機械学習入門

経済学部 BX584

第13回 パーセプトロンとSVM

線形関数を分類にどう使うか？

- 回帰では関数の出力値をそのまま使っていた
  - 出力値の範囲は−∞から+∞まで。
- 出力値を2値分類に使うにはどうすればいいか？
  - 無理やり0から1の範囲に押し込める（1か0かで2クラスに分ける）
    - ロジスティック回帰
  - 符号を使う（正か負かで2クラスに分ける）
    - パーセプトロン、SVM

線形関数とは（正確にはアフィン関数）

- d次元ベクトルを入力とし、スカラーを出力とする以下のような関数

$$f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) = b + w_1 x_1 + \cdots + w_D x_D$$

- $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$とも書ける。
  - ただし$\boldsymbol{w} = (b, w_1, \ldots, w_D)$、および、$\boldsymbol{x} = (1, x_1, \ldots, x_D)$とする。
- 訓練データを使って$(b, w_1, \ldots, w_D)$を求めるのが機械学習
  - 損失関数が小さくなるように、これらのパラメータを計算機に動かさせる。

線形関数の使いみち

- 回帰 (regression)
  - 分析対象の特定の性質がひとつの数値で表される　←　望ましい出力値
  - $f(\boldsymbol{x})$がその数値を表すように線形関数を選ぶ
- 二値分類 (binary classification) … 多値分類についてはいずれ説明します。
  - 分析対象が2つのグループに分かれている
  - $f(\boldsymbol{x})$の値によって2つのグループが区別できるように線型関数を選ぶ

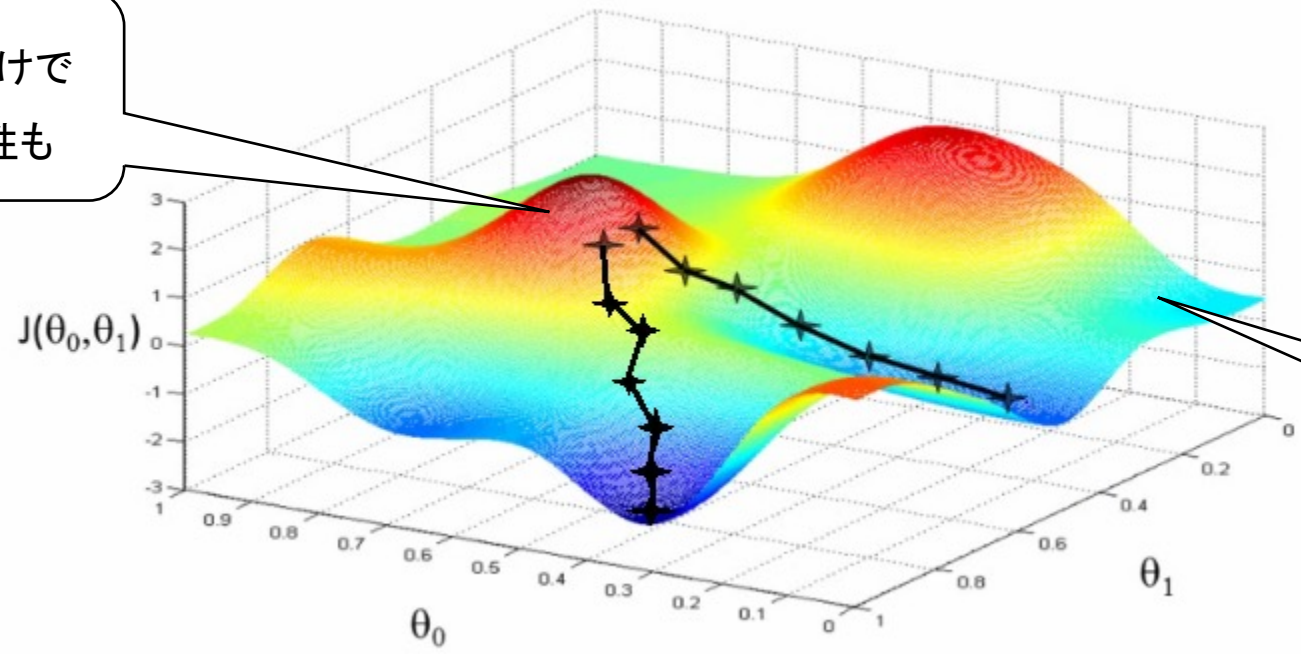
損失関数とは

- それを最小化すると良い線形関数が見つかるような関数
- 「損失 (loss)」＝値が小さいほど良い
  - 無数にある$\boldsymbol{w}$の集合に、下るほど良いことがあるような地形を持ち込むのが、損失関数。
- 普通は勾配を利用して最小化する
  - 損失関数によって持ち込まれた地形の傾きを調べて（＝微分して）下っていく

損失関数は地形を持ち込む

- 坂を下る方向にパラメータを変化させる → 極小値に近づく

出発点が少し違うだけで
別の谷に行く可能性も



損失関数によって
持ち込まれた地形

https://hackernoon.com/gradient-descent-aynk-7cbe95a778da

モデルと損失関数（パーセプトロンの場合）

- 線形関数 $f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) = b + w_1 x_1 + \cdots + w_D x_D$ をモデルとして採用
- 損失関数を以下のように決める

$$L(\boldsymbol{w}) = \sum_{i=1}^{N} \max(0, -t_i f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x_i}))$$

  - $\boldsymbol{x_i} = (x_{i,1}, \ldots, x_{i,D})$は$i$番目のデータ点
  - t_iは正解ラベルで、-1か1かのどちらか

    例）スパムメールを$t_i = -1$で、通常メールを$t_i = 1$で表す。

確率的勾配降下法による損失関数の最小化

- 確率的勾配降下法
  - 各訓練データについて勾配を求め、下る方向にパラメータを更新
- パーセプトロンの場合
  - 個々の$\boldsymbol{x_i}$の損失関数の値 $L_i = \max\left(0, -t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)\right)$ について・・・
  - $L_i = -t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)$ の場合：　$-t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)$を各パラメータで偏微分
  - $L_i = 0$ の場合：　　0を偏微分しても0

パーセプトロンでの損失関数の勾配

- $L_i = \max\left(0, -t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)\right) = -t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)$となる場合のほうを考える
  - $\frac{\partial}{\partial b} L_i = \frac{\partial}{\partial b}\left(-t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)\right) = -t_i \frac{\partial}{\partial b} f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)$
  - w_1, w_2等についても同様に偏微分
- $f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)$の偏微分
  - $\frac{\partial}{\partial b} f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right) = \frac{\partial}{\partial b}\left(b + w_1 x_{i,1} + \cdots + w_D x_{i,D}\right) = 1$
  - $\frac{\partial}{\partial w_j} f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right) = \frac{\partial}{\partial w_j}\left(b + w_1 x_{i,1} + \cdots + w_D x_{i,D}\right) = x_{i,j}\ \left(j = 1, \ldots D\right)$

パーセプトロンの更新式

$$\begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} - \eta(-t_i) \begin{bmatrix} 1 \\ x_{i,1} \\ \vdots \\ x_{i,D} \end{bmatrix}$$

ロジスティック回帰の更新式（場合分け）

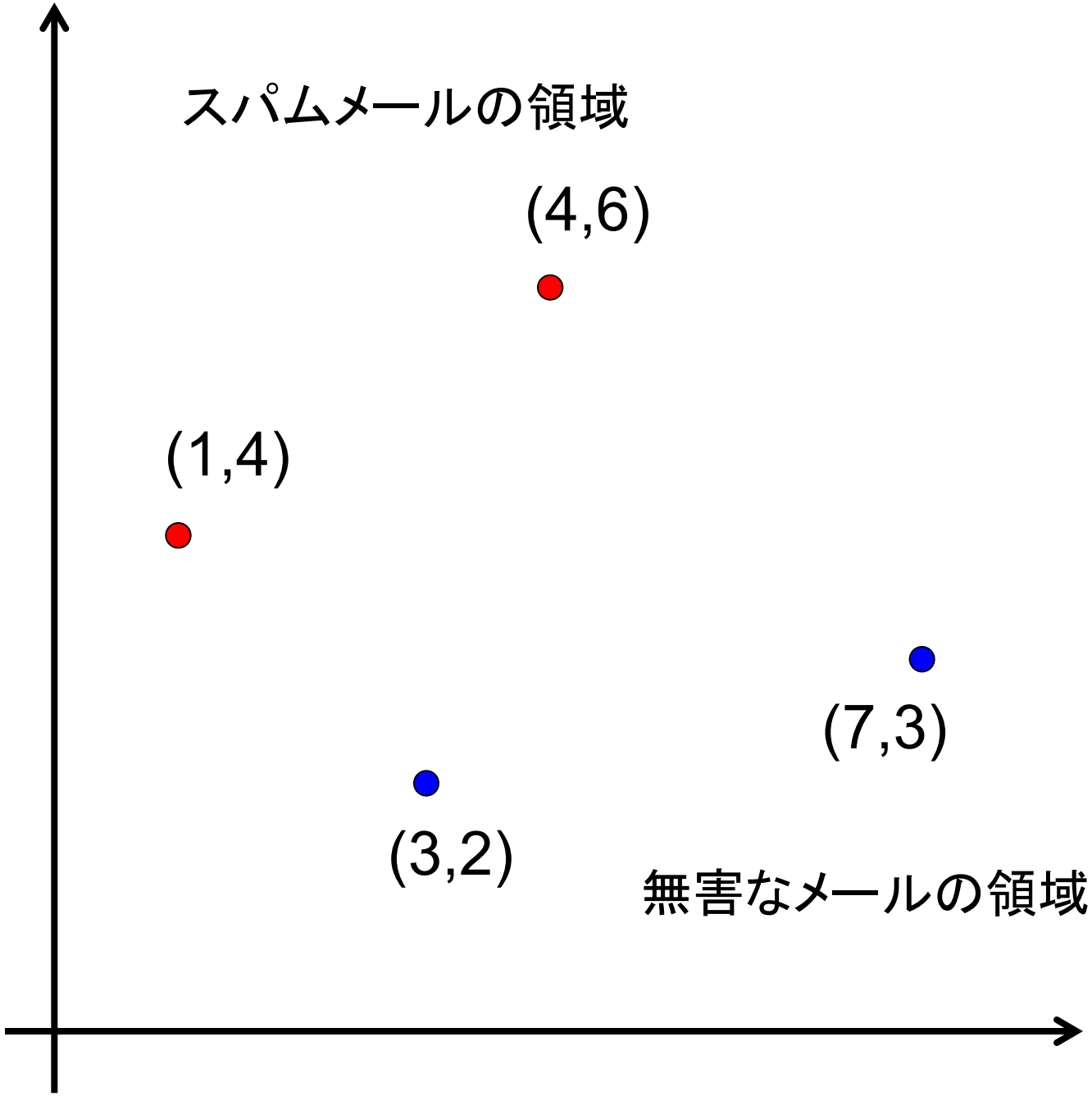
- $t_i = 1$のとき

$$\begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} + \eta\left(1 - g(\boldsymbol{x}_i)\right) \begin{bmatrix} 1 \\ x_{i,1} \\ \vdots \\ x_{i,D} \end{bmatrix}$$

- $t_i = 0$のとき

$$\begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} - \eta g(\boldsymbol{x}_i) \begin{bmatrix} 1 \\ x_{i,1} \\ \vdots \\ x_{i,D} \end{bmatrix}$$

例題



scikit-learnでパーセプトロンを実装

```
from sklearn import linear_model

clf = linear_model.Perceptron()
x = [[1,4], [4,6], [3,2], [7,3]]
y = [-1, -1, 1, 1]
clf.fit(x, y)
print(clf.coef_)
print(clf.intercept_)
```

SVMとパーセプトロン

- 線形関数 $f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) = b + w_1 x_1 + \cdots + w_D x_D$ をモデルとして採用
- SVMで最小化する関数は下記のとおり

$$L(\boldsymbol{w}) = \min_{\boldsymbol{w}} \|\boldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^{N} \max\left(0, 1 - t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right)\right)$$

- パーセプトロンの損失関数は下記のとおり

$$L(\boldsymbol{w}) = \sum_{i=1}^{N} \max(0, -t_i f_{\boldsymbol{w}}\left(\boldsymbol{x_i}\right))$$

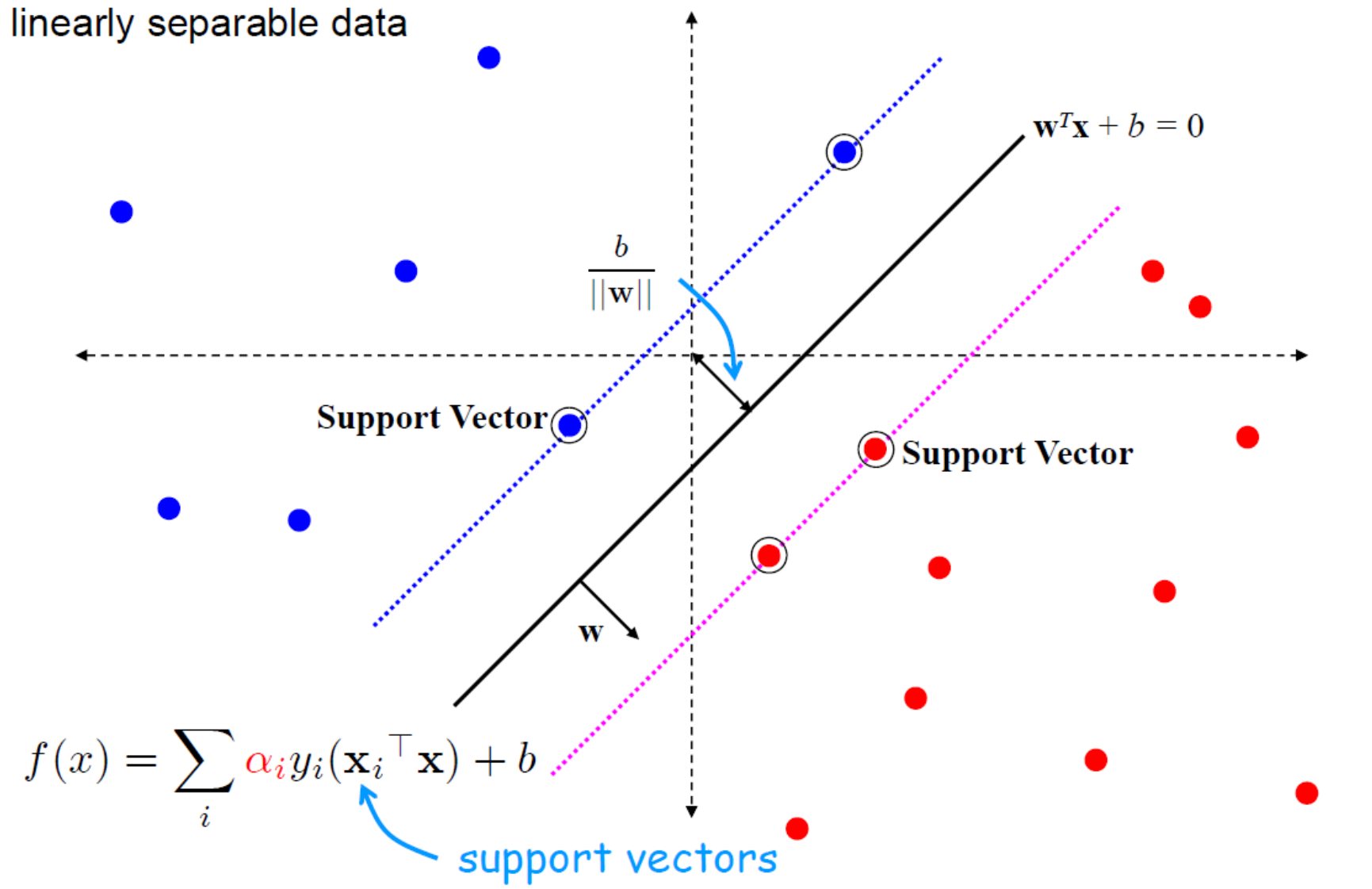
SVMとパーセプトロンの違い

- SVMにはL2ノルムによる正則化の項がある
  - 正則化項と損失関数の和を最小にする
- 損失関数がパーセプトロンと似ている
- しかしパーセプトロンより「厳しい」損失関数になっている
  - $t_i f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x_i})$の値が1以上にならないと、損失が0にならない
    - パーセプトロンでは、$t_i f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x_i})$の値が0以上になれば、損失は0になっていた
    - つまり、符号が一致する以上のことを要求する損失関数になっている

SVMで最小化する関数がこうなっている理由

- 説明は割愛します
- 概略だけ・・・
  - マージン最大化という考え方を導入する
    - データ集合を線形分離する（線形関数が表す超平面で二分割する）とき、超平面の両側の一定の幅（マージン）にはデータが入らないようにする
  - 現実にはデータ集合を線形分離できない場合もあるので、違反を許す
    - これをソフトマージンと呼ぶ
  - 以上のように考えると、さきほどの式が得られる

Support Vector Machine

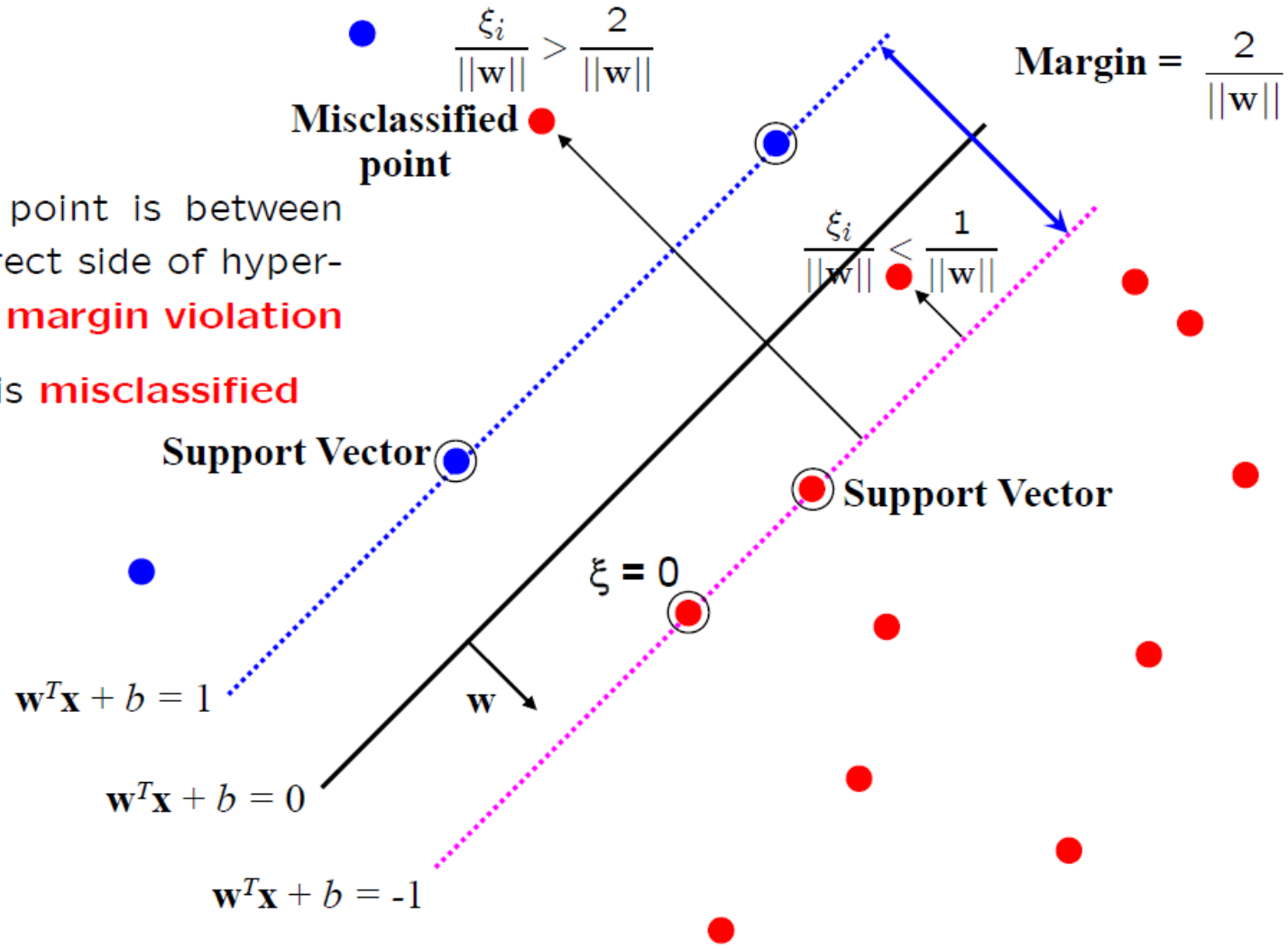


http://www.robots.ox.ac.uk/~az/lectures/ml/lect2.pdf

Introduce "slack" variables

$\xi_i \geq 0$

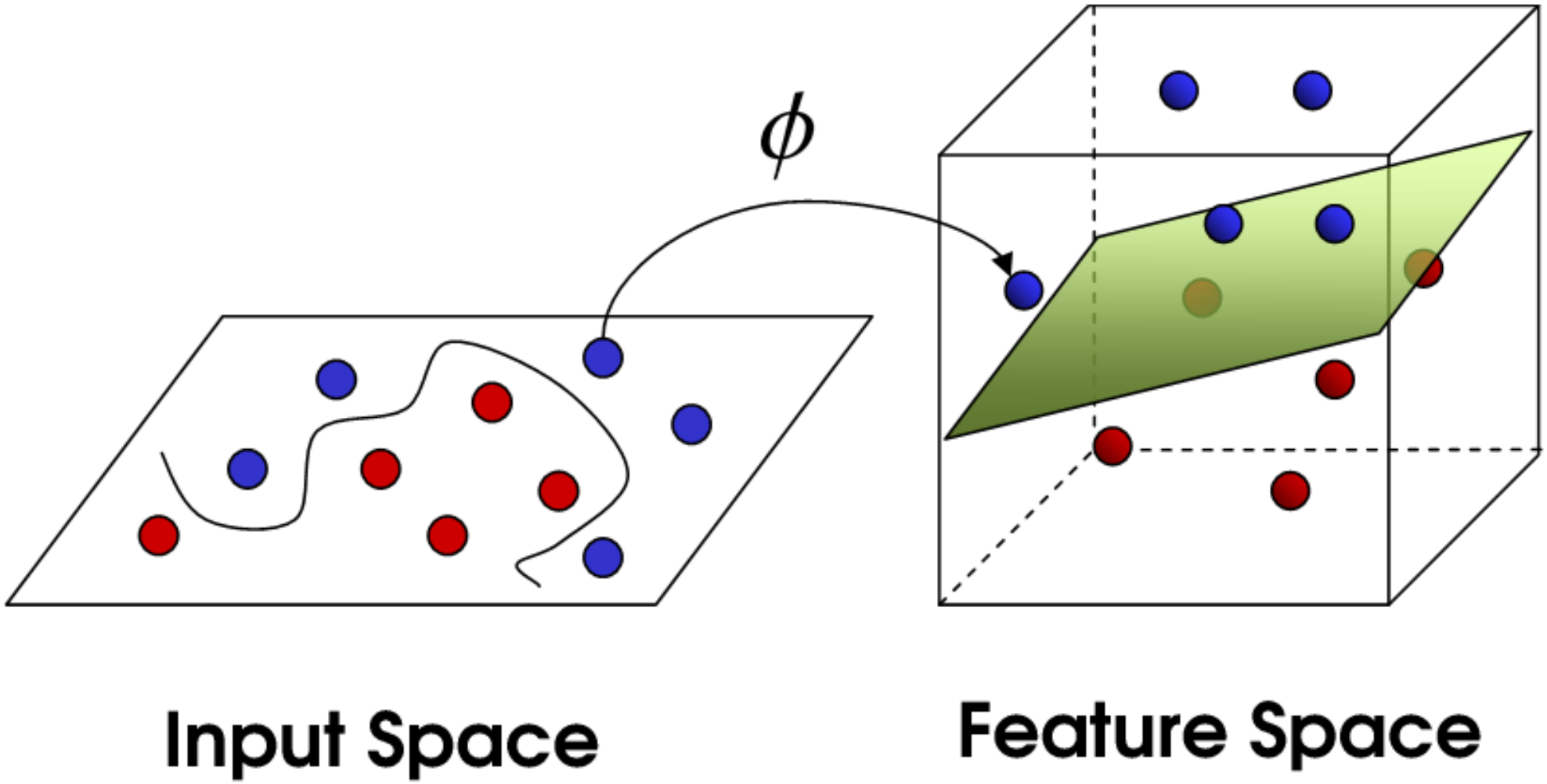
- for $0 < \xi \leq 1$ point is between margin and correct side of hyper-plane. This is a **margin violation**
- for $\xi > 1$ point is **misclassified**



http://www.robots.ox.ac.uk/~az/lectures/ml/lect2.pdf

SVMのおもしろい使い方

- カーネル・トリックを使うと「曲がった面」でデータを二分割できる
  - 非線形なモデルになる
- カーネル・トリックでは入力データの次元をわざと上げる
  - 入力データを特徴空間と呼ばれる高次元の空間へマッピングする
  - その高次元空間で内積が計算できれば、その空間でSVMを使える
    - 高次元空間では線形分離。もとの入力空間に戻すと、「曲がった面」で分離。
- 「曲がった面」が使えるので「より自由な」分類ができる
  - 過学習の話は？



https://datascience.stackexchange.com/questions/17536/kernel-trick-explanation

カーネル・トリック

- 元の入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ を、関数ϕで変換して、高次元のベクトル$\phi(\boldsymbol{x})$を得る
  - 変換した後のベクトル$\phi(\boldsymbol{x})$が属する空間を「特徴空間」と呼ぶ。
- 元の空間にあるどの2つのベクトル$\boldsymbol{x}$と$\boldsymbol{z}$についても、$\phi(\boldsymbol{x})$と$\phi(\boldsymbol{z})$との内積 $\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \langle \phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{z}) \rangle$のことをカーネルと呼ぶ
  - 関数ϕがどんな関数か分かっていれば、当然この計算はできる。
  - 関数ϕがどんな関数か分かっていなくても、$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$が内積になっていればよい。
- ベクトルに関する多くの演算は内積だけを使って表わしなおせる
  - よって、内積の代わりにカーネル関数を使えば、特徴空間で様々な演算がおこなえる。

カーネルの例

$$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = 2x_1x_2z_1z_2 + x_1^2z_1^2 + x_2^2z_2^2$$

これは、以下のように2つのベクトルの内積として書き直せる。

$$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = 2x_1x_2z_1z_2 + x_1^2z_1^2 + x_1^2z_2^2$$

$$= \left\langle \left(x_1^2, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2\right), \left(z_1^2, z_1^2, \sqrt{2}z_1z_2\right) \right\rangle$$

つまり、特徴空間への写像として$\phi(\boldsymbol{x}) = (x_1^2, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2)$というものを選べば、

$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$は特徴空間での内積になっている。だから、$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$はカーネルになっている。

（$\boldsymbol{x}$と$\boldsymbol{z}$の関数なら何でもカーネルになるわけではない。）

カーネルの何が嬉しいか？

$$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = 2x_1x_2z_1z_2 + x_1^2z_1^2 + x_1^2z_2^2$$

$$= \langle (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2), (z_1^2, z_2^2, \sqrt{2}z_1z_2) \rangle$$

$\phi(\boldsymbol{x})$を適当に決めれば、いくらでも上のようなカーネルは作れる。

しかし、空間の次元を上げるのと一緒に、計算量も増えてしまったら、あまり嬉しくない。

上のカーネル関数が嬉しいのは、計算の手間が元の空間での内積とほぼ同じだから。実際、

$$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \rangle^2$$

こういうカーネルをSVMなどでよく使う。

内積の便利さ

- ベクトルに対する多くの演算は内積さえ分かれば実行できる
  - ベクトルの長さ: $\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle}$
  - 二つのベクトル間の距離: $\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{z}\|^2 = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle - 2\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \rangle + \langle \boldsymbol{z}, \boldsymbol{z} \rangle$
  - 多くのベクトルの平均（重心）から特定のベクトルまでの距離
    - 多くのベクトルの平均（重心）自体は、それらのベクトルの内積では表わせない
  - 主成分分析
  - SVM
- 内積をカーネルで置き換えれば特徴空間での演算に変身する

例：RBFカーネル

$$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \exp(-\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{z}\|^2}{2\sigma^2})$$

元の空間にある2つのベクトル$\boldsymbol{x}$と$\boldsymbol{z}$を、ある関数ϕで特徴空間に移し、ベクトル$\phi(\boldsymbol{x})$と$\phi(\boldsymbol{z})$を得る。

$\phi(\boldsymbol{x})$と$\phi(\boldsymbol{z})$の内積が上の関数$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$に一致するような、そういう$\phi$があることを示せる。

つまり、上の関数はカーネルになっている。

このカーネルは、元の空間で2つのベクトルの距離を計算するのと同じ手間で計算できる。

今日の課題

- MNISTデータの0の画像と0以外の画像を分類しよう
- scikit-learnのパーセプトロンやSVMを使うこと
  - パーセプトロンでは、penaltyとCの設定を変更して検証データ上で評価
  - SVM（sklearn.svm.SVC）では、CとkernelIの設定を変更して検証データで評価
- テストデータを使った評価でロジスティック回帰と比較しよう

パーセプトロン

```
from sklearn import linear_model

clf = linear_model.Perceptron()
clf.fit(X_train, y_train)
```

SVM

```
from sklearn import svm

clf = svm.SVC()
clf.fit(X_train, y_train)
```

データを標準化する

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler


scaler = StandardScaler()
X_train = scaler.fit_transform(X_train)
X_valid = scaler.transform(X_valid)
X_test = scaler.transform(X_test)
```