

## 宿題 1

ガウスカーネルモデルに対する L2 正則化を用いた最小二乗回帰の交差確認法を実装し，正則化パラメータとガウス幅を決定する。

ガウスカーネルモデルは次のように表される。

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

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

このとき，L2 正則化を用いた最小二乗誤差は，

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{K}\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}\|^2 + \frac{\lambda}{2} \|\boldsymbol{\theta}\|^2 \quad (3)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \cdots & K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{bmatrix} \quad (4)$$

と表される。ここで， $L$  の  $\boldsymbol{\theta}$  による偏微分が  $\mathbf{0}$  となるような  $\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}$  が  $L$  に最小値を与えることから，

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \mathbf{K}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\theta} - \mathbf{K}^T \mathbf{y} + \lambda \boldsymbol{\theta} \quad (5)$$

$$= (\mathbf{K}^2 + \lambda \mathbf{I}) \boldsymbol{\theta} - \mathbf{K} \mathbf{y} \quad (6)$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{K}^2 + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{K} \mathbf{y} \quad (7)$$

ここで， $\mathbf{K}$  が対称行列であることを用いた。

いま，真のデータが

$$f(x) = \sin(\pi x) / (\pi x) + 0.1x \quad (-3 \leq x < 3) \quad (8)$$

から生成されていて，そのサンプルが 50 個ある場合を考える。このデータに対しガウスカーネルモデルを適用し，交差確認法によってそのハイパーパラメータ  $h, \lambda$  を推定する。いま，交差確認法のために，データを 5 分割し，それぞれのテスト誤差の平均をそのモデルのテスト誤差とした。また，テスト誤差には L2 正則化項は含まず， $y$  の推定値と真の値の二乗和誤差のみを用いた。

まず，大域的に探索するため，

$$h = 1 \times 10^{-2}, 1 \times 10^{-1}, 1, 1 \times 10^1 \quad (9)$$

$$\lambda = 1 \times 10^{-6}, 1 \times 10^{-5}, 1 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-2}, 1 \times 10^{-1} \quad (10)$$

として，各  $(h, \lambda)$  の組について交差確認法を用いて誤差を計算したところ，

$$h = 1 \quad (11)$$

$$\lambda = 1 \times 10^{-5} \quad (12)$$

$$L = 1.106 \quad (13)$$

と求まった。次に、求まった範囲の付近で最適なものを探したところ、

$$h = 1.1 \tag{14}$$

$$\lambda = 8 \times 10^{-7} \tag{15}$$

$$L = 1.04 \tag{16}$$

と求まった。

大域的に探索したときの結果を図??に示す。これより、ガウス幅は 0.1–1.0 あたりに設定する必要があることがわかる。また、プログラムは??ページの Listing ??に記載した。

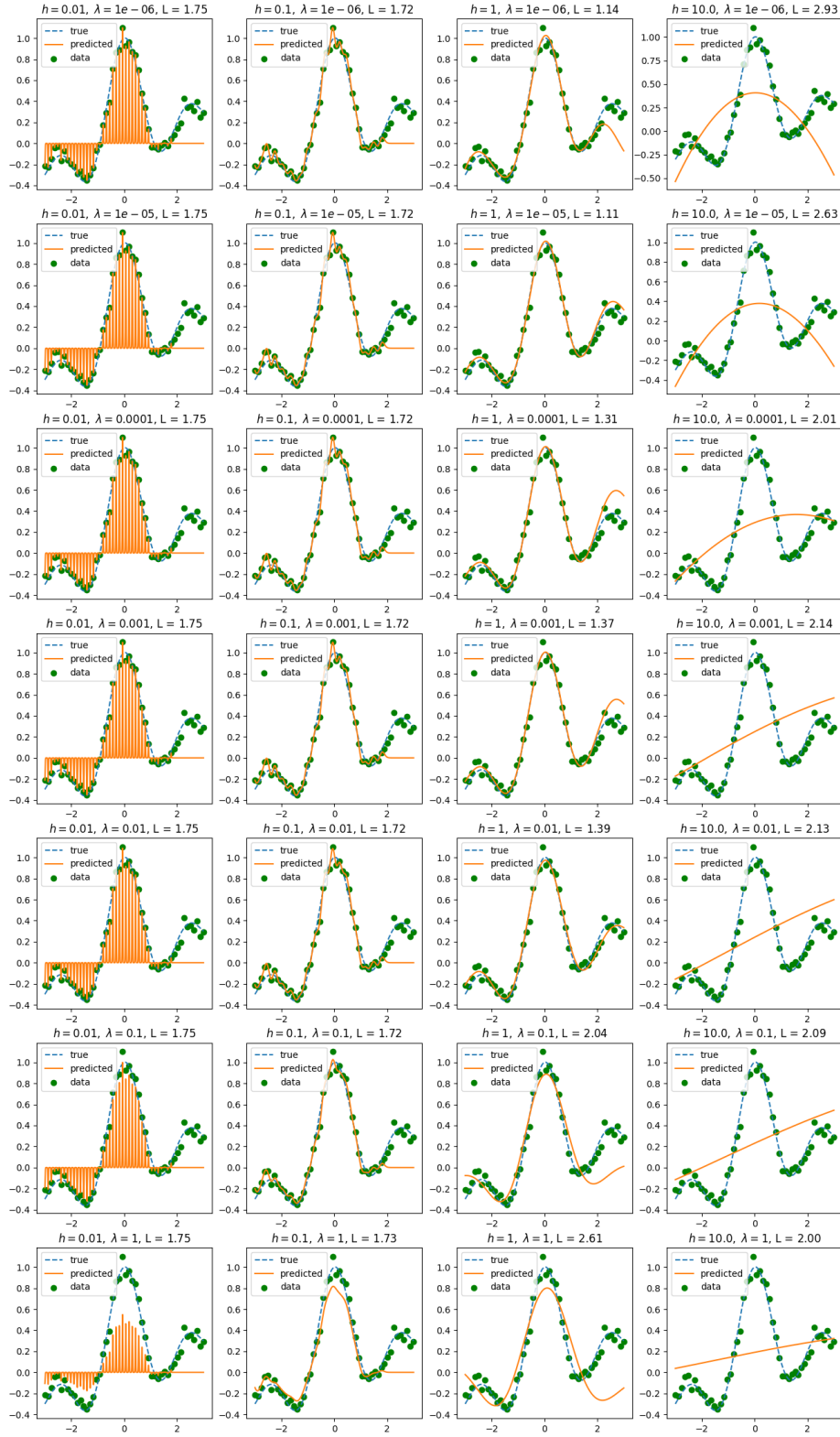


図 1: 交差確認法の結果