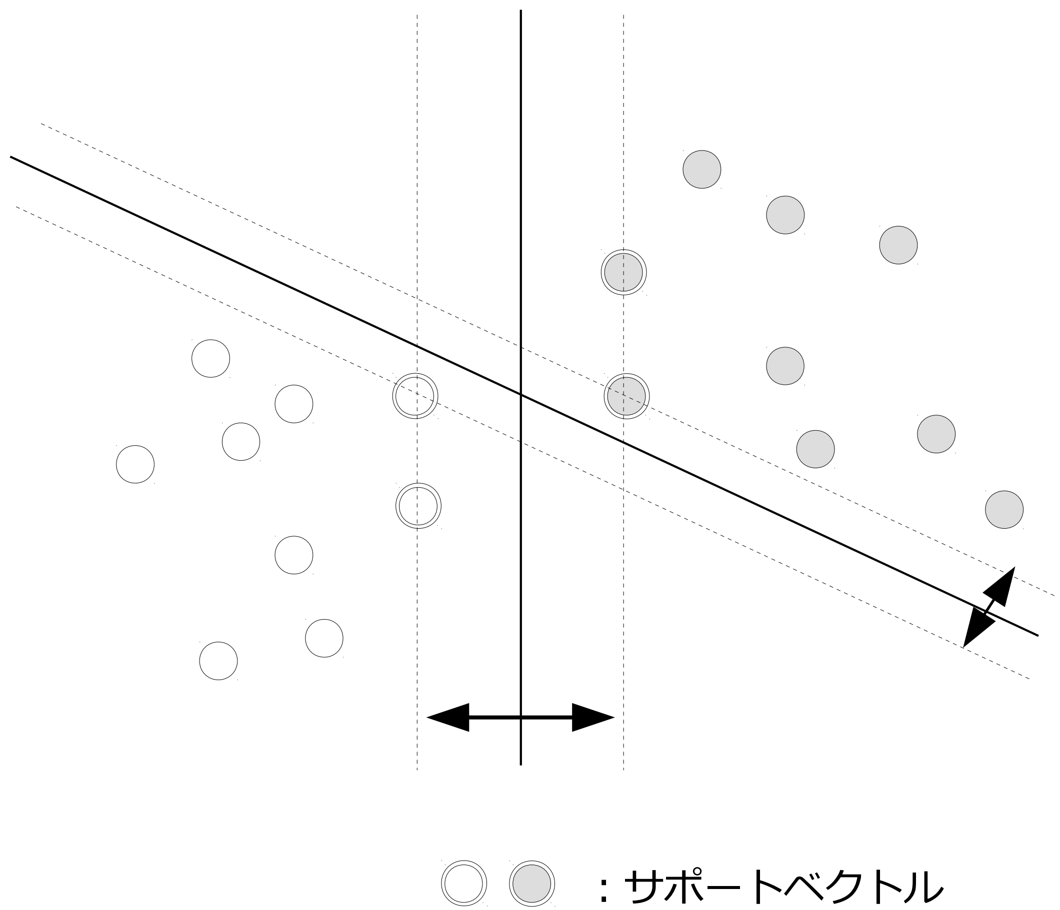
7. サポートベクトルマシン

7.1 サポートベクトルマシンとは

- マージンを最大化する識別面を求める

識別面と、最も近いデータとの距離



7.1.1 マージン最大化のための定式化

- 学習データ

$$\chi = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\} \quad i = 1, \ldots, N, \quad y_i = 1 \ or \ -1$$

- 識別面の式

$$\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_i + w_0 = 0$$

- 識別面の制約（係数を定数倍しても平面は不変）

$$\min_{i=1,\ldots,N} |\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_i + w_0| = 1$$

点と直線の距離の公式

$$r = \frac{|ax + by + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

- 学習パターンと超平面との最小距離

$$\min_{i=1,\ldots,N} \mathrm{Dist}(\boldsymbol{x}_i) = \min_{i=1,\ldots,N} \frac{|\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_i + w_0|}{||\boldsymbol{w}||} = \frac{1}{||\boldsymbol{w}||}$$

7.1.1 マージン最大化のための定式化

- 目的関数： $\min \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2$
- 制約条件： $y_i(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_i + w_0) \geq 1 \quad i = 1, \ldots, N$

7.1.2 マージンを最大とする識別面の計算

- 解法：ラグランジュの未定乗数法
  - 問題　$\min f(x) \quad s.t. \ g(x) = 0$
  - ラグランジュ関数　$L(x, \alpha) = f(x) + \alpha g(x)$
    - $\alpha \geq 0$
    - x, α で偏微分して 0 になる値が極値

7.1.2 マージンを最大とする識別面の計算

- 計算

$$L(\boldsymbol{w}, w_0, \alpha) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y_i (\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x} + w_0) - 1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_0} = 0 \quad \Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = 0 \quad \Rightarrow \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i$$

$$\Downarrow$$

$$L(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

α についての
2 次計画問題

7.1.2 マージンを最大とする識別面の計算

- 定数項の計算
  - 各クラスのサポートベクトルから求める

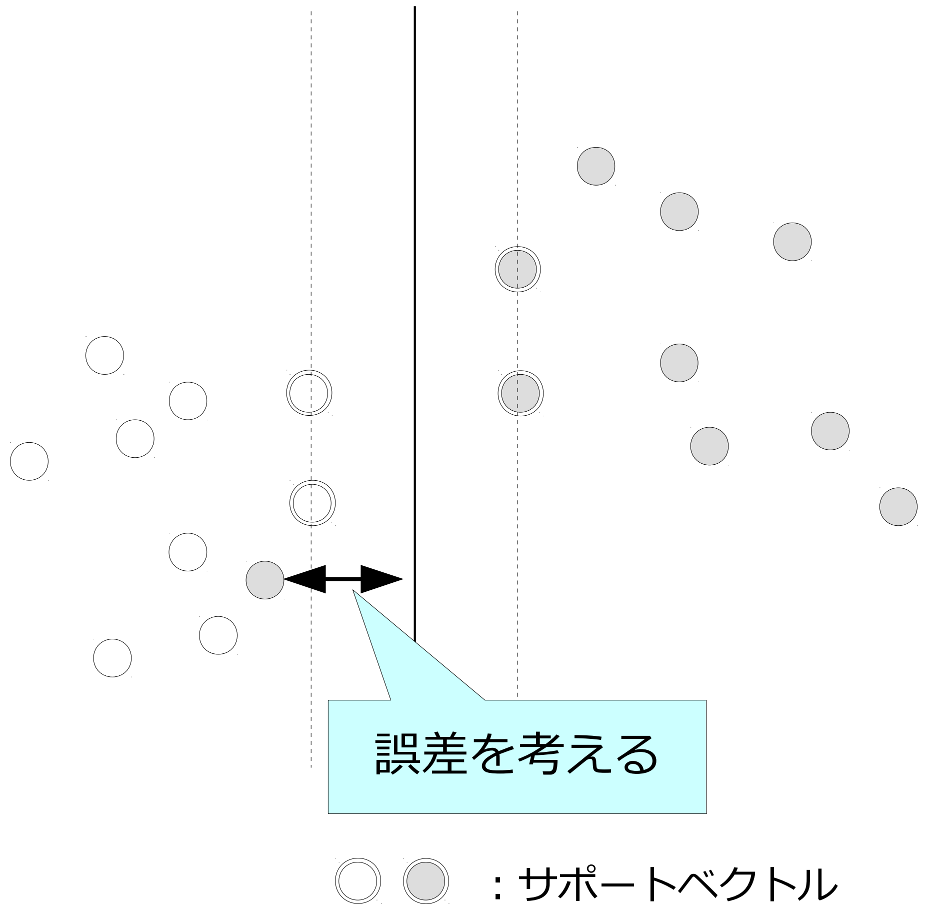
$$w_0 = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_{s1} + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_{s2})$$

- 識別関数

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + w_0 \\ &= \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}_i + w_0 \end{aligned}$$

7.2 ソフトマージンによる誤識別データの吸収

- 少量のデータが線形分離性を妨げている場合



7.2 ソフトマージンによる誤識別データの吸収

- スラック変数 ξ_i の導入

$$y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + w_0) \geq 1 - \xi_i \quad i = 1, \ldots, N$$

- 最小化問題の修正

$$\min(\frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i)$$

スラック変数も
小さい方がよい

- 計算結果
  - α_i の 2 次計画問題に $0 \leq \alpha_i \leq C$ が加わるだけ

7.2 ソフトマージンによる誤識別データの吸収

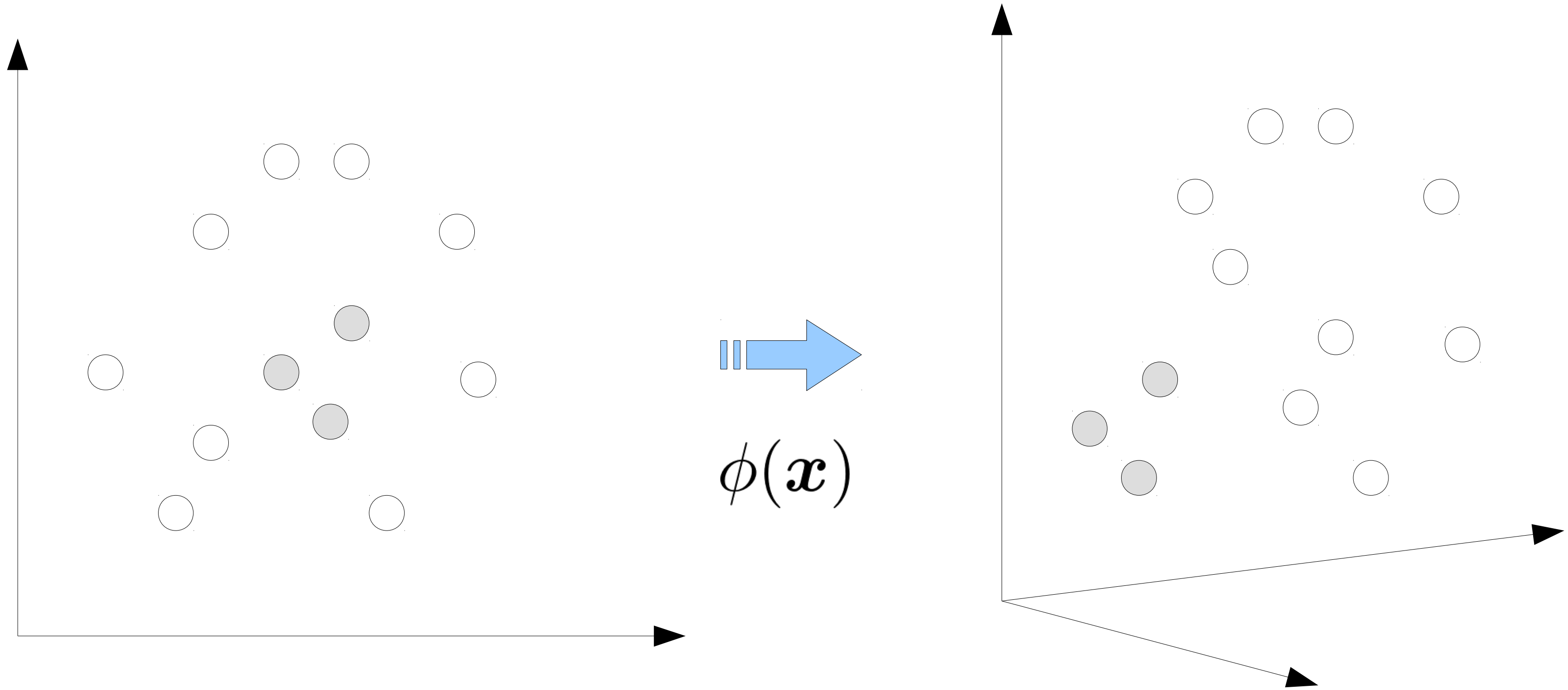
- C: エラー事例に対するペナルティ
  - 大きな値：誤識別データの影響が大きい

    → 複雑な識別面
  - 小さな値：誤識別データの影響が小さい

    → 単純な識別面

7.3 カーネル関数を用いた SVM

- 特徴ベクトルの次元を増やす



2 次元で線形分離不可能なデータ

線形分離可能な 3 次元へ

ただし、元の空間でのデータ間の
距離関係は保持するように

7.3 カーネル関数を用いた SVM

- 非線形変換関数： $\phi(\boldsymbol{x})$
- カーネル関数

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \phi(\boldsymbol{x})^T \phi(\boldsymbol{x}')$$

2 つの引数値の
近さを表す

  - 元の空間での距離が変換後の空間の内積に対応
  - $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{x}'$ が近ければ $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ は大きい値

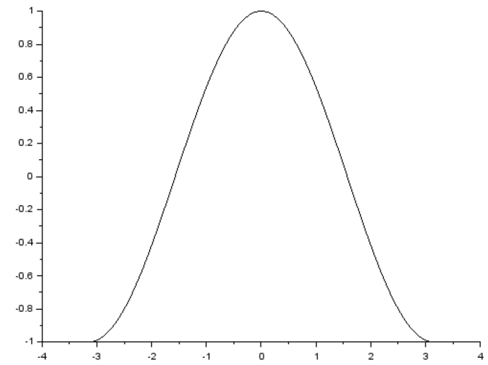
7.3 カーネル関数を用いた SVM

- カーネル関数の例（ scikit-learn の定義）
  - 線形　$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}'$
    - 元の特徴空間でマージン最大の平面
  - 多項式　$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}' + r)^d$
    - d 項の相関を加える
  - RBF　$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp(-\gamma||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'||^2)$
    - γ の値：大→複雑　小→単純な識別面
  - シグモイド　$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \tanh(\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}' + r)$
    - 距離に関する閾値関数的な振る舞い

7.3 カーネル関数を用いた SVM

- 多項式カーネルの解釈

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}' = ||\boldsymbol{x}|| \cdot ||\boldsymbol{x}'|| \cdot \cos\theta$$



$y = \cos(x)$

- 多項式カーネルの展開例

$$K(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = (\mathbf{x}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)} + 1)^2$$

$$= (x_1^{(i)}x_1^{(j)} + x_2^{(i)}x_2^{(j)} + 1)^2$$

$$= (x_1^{(i)}x_1^{(j)})^2 + (x_2^{(i)}x_2^{(j)})^2 + 2x_1^{(i)}x_1^{(j)}x_2^{(i)}x_2^{(j)} + 2x_1^{(i)}x_1^{(j)} + 2x_2^{(i)}x_2^{(j)} + 1$$

$$= ((x_1^{(i)})^2, (x_2^{(i)})^2, \sqrt{2}x_1^{(i)}x_2^{(i)}, \sqrt{2}x_1^{(i)}, \sqrt{2}x_2^{(i)}, 1)$$

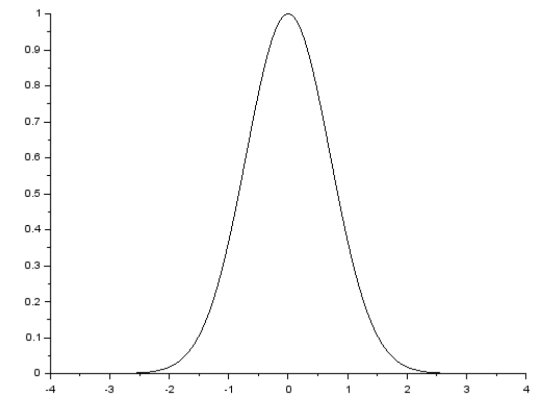
$$\cdot ((x_1^{(j)})^2, (x_2^{(j)})^2, \sqrt{2}x_1^{(j)}x_2^{(j)}, \sqrt{2}x_1^{(j)}, \sqrt{2}x_2^{(j)}, 1)$$

2 変数の相関を
表す項

7.3 カーネル関数を用いた SVM

- RBF カーネルの解釈

$$e^{-||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'||^2}$$



$y = \exp(-x^2)$

- RBF カーネルの展開
  - e^x のマクローリン展開

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

  - ガウシアンカーネルは無限級数の積で表されるので、無限次元ベクトルの内積と解釈できる

7.3 カーネル関数を用いた SVM

- 変換後の識別関数： $g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}) + w_0$
- SVM で求めた $\boldsymbol{w}$ の値を代入

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \phi(\boldsymbol{x})^T \phi(\boldsymbol{x}_i) + w_0 \\
&= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) + w_0
\end{aligned}
$$

非線形変換の
式は不要！！！

カーネルトリック

7.4 文書分類問題への SVM の適用

- SVM による発話タイプ分類
  - 例）「6 時にアラームをセット」
    - 形態素解析：「6 時　に　アラーム　を　セット」

(0, ..., 0, 1, 0, ..., 1, 0, 1, ...)

6 時　アラーム　セット

アラーム起動

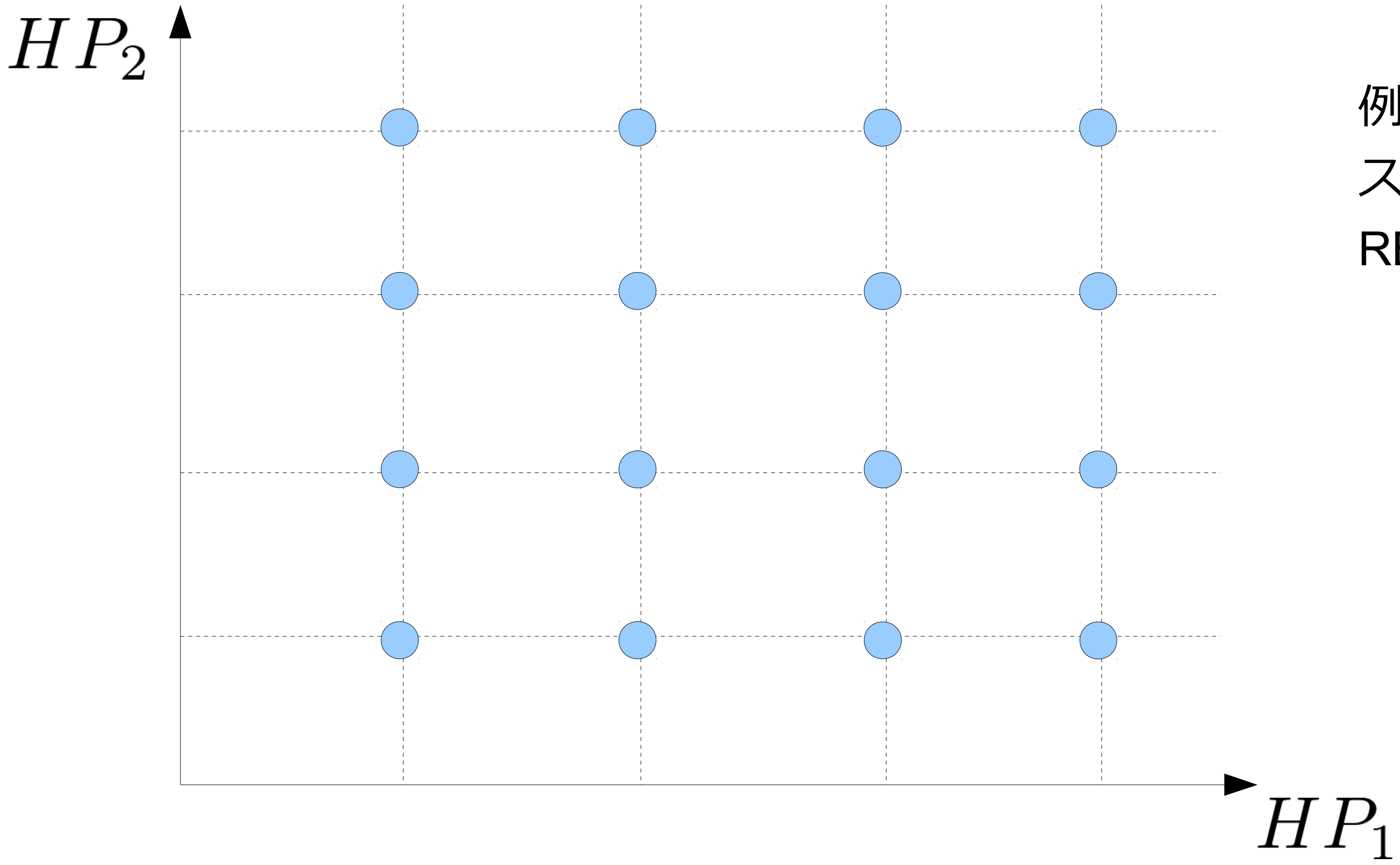
分類ラベル

単語の種類数
＝次元数

  - 高次元特徴に強い SVM を用いて識別器を学習
  - 多項式カーネルを用いると単語間の共起が相関として取れるので性能が上がることもある
  - ただし、元が高次元なのでむやみに次数を上げるのも危険

7.5 ハイパーパラメータのグリッドサーチ

- ハイパーパラメータが複数ある場合
  - グリッドサーチ：各格子点で検証データに対する誤り率を求める



例）
スラック変数の重み C
RBF カーネルの分散 γ