

先端データ解析論
第九回 レポート

37-196360 森田涼介

2019 年 6 月 25 日

宿題 1

ガウスカーネルモデル

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

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

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & K(\mathbf{x}_{n+n'}, \mathbf{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(\mathbf{x}_{n+n'}, \mathbf{x}_1) & \cdots & K(\mathbf{x}_{n+n'}, \mathbf{x}_{n+n'}) \end{bmatrix} \quad (3)$$

に対してラプラス正則化最小二乗分類を実装する。

$$\sum_{i, i'=1}^m W_{i, i'} (a_i - a_{i'})^2 = 2 \sum_{i, i'=1}^m L_{i, i'} a_i a_{i'} \quad (4)$$

$$\mathbf{D} = \text{diag}\left(\sum_{i=1}^m W_{1, i}, \cdots, \sum_{i=1}^m W_{m, i}\right) \quad (5)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W} \quad (6)$$

近傍グラフの重みにはガウスカーネルを用い、

$$W_{i, i'} = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i'}\|^2}{2h^2}\right) \quad (7)$$

とする。

目的関数は、

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n (f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|^2 + \nu \sum_{i, i'=1}^{n+n'} W_{i, i'} (f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_i) - f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_{i'}))^2 \quad (8)$$

$$= \|\tilde{\mathbf{K}} \boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|^2 + 2\nu \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{K}^T \mathbf{L} \mathbf{K} \boldsymbol{\theta} \quad (9)$$

となる。これを $\boldsymbol{\theta}$ で偏微分すると、

$$\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 2\tilde{\mathbf{K}}^T \tilde{\mathbf{K}} \boldsymbol{\theta} - 2\tilde{\mathbf{K}} \mathbf{y} + 2\lambda \boldsymbol{\theta} + 4\nu \mathbf{K}^T \mathbf{L} \mathbf{K} \boldsymbol{\theta} \quad (10)$$

$$= 2\left(\tilde{\mathbf{K}}^T \tilde{\mathbf{K}} + \lambda \mathbf{I} + 2\nu \mathbf{K}^T \mathbf{L} \mathbf{K}\right) \boldsymbol{\theta} - 2\tilde{\mathbf{K}} \mathbf{y} \quad (11)$$

$$= \mathbf{0} \quad (12)$$

これより、

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) = \left(\tilde{\mathbf{K}}^T \tilde{\mathbf{K}} + \lambda \mathbf{I} + 2\nu \mathbf{K}^T \mathbf{L} \mathbf{K}\right)^{-1} \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{y} \quad (13)$$

である。

$h = 1.0$, $\lambda = 1.0$, $\nu = 1.0$ としてこれを実装したものが 8 ページの Listing 1 である。

結果は図 1 に示した通りである。教師ありのデータは各クラス 1 つずつしかないが、ラベルなしのデータについても上手く分けられている。

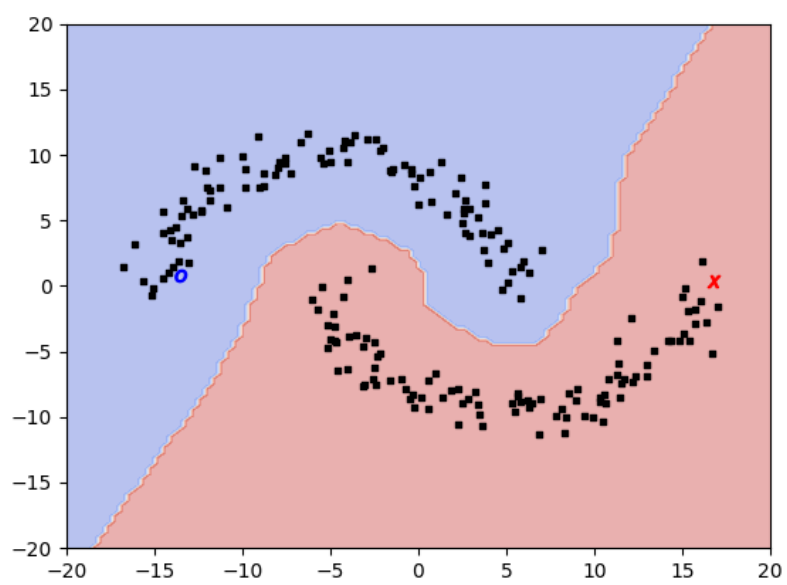


图 1: 結果

宿題 2

訓練標本の分布を p_{train} , テスト標本の分布を p_{test} , テスト標本における各クラスの訓練標本の分布の混合比を π , 混合分布を q_π とする。二値分類を考えると,

$$q_\pi = \pi p_{\text{train}}(\mathbf{x}|y=+1) + (1-\pi) p_{\text{train}}(\mathbf{x}|y=-1) \quad (14)$$

となる。いま, エネルギー距離の二乗は,

$$D_E^2(p_{\text{test}}, q_\pi) = 2\mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \mathbf{x} \sim q_\pi} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}', \tilde{\mathbf{x}}' \sim p_{\text{test}}} [||\mathbf{x}' - \tilde{\mathbf{x}}'||] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}} \sim q_\pi} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] \quad (15)$$

である。ここで,

$$A_{y,\tilde{y}} = \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|y), \tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|\tilde{y})} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] \quad (16)$$

$$b_y = \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|y)} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] \quad (17)$$

とおく。式 (15) の第一項は,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \mathbf{x} \sim q_\pi} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}} [\mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim q_\pi} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||]] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}} [\pi \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1)} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] + (1-\pi) \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1)} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||]] \\ &= \pi \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1)} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] + (1-\pi) \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1)} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] \\ &= \pi b_{+1} + (1-\pi) b_{-1} \end{aligned}$$

よって,

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \mathbf{x} \sim q_\pi} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] = (b_{+1} - b_{-1})\pi + b_{-1} \quad (18)$$

第二項は,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}} \sim q_\pi} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] &= \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim q_\pi} [\mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim q_\pi} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||]] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim q_\pi} [\pi \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1)} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] + (1-\pi) \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1)} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||]] \\ &= \pi \{ \pi \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1), \tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\tilde{\mathbf{x}}|+1)} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] + (1-\pi) \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1), \tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\tilde{\mathbf{x}}|+1)} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] \} \\ &\quad + (1-\pi) \{ \pi \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1), \tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\tilde{\mathbf{x}}|-1)} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] + (1-\pi) \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1), \tilde{\mathbf{x}} \sim p_{\text{train}}(\tilde{\mathbf{x}}|-1)} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] \} \\ &= \pi^2 A_{+,+1} + \pi(1-\pi) A_{-,+1} + (1-\pi)\pi A_{+,-1} + (1-\pi)^2 A_{-,-1} \\ &= (A_{+,+1} - A_{-,+1} - A_{+,-1} + A_{-,-1})\pi^2 + (A_{-,+1} + A_{+,-1} - 2A_{-,-1})\pi + A_{-,-1} \end{aligned}$$

ここで, $A_{+,-1} = A_{-,+1}$ から,

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}} \sim q_\pi} [||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] = (-2A_{+,-1} + A_{+,+1} + A_{-,-1})\pi^2 + 2(A_{+,-1} - A_{-,-1})\pi + A_{-,-1} \quad (19)$$

式 (15) に式 (18), (19) を代入して,

$$\begin{aligned} J(\pi) &= 2\{(b_{+1} - b_{-1})\pi + b_{-1}\} - \mathbb{E}_{\mathbf{x}', \tilde{\mathbf{x}}' \sim p_{\text{test}}} [||\mathbf{x}' - \tilde{\mathbf{x}}'||] \\ &\quad - \{(-2A_{+,-1} + A_{+,+1} + A_{-,-1})\pi^2 + 2(A_{+,-1} - A_{-,-1})\pi + A_{-,-1}\} \\ &= (2A_{+,-1} - A_{+,+1} - A_{-,-1})\pi^2 - 2(A_{+,-1} - A_{-,-1} - b_{+1} + b_{-1})\pi \\ &\quad + \{2b_{-1} - A_{-,-1} - \mathbb{E}_{\mathbf{x}', \tilde{\mathbf{x}}' \sim p_{\text{test}}} [||\mathbf{x}' - \tilde{\mathbf{x}}'||]\} \end{aligned}$$

となる。

宿題 3

線形モデル

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x} + \theta_0 \quad (20)$$

に対し、クラス比重み付き最小二乗法を実装する。

クラス比の推定値は、

$$\tilde{\pi} = \frac{\hat{A}_{+1,-1} - \hat{A}_{-1,-1} - \hat{b}_{+1} + \hat{b}_{-1}}{2\hat{A}_{+1,-1} - \hat{A}_{+1,+1} - \hat{A}_{-1,-1}} \quad (21)$$

$$\hat{\pi} = \min(1, \max(0, \tilde{\pi})) \quad (22)$$

ここで、

$$\hat{A}_{y, \bar{y}} = \frac{1}{n_y n_{\bar{y}}} \sum_{i: y_i = y} \sum_{\bar{i}: y_{\bar{i}} = \bar{y}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{\bar{i}}\| \quad (23)$$

$$\hat{b}_y = \frac{1}{n' n_y} \sum_{i'=1}^{n'} \sum_{i: y_i = y} \|\mathbf{x}_{i'} - \mathbf{x}_i\| \quad (24)$$

である。

いま、

$$\pi_i = \frac{p_{\text{test}}(y_i)}{p_{\text{train}}(y_i)} = \begin{cases} \hat{\pi} & (y = +1) \\ 1 - \hat{\pi} & (y = -1) \end{cases} \quad (25)$$

$$\Pi = \text{diag}(\pi_1, \dots, \pi_n) \quad (26)$$

とし、また、

$$\Phi = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,0} & x_{1,1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n,0} & x_{n,1} \end{bmatrix} \quad (27)$$

$$\Theta = (\theta_0, \boldsymbol{\theta}^T)^T \quad (28)$$

とすると、目的関数は、

$$J(\Theta) = \sum_{i=1}^n \frac{p_{\text{test}}(y_i)}{p_{\text{train}}(y_i)} (f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 \quad (29)$$

$$= (\Theta \Phi - \mathbf{y})^T \Pi (\Theta \Phi - \mathbf{y}) \quad (30)$$

となり、この Θ による偏微分が $\mathbf{0}$ となることから、

$$\frac{\partial J}{\partial \Theta} = 2\Phi^T \Pi \Phi \Theta - 2\mathbf{y}^T \Phi^T \Pi \Theta = \mathbf{0} \quad (31)$$

$$\hat{\Theta} = (\Phi^T \Pi \Phi)^{-1} \Phi^T \Pi \mathbf{y} \quad (32)$$

を得る。

これを実装すると 12 ページの Listing 2 のようになる。重み付きの結果は、訓練データに対するものを図 2 に、テストデータに対するものを図 3 に示した。また、重み付けなしについても実験を行い、その結果は、訓練データに対するものを図 4 に、テストデータに対するものを図 5 に示した。図を見ると、重み付けありの方が汎化性能が高くなっていることがわかる。

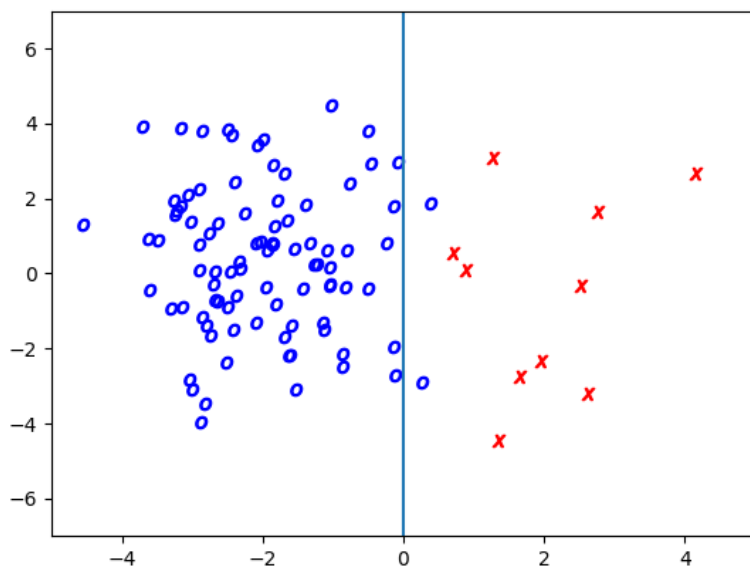


図 2: 重み付き，訓練データに対する結果

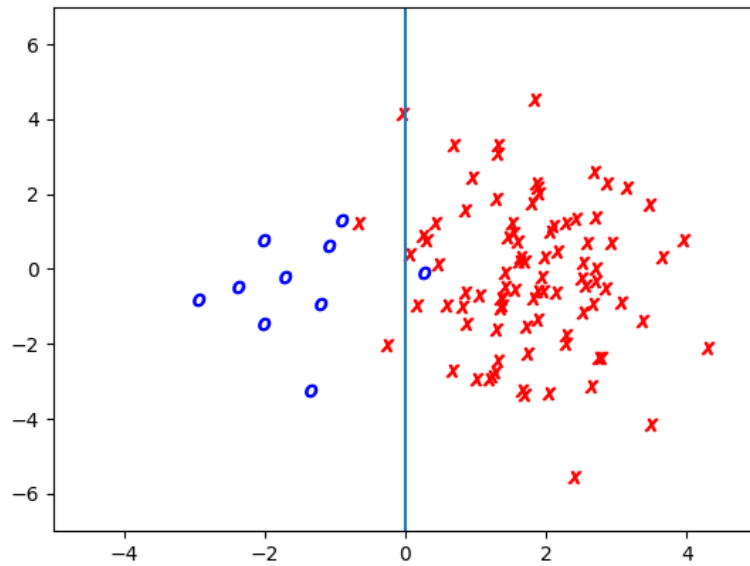


図 3: 重み付き, テストデータに対する結果

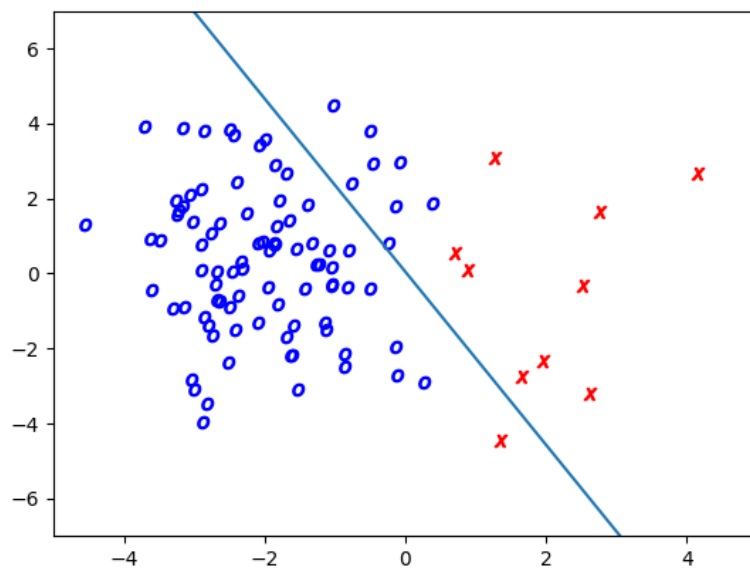


図 4: 重み付けなし, 訓練データに対する結果

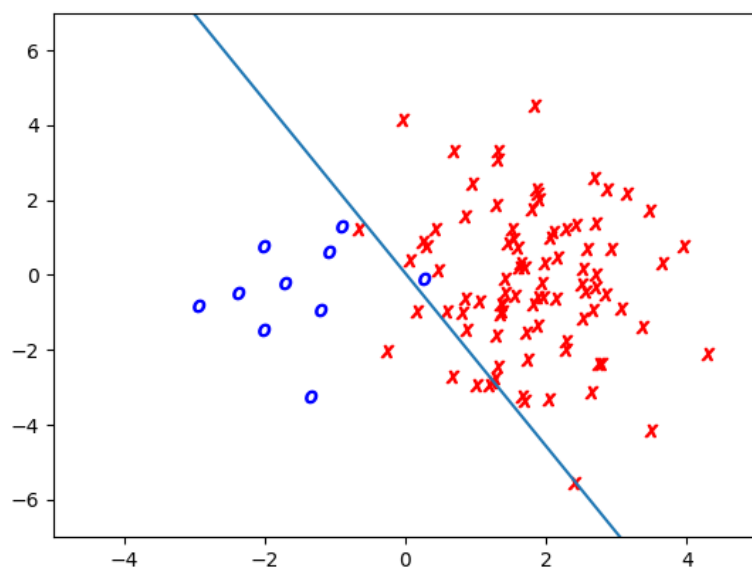


図 5: 重み付けなし, テストデータに対する結果

プログラム

実行環境と用いた言語・ライブラリを以下の表 1 に示す。

表 1: プログラムの実行環境

OS	: Microsoft Windows 10 Pro (64bit)
CPU	: Intel(R) Core(TM) i5-4300U
RAM	: 4.00 GB
使用言語	: Python3.6
可視化	: matplotlib ライブラリ

Listings 1: assignment1.py

```
1  # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
4  import numpy as np
5  import matplotlib.pyplot as plt
6
7
8  def generate_data(n=200):
9      x = np.linspace(0, np.pi, n // 2)
10     u = np.stack([np.cos(x) + .5, -np.sin(x)], axis=1) * 10.
11     u += np.random.normal(size=u.shape)
12     v = np.stack([np.cos(x) - .5, np.sin(x)], axis=1) * 10.
13     v += np.random.normal(size=v.shape)
14     x = np.concatenate([u, v], axis=0)
15     y = np.zeros(n)
16     y[0] = 1
17     y[-1] = -1
18     return x, y
19
20
21 def calc_norm(x, c, save_memory=False):
22     if save_memory:
23         n_x = x.shape[1]
24         n_c = c.shape[0]
25         d = x.shape[-1]
26         norm = np.zeros((n_c, n_x))
27         x = np.reshape(x, (n_x, d))
28         c = np.reshape(c, (n_c, d))
29         for i in range(len(x)):
30             x_i = x[i]
31             norm[i, :] = np.sum((x_i - c)**2, axis=-1)
32     else:
```

```

33         norm = np.sum((x - c) ** 2, axis=-1)
34     return norm
35
36
37 def gauss_kernel(x, c, h, save_memory=False):
38     norm = calc_norm(x, c, save_memory)
39     ker = np.exp(- norm / (2*h**2))
40     return ker
41
42
43 def calc_design_matrix(x, c, h, kernel):
44     return kernel(x[None], c[:, None], h)
45
46
47 def lrls(x, y, h=1., l=1., nu=1., kernel=gauss_kernel):
48     """
49
50     :param x: data points
51     :param y: labels of data points
52     :param h: width parameter of the Gaussian kernel
53     :param l: weight decay
54     :param nu: Laplace regularization
55     :return:
56     """
57     x_tilde = x[y!=0]
58     K = calc_design_matrix(x, x, h, kernel)
59     K_tilde = calc_design_matrix(x_tilde, x, h, kernel)
60
61     W = K
62     D = np.diag(W.sum(axis=1))
63     L = D - W
64
65     tmp = K_tilde.dot(K_tilde.T) + l*np.eye(len(K_tilde)) +
66         2*nu*K.dot(L).dot(K)
67     theta = np.linalg.inv(tmp).dot(K_tilde).dot(y[y!=0])
68     return theta
69
70 def supervised_train(x, y, h=1., l=1., kernel=gauss_kernel):
71     K = calc_design_matrix(x, x, h, kernel)
72     tmp = K.dot(K.T) + l*np.eye(len(K))
73     theta = np.linalg.inv(tmp).dot(K).dot(y)
74     return theta
75
76
77 def visualize(x, y, theta, h=1., grid_size=100, path=None):
78     plt.xlim(-20., 20.)

```

```

79     plt.ylim(-20., 20.)
80     grid = np.linspace(-20., 20., grid_size)
81
82     X, Y = np.meshgrid(grid, grid)
83     mesh_grid = np.stack([np.ravel(X), np.ravel(Y)], axis=1)
84
85     k = np.exp(
86         -np.sum(
87             (x.astype(np.float32)[:, None] -
88              mesh_grid.astype(np.float32)[None])**2,
89             axis=2).astype(np.float64)
90         / (2 * h ** 2)
91     )
92     plt.contourf(
93         X, Y,
94         np.reshape(np.sign(k.T.dot(theta)), (grid_size, grid_size)),
95         alpha=.4,
96         cmap=plt.cm.coolwarm,
97     )
98     plt.scatter(x[y==0][:, 0], x[y == 0][:, 1], marker='$.$', c='black')
99     plt.scatter(x[y==1][:, 0], x[y == 1][:, 1], marker='$X$', c='red')
100    plt.scatter(x[y==-1][:, 0], x[y == -1][:, 1], marker='$O$', c='blue')
101    if path:
102        plt.savefig(path)
103    plt.show()
104
105    def main():
106        # settings
107        h = 1.0
108        lamb = 1.0
109        nu = 1.0
110        n = 200
111        fig_path = '../figures/assignment1_result.png'
112        np.random.seed(0)
113
114
115        # generate data
116        x, y = generate_data(n)
117        #print(x.shape, y.shape)
118
119
120        # train
121        theta = lrls(x, y, h=h, l=lamb, nu=nu)
122
123        # supervised
124        #x, y = x[y!=0], y[y!=0]

```

```
125     #theta = supervised_train(x, y, h=h, l=lamb,)
126
127
128     # result
129     print(f'#data: {n}')
130     print(f'h = {h}    lambda = {lamb}    nu = {nu}')
131     #print('theta = \n', theta)
132
133     visualize(x, y, theta, path=fig_path)
134
135
136 if __name__ == '__main__':
137     main()
```

Listings 2: assignment3.py

```

1  # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
4  import numpy as np
5  import matplotlib.pyplot as plt
6
7
8  def generate_data(n_total, n_positive):
9      x = np.random.normal(size=(n_total, 2))
10     x[:n_positive, 0] -= 2
11     x[n_positive:, 0] += 2
12     x[:, 1] *= 2.
13     y = np.empty(n_total, dtype=np.int64)
14     y[:n_positive] = 0
15     y[n_positive:] = 1
16     return x, y
17
18
19 def calc_A(y, y_tilde, x_train, y_train):
20     indices_i = np.where(y_train == y)[0]
21     indices_i_tilde = np.where(y_train == y_tilde)[0]
22
23     if len(indices_i) * len(indices_i_tilde) == 0:
24         return 0
25
26     x_tilde = x_train[indices_i_tilde]
27     A = 0
28     for idx_i in indices_i:
29         A += np.sum(np.sqrt(np.sum((x_train[idx_i] - x_tilde)**2, axis=0)))
30     A /= (len(indices_i) * len(indices_i_tilde))
31     return A
32
33
34 def calc_b(y, x_train, y_train, x_test):
35     x_i = x_train[y_train == y]
36
37     if len(x_i) * len(x_test) == 0:
38         return 0
39
40     b = 0
41     for x_i_dash in x_test:
42         b += np.sum(np.sqrt(np.sum((x_i_dash - x_i)**2, axis=0)))
43     b /= (len(x_i) * len(x_test))
44     return b
45
46

```

```

47 def estimate_pi(x_train, y_train, x_test):
48     x, y = x_train, y_train
49     A_pp = calc_A(1, 1, x, y)
50     A_pm = calc_A(1, -1, x, y)
51     A_mm = calc_A(-1, -1, x, y)
52     b_p = calc_b(1, x_train, y_train, x_test)
53     b_m = calc_b(-1, x_train, y_train, x_test)
54
55     pi_hat = (A_pm - A_mm - b_p + b_m) / (2*A_pm - A_pp - A_mm)
56     pi_hat = min(1, max(0, pi_hat))
57     return pi_hat
58
59
60 def cwls(train_x, train_y, test_x, is_weighted=True):
61     n = train_y.shape[0]
62
63     if is_weighted:
64         pi_hat = estimate_pi(train_x, train_y, test_x)
65         Pi = np.zeros(n)
66         Pi[train_y == 1] = pi_hat
67         Pi[train_y == -1] = 1 - pi_hat
68         Pi = np.diag(Pi)
69     else:
70         Pi = np.eye(n)
71
72     Phi = np.concatenate([np.ones(n)[:, np.newaxis], train_x], axis=1)
73
74     theta =
75     np.linalg.inv(Phi.T.dot(Pi).dot(Phi)).dot(Phi.T).dot(Pi).dot(train_y)
76     return theta
77
78 def visualize(train_x, train_y, test_x, test_y, theta, is_weighted=True):
79     str_weighted = 'weighted' if is_weighted else 'unweighted'
80     for x, y, name in [(train_x, train_y, 'train'), (test_x, test_y,
81 'test')]:
82         plt.xlim(-5., 5.)
83         plt.ylim(-7., 7.)
84         lin = np.array([-5., 5.])
85         plt.plot(lin, -(theta[2] + lin * theta[0]) / theta[1])
86         plt.scatter(x[y==0][:, 0], x[y==0][:, 1], marker='$O$', c='blue')
87         plt.scatter(x[y==1][:, 0], x[y==1][:, 1], marker='$X$', c='red')
88
89     plt.savefig('../figures/assignment3_result_{}_{}.png'.format(str_weighted,
90 name))
91     plt.show()

```

```

90
91 def main():
92     # settings
93     is_weighted = False
94     np.random.seed(0)
95
96
97     # generate data
98     train_x, train_y = generate_data(n_total=100, n_positive=90)
99     eval_x, eval_y = generate_data(n_total=100, n_positive=10)
100
101
102     # train
103     theta = cwls(train_x, train_y, eval_x, is_weighted=is_weighted)
104
105
106     # result
107     print('result')
108     visualize(train_x, train_y, eval_x, eval_y, theta,
109               is_weighted=is_weighted)
110
111 if __name__ == '__main__':
112     main()

```