ndarray(float))〇サンプルの座標 x
36     〇〇〇〇〇〇〇fx_lst(ndarray(float))〇サンプルの出力系 (に対応 x)
37     〇〇〇〇〇〇〇h(float)〇ハイパーパラメータ
38
39     〇〇〇〇Return:
40     〇〇〇〇〇〇〇x_lst_detail(ndarray(float))〇予測系の座標 x自分で設定する ()
41     〇〇〇〇〇〇〇fx_pred(ndarray(float))〇最小二乗回帰で予測された f(x) (に対応させて。x)
42     〇〇〇〇"""ガウスカーネル
43     #
44     def get_kernel(x, c, h):
45         return np.exp(-(x-c)**2/2/h**2)次元
46     #
47     n = len(x_lst)
48     k_matrix = np.empty((n,n))
49     for i in range(len(k_matrix)):
50         for j in range(len(k_matrix[0])):
51             k_matrix[i][j] = get_kernel(x_lst[i], x_lst[j], h)
52     #theta(dim=n)
53     theta_pred = np.dot(np.linalg.inv((np.dot(k_matrix, k_matrix)+lam*np.eye(n))), np.dot(k_matrix.T, fx_lst))以下生成フェーズ
54     #
55     x_lst_detail = np.linspace(-3, 3, num=num)
56     #値の予測 fx引数 (x)
57     def get_pred_fx(x):
58         fx_pred = 0
59         for i in range(n):
60             k=get_kernel(x, x_lst[i], h)
61             fx_pred += theta_pred[i]*k
62         return fx_pred
63
64     fx_pred_lst = np.empty_like(x_lst_detail)
65     for i in range(len(x_lst_detail)):
66         fx_pred_lst[i] = get_pred_fx(x_lst_detail[i])

```

```

67
68     return x_lst_detail, fx_pred_lst
69
70 def calc_least_squared_parameter_with_cross_valid(x_lst, fx_lst, h, lam, k_num):
71     """クロスバリデーション付きで最小二乗回帰を解く 12
72     〓〓〓Arg:
73     〓〓〓〓〓〓x_lst(ndarray(float)) サンプルの座標 x
74     〓〓〓〓〓〓fx_lst(ndarray(float)) サンプルの出力座標 (座標に対応 x)
75     〓〓〓〓〓〓h(float)
76     〓〓〓〓〓〓lam(float)
77     〓〓〓〓〓〓k_num(int) 〓分割数
78
79     〓〓〓Return:
80     〓〓〓〓〓〓err_mean(float) 〓誤差値の平均
81     〓〓〓 """ サンプル数
82     #
83     sample_num = len(x_lst)
84     # →シャッフルさせる index
85     idx = list(range(sample_num))
86     random.shuffle(idx) 〓分割された時のリスト当たりの個数
87     # 1
88     split_lst_num = int(sample_num/k_num)
89     # を分割 index
90     idx_split = [idx[i:i+split_lst_num] for i in range(0, sample_num, split_lst_num)]
91     err = 0
92     for ki in range(k_num):
93         test_idx = idx_split[ki]
94         train_idx = []
95         for idx in idx_split:
96             if idx == test_idx:
97                 pass
98             else:
99                 for i in idx:
100                     train_idx.append(i)
101         train_x = [x_lst[i] for i in train_idx]
102         train_y = [fx_lst[i] for i in train_idx]
103         test_x = [x_lst[i] for i in test_idx]
104         test_y = [fx_lst[i] for i in test_idx] 〓最小二乗回帰により解く
105         #
106         _, y_pred = calc_least_squared_parameter(train_x, train_y, h, lam, num=sample_num)
107         y_pred_for_err = [y_pred[i] for i in test_idx]
108         for i in range(len(test_x)):
109             err += (y_pred_for_err[i] - test_y[i])**2
110     err /= k_num
111     return err
112
113 def plot_graph(x_sample, y_sample, x_pred, y_pred, y_acc):
114     fig = plt.figure()
115     plt.clf()
116     plt.scatter(x_sample, y_sample, label="sample", c='red', marker='o')
117     plt.plot(x_pred, y_pred, label="prediction", c='blue')
118     plt.plot(x_pred, y_acc, label="true", c="green")
119     plt.legend()
120     plt.savefig(r"C:\Users\msy-o\Documents\lecture\summer\data_analytics\report\02\output\prediction.png")
121     plt.show()
122     return None
123
124 # サンプル生成とりあえず個 (50)
125 x_sample, y_sample = get_sample()
126 # ガウス幅 h
127 gauss_widths = [0.1, 0.3, 1]
128 # 正則化パラメータ
129 regularize_params = [0.05, 0.1, 0.5]

```

```

130 #分割数 k
131 k = 10
132
133 errs = []
134 #とラムダを変化させて実験 h
135 for h in gauss_widths:
136     for l in regularize_params:
137         err = calc_least_squared_parameter_with_cross_valid(x_sample, y_sample, h, l, k)
138         print(" ガウス幅:%1.2f_正則化パラム:%1.2f_err:%1.4f" %(h, l, err))
139         errs.append([h,l,err])
140 #最も評価の良かったと正則化パラムとその時のをとる herr
141 err_min = min(errs, key=lambda x: x[2])
142 print(err_min)
143 x_pred, y_pred = calc_least_squared_parameter(x_sample, y_sample, h=err_min[0], lam=err_min[1])
144 y_acc = np.empty_like(x_pred)
145 for i in range(len(y_acc)):
146     y_acc[i] = func(x_pred[i], with_noise=False)
147
148 plot_graph(x_sample, y_sample, x_pred, y_pred, y_acc)

```
