

先端データ解析論 第3回レポート

電子情報学専攻 48-176403 石毛真修

2017 年 5 月 9 日

大問 1.

線形モデル $f_{\theta}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^b \theta_j \phi_j(\mathbf{x})$ に対する重み付き最小二乗法

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \tilde{\omega}_i (f_{\theta}(\mathbf{x})_i - y_i)^2 = (\Phi^T \tilde{W} \Phi)^{-1} \Phi^T \tilde{W} \mathbf{y}$$

証明

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_1) & \dots & \phi_b(\mathbf{x}_1) \\ \phi_1(\mathbf{x}_2) & \phi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi_b(\mathbf{x}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(\mathbf{x}_n) & \phi_2(\mathbf{x}_n) & \dots & \phi_b(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix}$$

とする。

誤差関数 $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \tilde{\omega}_i (f_{\theta}(\mathbf{x})_i - y_i)^2$ を J とおくと

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y})^T \tilde{W} (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{2} (\Phi \theta - \mathbf{y})^T \tilde{W} (\Phi \theta - \mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{2} \left[\theta^T \Phi^T \tilde{W} \Phi \theta - \theta^T \Phi^T \tilde{W} \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \tilde{W} \Phi \theta + \mathbf{y}^T \tilde{W} \mathbf{y} \right] \end{aligned}$$

この J を最小化したいので、 $\frac{dJ}{d\theta} = 0$ とすると、

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{d\theta} &= \frac{1}{2} \left[2\Phi^T \tilde{W} \Phi \theta - \Phi^T \tilde{W} \mathbf{y} - (\mathbf{y}^T \tilde{W} \Phi)^T \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[2\Phi^T \tilde{W} \Phi \theta - 2\Phi^T \tilde{W} \mathbf{y} \right] \\ &= \Phi^T \tilde{W} \Phi \theta - \Phi^T \tilde{W} \mathbf{y} \end{aligned}$$

$$\therefore \hat{\theta} = (\Phi^T \tilde{W} \Phi)^{-1} \Phi^T \tilde{W} \mathbf{y}$$

大問 2.

微分可能で対称な損失関数 $\rho(r)$ に対して \tilde{r} で接する二次上界は、

$$\tilde{\rho}(r) = \frac{\tilde{\omega}}{2}r^2 + \text{const}$$

証明

$\rho(r)$ は対称なので、それに接する二次上界 $\tilde{\rho}(r)$ も対称になる。よって、

$$\tilde{\rho}(r) = ar^2 + b$$

接しているという条件から、接点の傾きが同じであり、かつ共通の解を持つので、

$$\begin{aligned}\rho'(\tilde{r}) &= 2a\tilde{r} \\ \rho(\tilde{r}) &= a\tilde{r}^2 + b\end{aligned}$$

これを解いて、

$$a = \frac{1}{2} \frac{\rho'(\tilde{r})}{\tilde{r}} \quad b = \rho(\tilde{r}) - \frac{1}{2} \rho'(\tilde{r})\tilde{r}$$

よって、

$$\tilde{\rho}(r) = \frac{1}{2} \frac{\rho'(\tilde{r})}{\tilde{r}} r^2 + \left(\rho(\tilde{r}) - \frac{1}{2} \rho'(\tilde{r})\tilde{r} \right) = \frac{\tilde{\omega}}{2} r^2 + \text{const}$$

大問 3.

まず、次のようなデータ直線 $y = x$ に正規分布から生成されるノイズを載せたデータを作成する。

```
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

n, N = 10, 1000
x = np.linspace(-3, 3, n)
X = np.linspace(-4, 4, N)

# Original data
np.random.seed(5)
y = x + 0.2 * np.random.normal(size=n)
y[2], y[n - 2], y[n - 1] = [-4] * 3
```

次に、適当に初期化したパラメータ $\text{thetas} = [\text{theta1}, \text{theta2}]$ を元に、繰り返し最小二乗法を行うことで Tukey 回帰を行う。なお、コード中の変数 Φ は計画行列である。

```
# Tukey Regression
Phi = np.array([[1, x[i]] for i in range(n)])
thetas = np.random.normal(1, 0.1, 2)
ETA = 2
def w_tukey(r):
    return (1 - (r**2)/(ETA**2))**2 if np.absolute(r) <= ETA else 0
# Iteration
for step in range(20):
    errors = y - np.matmul(Phi, thetas)
    _W = np.diag([w_tukey(err) for err in errors])
    Q = Phi.T @ _W @ Phi
    if np.linalg.det(Q) == 0:
        break
    thetas = np.linalg.inv(Q) @ Phi.T @ _W @ y
```

最後にこれをプロットする。

```
# Prediction
def pred(x):
    return thetas[0] + thetas[1] * x

plt.scatter(x, y)
plt.plot(X, pred(X), 'b-')
axes = plt.gca()
axes.set_ylim([-4.5, 3])
plt.show()
```

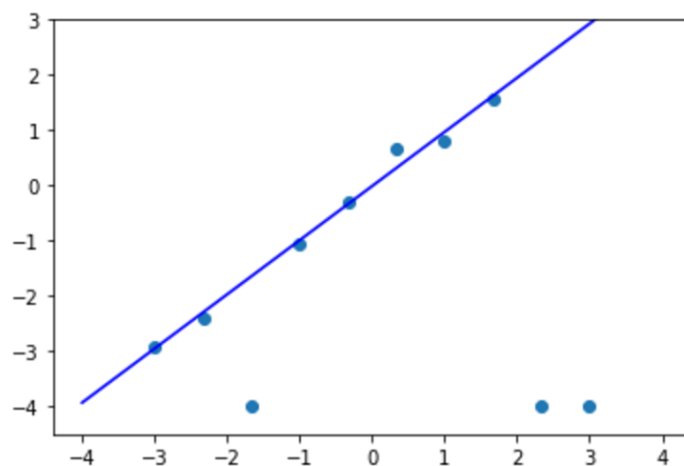


図 1: Tukey 回帰の結果