知的情報処理
09.サポートベクターマシン

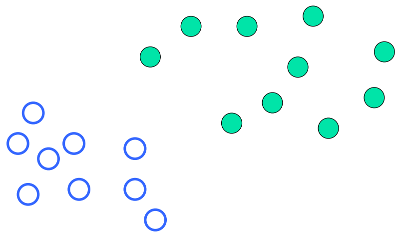
理工学部管理工学科
櫻井彰人

SVM の歴史

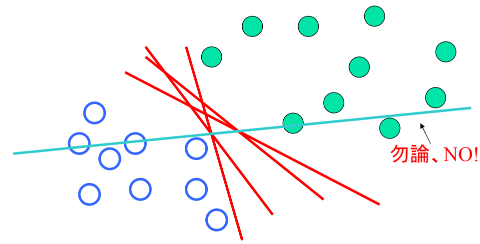
- SVM はVapnik の統計的学習理論から生まれた [3]
- SVM は1992のCOLTで発表された(Boser, Guyon and Vapnik)[1]
- SVM は素早く普及した。手書き数字認識の精度が高かった
  - SVMは1.1% のテスト誤り. これは、念入りに作ったニューラルネットワーク(LeNet 4)と同じくらいであった.
    - 参考: [2]のSection 5.11. [3]のdiscussion
- SVM は今では、カーネル法の代表的な例と見なされている
  - 注: カーネル(核関数, kernel)の意味はいくつもあるので、注意のこと

[1] B.E. Boser *et al.* A Training Algorithm for Optimal Margin Classifiers. Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory 5 144-152, Pittsburgh, 1992.
[2] L. Bottou *et al.* Comparison of classifier methods: a case study in handwritten digit recognition. Proceedings of the 12th IAPR International Conference on Pattern Recognition, vol. 2, pp. 77-82.
[3] V. Vapnik. The Nature of Statistical Learning Theory. 2nd edition, Springer, 1999.

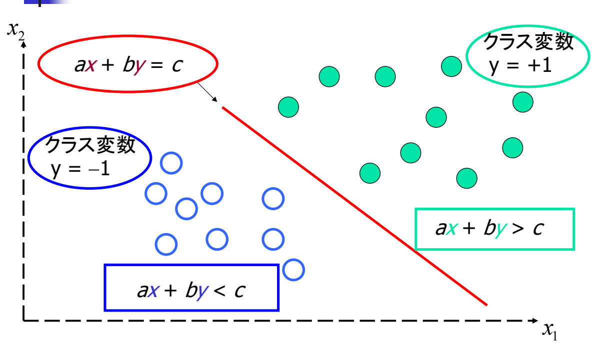
暫定的な仮定: 線形分離可能



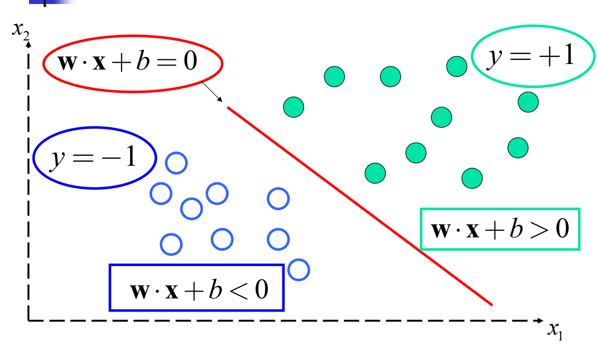
とはいえ、線形境界候補はたくさん



式で表すと

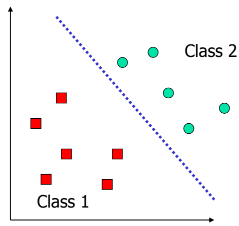


一般に



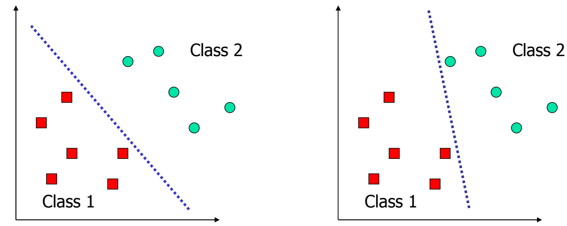
再: 決定境界候補は複数ある

- (簡単のために)分類クラスは2個、線形分離可能と仮定。
- 候補は多数(無限個)!
  - Perceptron学習アルゴリズムは、ある一つを見つける(初期値やデータの提示順序依存)
  - 他にもある
- どの候補も同様に良いのか?



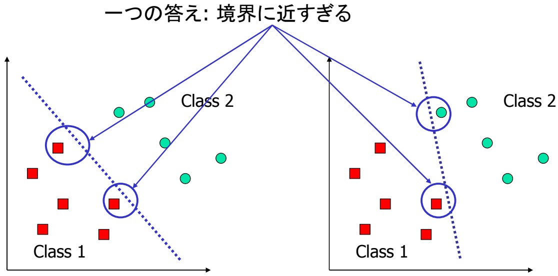
あまり芳しくない境界の例

- 「芳しくない」と考えるのは、何故だと思いますか？



あまり芳しくない境界の例

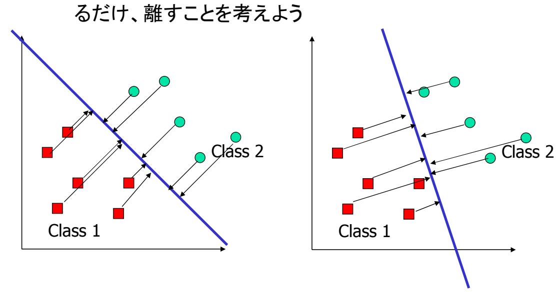
一つの答え: 境界に近すぎる



では、境界に近すぎると、なぜ、芳しくないのか？

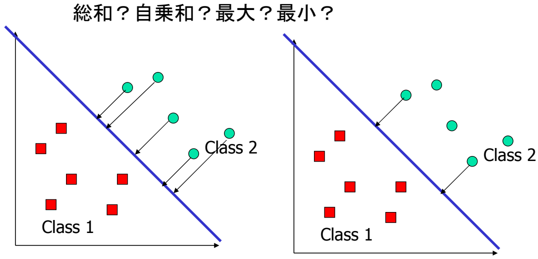
境界を離す

- 決定境界を、どちらのクラスの点からも(公平に！)、できるだけ、離すことを考えよう



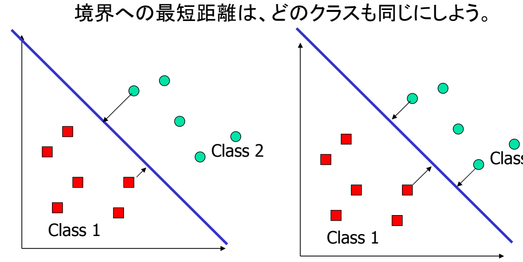
境界を離す: どの点について？

- 同じクラス内なら、どの点を優先するか？公平に？総和？自乗和？最大？最小？



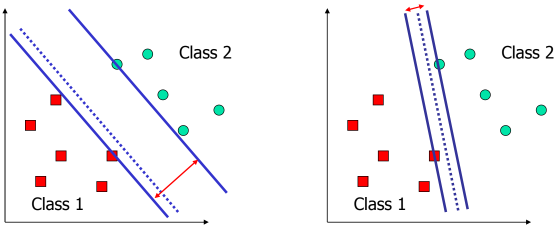
境界を離す: 最近接点について

- 同じクラス内の、境界に最も近い点を、できるだけ離そう。境界への最短距離は、どのクラスも同じにしよう。

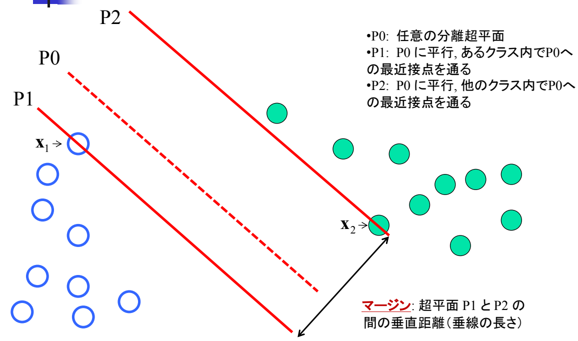


「マージン」の導入

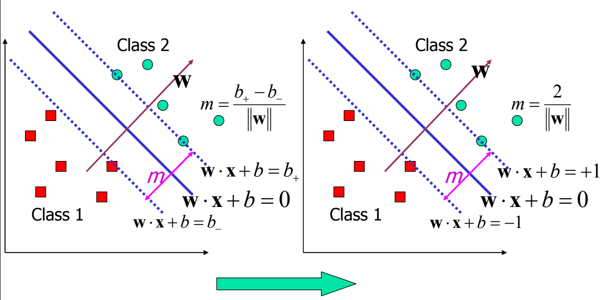
- マージン（大辞林）
  - (1)売買の差額金。利鞘(りざや)。
    (2)販売手数料。
    (3)本などの印刷部分を除く周辺の余白。
- 今回は、「余白」が近いでしょう



「マージン」の導入　その2



式で表すと



改めて記述すると

- 訓練データを $\{x_1, \ldots, x_n\}$, 各x_i のクラスラベルを $y_i \in \{1,-1\}$ とする
- ちょっと工夫すると、決定境界は全ての訓練データを正しく分類する　$\Leftrightarrow$　$\forall i \;\; y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) \geq 1$
- そうすると、欲しい決定境界は、次の制約付き最適化問題を解けば求まる

$$\text{Maximize } \frac{2}{\|\mathbf{w}\|} \quad \text{subject to } \forall i \;\; y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) \geq 1$$

$$\Rightarrow \quad \text{Minimize } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \quad \text{subject to } \forall i \;\; y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) \geq 1$$

- この解き方は、既に知っていますよね？

制約付き最適化問題の解法

- 目的: 制約 $g(\mathbf{x}) = 0$ のもと $f(\mathbf{x})$ を最小化する
- $\mathbf{x}_0$ が解である必要条件:

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(f(\mathbf{x}) + \alpha g(\mathbf{x}))\right|_{x=x_0} = 0 \\ g(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

- α: ラグランジュ乗数 Lagrange multiplier
- 制約が複数個 $g_i(\mathbf{x}) = 0$, i=1, …, m, のとき、ラグランジュ乗数 α_i は各制約ごとに必要

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left(f(\mathbf{x}) + \Sigma_{i=1}^m \alpha_i g_i(\mathbf{x})\right)\right|_{x=x_0} = 0 \\ g_i(\mathbf{x}) = 0 \qquad \text{for } i = 1, \ldots, m \end{cases}$$

制約付き最適化問題の解法

- 制約が不等式 $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ で表されるときも同様。ただし、ラグランジュ乗数 α_i は正である必要がある
- もし $\mathbf{x}_0$ が次の制約付き最適化問題の解であるなら

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad \text{subject to } g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad \text{for } i = 1, .., m$$

- $\mathbf{x}_0$ が次の式を満足するような $\alpha_i \geq 0$ (i=1, …, m) が存在する

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left(f(\mathbf{x}) + \Sigma_{i=1}^m \alpha_i g_i(\mathbf{x})\right)\right|_{x=x_0} = 0 \\ g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \qquad \text{for } i = 1, \ldots, m \end{cases}$$

- 関数　$f(\mathbf{x}) + \Sigma_i \alpha_i g_i(\mathbf{x})$　はラグランジュ関数と呼ばれる

元の問題は

$$\text{Minimize } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \quad \text{subject to } \forall i \;\; y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) \ge 1$$

$$\rightarrow \quad \text{Minimize } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \quad \text{subject to } \forall i \;\; 1 - y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) \le 0$$

- ラグランジュ関数は

$$L(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\mathbf{w}\cdot\mathbf{w} + \sum_i \alpha_i \left(1 - y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b)\right)$$

- 微分を 0 とおくと

$$\frac{\partial L(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w} - \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad \frac{\partial L(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha})}{\partial b} = \sum_i \alpha_i y_i$$

$$\mathbf{w} = \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad 0 = \sum_i \alpha_i y_i$$

双対問題

- ラグランジュ関数に $\mathbf{w} = \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$ を代入すれば

$$\begin{aligned}
L(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) &= \frac{1}{2}\mathbf{w}\cdot\mathbf{w} + \sum_i \alpha_i \left(1 - y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b)\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i\right)\cdot\left(\sum_j \alpha_j y_j \mathbf{x}_j\right) + \sum_i \alpha_i \left(1 - y_i\left(\sum_j \alpha_j y_j \mathbf{x}_j \cdot \mathbf{x}_i + b\right)\right) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j + \sum_i \alpha_i - \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j - b\sum_i \alpha_i y_i \\
&= \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j
\end{aligned}$$

  - ただし、$\sum_i \alpha_i y_i = 0$ を用いた

これは学習データである

- これは α_i だけの関数である

双対問題

- 新しい目的関数は、α_i だけに関するものである
- 相補問題である: **w**が分かれば α_i が分かる; α_i が分かれば**w**が分かる
- 元の問題は主問題と呼ばれる
- 双対問題の目的関数は、最大化する
- 従って、双対問題は:

$$\text{Maximize } W(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j$$

$$\text{subject to } \alpha_i \ge 0, \qquad \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

ラグランジュ乗数を導入したときの α_i の性質

ラグランジュ関数を b に関して微分して（0とおいて）得た条件

双対問題

$$\text{Maximize } W(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j$$

$$\text{subject to } \alpha_i \ge 0, \qquad \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

- これは2次計画問題(QP; quadratic programming)
  - α_i の大域的最適値を求めることが常に可能
- **w** は $\mathbf{w} = \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$ から求まる

解の性質

- α_i の多くはゼロ
  - **w** は「少数の」データ点の線形結合
  - このようなスパースな表現は、k-nn と同様に、データ圧縮とみなすことが可能である。
- **非零の** α_i に対応する$\mathbf{x}_i$ は support vectors (SV) と呼ばれる
  - 決定境界は SV のみによって決まる
  - t_j (j=1, ..., s) を s 個の SV の添え字とする. そうすると

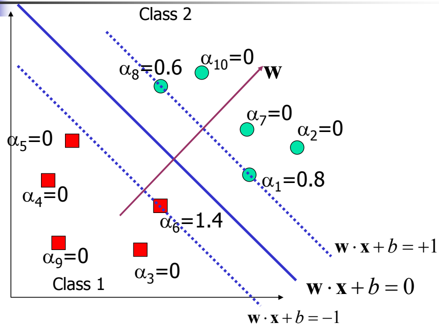
$$\mathbf{w} = \sum_{j=1}^{s} \alpha_{t_j} y_{t_j} \mathbf{x}_{t_j}$$

- 未知のデータ **z** に対して
  - $\mathbf{w}\cdot\mathbf{z} + b = \sum_{j=1}^{s} \alpha_{t_j} y_{t_j} (\mathbf{x}_{t_j} \cdot \mathbf{z}) + b$ を計算し、結果が負ならばクラス1とし、そうでなければクラス2とする
  - 注: **w** を明示的に構成する必要はない

2次計画

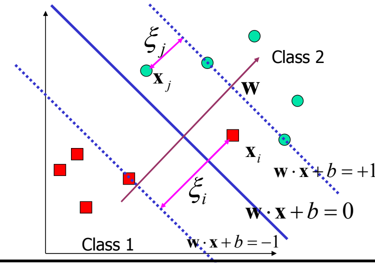
- 多くの手法が提案されている
- その多くは内点法に属する
  - 制約を満たしていないかもしれない、初期点から開始する
  - 解（候補）を、目的関数を最適化方向に進めたり、満たしていない制約の個数を減らしたりしながら、改善していく
- SVM については SMO (sequential minimal optimization) が良く知られている（他にもいろいろ）
  - 2変数の QP はトリビアル
  - SMO の繰り返しでは一対の (α_i,α_j) を取り、当該 QP をこの二変数について解く. この過程を収束するまで繰り返す
- 実際には, QP 解法プログラムをブラックボックスと考え、どう解かれているかは考えないことが多い

幾何的解釈



線形分離可能でないとき

- 分類において「誤り」ξ_i を認めよう; 当該誤り値は決定関数 $\mathbf{w}^T\mathbf{x}+b$ の出力値に基づく
- ξ_i は分類を誤った事例の個数の近似となる



ソフトマージン

- $\sum_i\xi_i$, が最小化されれば, ξ_i は:

$$\begin{cases} \mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i+b\geq 1-\xi_i & \text{if } y_i=1 \\ \mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i+b\leq -1+\xi_i & \text{if } y_i=-1 \\ \xi_i\geq 0 & \forall i \end{cases}$$

  - ξ_i はスラック変数である
  - $\mathbf{x}_i$ であれば $\xi_i=0$ である
  - ξ_i は分類誤りの上界である
- 最小化するのは $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2+C\sum_{i=1}^n\xi_i$
  - C: 誤りとマージンのトレードオフを表すパラメータ
- 最適化問題

$$\text{Minimize } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2+C\sum_{i=1}^n\xi_i$$
$$\text{subject to } \forall i \;\; y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i+b)\geq 1-\xi_i, \quad \xi_i\geq 0$$

主問題のラグランジアンは

$$L(\mathbf{w},b,\boldsymbol{\alpha})=\frac{1}{2}\mathbf{w}\cdot\mathbf{w}+C\sum_i\xi_i+\sum_i\alpha_i\big((1-\xi_i)-y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i+b)\big)-\sum_i\nu_i\xi_i$$

従って、

$$\frac{\partial L(\mathbf{w},b,\boldsymbol{\alpha})}{\partial\mathbf{w}}=\mathbf{w}-\sum_i\alpha_i y_i\mathbf{x}_i \qquad \frac{\partial L(\mathbf{w},b,\boldsymbol{\alpha})}{\partial b}=\sum_i\alpha_i y_i \qquad \frac{\partial L(\mathbf{w},b,\boldsymbol{\alpha})}{\partial\xi_i}=C-\alpha_i-\nu_i$$

となるゆえ、停留点は、

$$\mathbf{w}=\sum_i\alpha_i y_i\mathbf{x}_i \qquad 0=\sum_i\alpha_i y_i \qquad 0=C-\alpha_i-\nu_i$$

これらを主問題に戻せば

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

ただし、条件は、

$$0=\sum_i\alpha_i y_i \qquad 0\leq\alpha_i\leq C \;\; (\text{for all } i)$$

最適化問題

- この制約付き最適化問題の双対問題は

$$\text{Maximize } W(\boldsymbol{\alpha})=\sum_i\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\mathbf{x}_i\cdot\mathbf{x}_j$$
$$\text{subject to } C\geq\alpha_i\geq 0, \qquad \sum_i\alpha_i y_i=0$$

- **w** は $\mathbf{w}=\sum_{j=1}^{s}\alpha_{t_j}y_{t_j}\mathbf{x}_{t_j}$
- これは、線形分離可能な場合とそっくりである。違いは、各α_i に C という上限があることである
- 同様に、QP solver 用いて解く

線形 SVM: まとめ

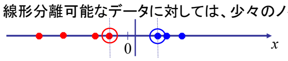
- 分類器は、分離超平面 *separating hyperplane.*
- 最も重要な訓練データ点がサポートベクターとなる; それが当該超平面を決める.
- 2次計画問題を解けば、どの点 $\mathbf{x}_i$ がサポートベクターで非零のラグランジュ乗数 α_i に対応するかが分かる.
- 当該問題の双対問題においても解法においても、訓練データ点は、内積の中にしか現れない:

次のような $\alpha_1\ldots\alpha_N$ を見出せ:
最大化: $\mathbf{Q}(\boldsymbol{\alpha})=\Sigma\,\alpha_i-½\,\Sigma\,\Sigma\,\alpha_i\alpha_j y_i y_j\boxed{\mathbf{x_i}^T\mathbf{x_j}}$,
但し
(1) $\Sigma\,\alpha_i y_i=0$
(2) すべての α_i につき: $0\leq\alpha_i\leq C$

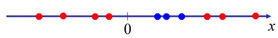
$$f(\mathbf{x})=\Sigma\,\alpha_i y_i\boxed{\mathbf{x_i}^T\mathbf{x}}+b$$

非線形 SVM

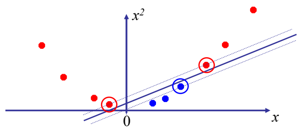
- 線形分離可能なデータに対しては、少々のノイズがあっても、うまくいく:



- しかし、データ集合が線形分離可能でなかったらどうしよう?

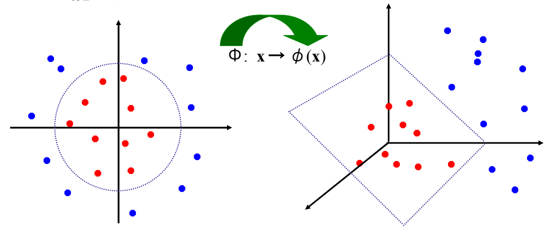


- 例えば… データをより高次元の空間に写像したらどうだろうか:



非線形 SVM: 特徴空間

- 一般的なアイデア: もともとの特徴空間は、いつでも、ある高次元特徴空間に写像すれば、線形分離可能となる:



カーネルトリック "Kernel Trick"

- 線形分類器が依拠していたのは、ベクター間の内積 $K(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j})=\mathbf{x_i}^T\mathbf{x_j}$
- もし各点を高次元空間に、変換 Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \phi(\mathbf{x})$ を用いて写像すると, その高次元空間内での内積は:

$$K(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j})= \phi(\mathbf{x_i})^T\phi(\mathbf{x_j})$$

- **カーネル関数**は、変換後の内積の値が、変換前の内積の関数となるようなもの.
  - そうなると、計算が楽(計算量が少ない)
- 例:

  2-次元ベクトル $\mathbf{x}=[x_1\ \ x_2]$ に対し $K(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j})=(1 + \mathbf{x_i}^T\mathbf{x_j})^2$, とおく

  このとき、次の式が成立する $K(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j})= \phi(\mathbf{x_i})^T\phi(\mathbf{x_j})$:

  $K(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j})=(1 + \mathbf{x_i}^T\mathbf{x_j})^2 = 1+ x_{i1}^2x_{j1}^2 + 2\, x_{i1}x_{j1}\, x_{i2}x_{j2}+ x_{i2}^2x_{j2}^2 + 2x_{i1}x_{j1} + 2x_{i2}x_{j2}=$

  $= [1\ \ x_{i1}^2\ \ \sqrt{2}\, x_{i1}x_{i2}\ \ x_{i2}^2\ \ \sqrt{2}x_{i1}\ \ \sqrt{2}x_{i2}]^T [1\ \ x_{j1}^2\ \ \sqrt{2}\, x_{j1}x_{j2}\ \ x_{j2}^2\ \ \sqrt{2}x_{j1}\ \ \sqrt{2}x_{j2}]$

  $= \phi(\mathbf{x_i})^T\phi(\mathbf{x_j})$ ただし $\phi(\mathbf{x}) = [1\ \ x_1^2\ \ \sqrt{2}\, x_1x_2\ \ x_2^2\ \ \sqrt{2}x_1\ \ \sqrt{2}x_2]$

カーネル関数

- なぜカーネルを用いるか?
  - 分離可能でないものを分離可能にする.
  - データをより適切な表現空間に写像する
- よく使われるカーネル
  - 線形
  - 多項式 **$K(x,z) = (1+x^Tz)^d$**
  - RBF Radial basis function

$$K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = e^{-\|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\|^2/2\sigma^2}$$

まとめ

- サポートベクターマシン (SVM) は
  - サポートベクターに基づいて超平面を決める
    - Support vector = 判定境界付近のクリティカルな点
  - 線形 SVM は線形分類器.
  - カーネル: 高次元へ写像するが、その内積は低次元の内積で簡単に計算できる
  - リスクの上界 (リスク = テストデータでの期待誤り)
  - (邪魔な属性が多いときの)分類器としてベスト?
    - 数1000も属性があるときは、安定的に強い
  - ポピュラー: SVMlight がきっかけ?
    - 速くて無料 (研究目的には)
    - 他にもいくつか: TinySVM, libsvm, ….