

抑制型カーネル標本空間射影法 によるパターン認識

2004/3/18

東京工業大学 理工学研究科
鷺沢 嘉一, 山下 幸彦



目的と内容

■ 抑制型カーネル標本空間射影 (SKSP)法の提案

- Suppressed Kernel Sample space Projection Method
- カーネル法による識別器
- カーネル標本空間射影 (KSP)法★の拡張
 - 他クラスの抑制
 - 正則化

■ 計算機実験

■ 他手法との比較

★ 鷲沢嘉一，山下幸彦，“カーネル標本空間射影法によるパターン認識，”第6回情報論的学習理論ワークショップ IBIS2003 予稿集

カーネル法

- SVM , PCA (部分空間法), $Fisher Discriminant$ などに適用
- N 次元入力空間 \mathbb{R}^N から高次元の 特徴空間 \mathcal{F} へ非線形写像 $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathcal{F}, x \mapsto \Phi(x)$
 - 高次相関の利用, クラス間の重なりへの低減
- カーネル関数 $k(x, y) = \langle \Phi(x), \Phi(y) \rangle$
 - Mercerカーネル, 再生核 Hilbert 空間
 - $\Phi : x \mapsto k(\cdot, x),$
 - $k(x, y) = \langle k(\cdot, x), k(\cdot, y) \rangle = \langle \Phi(x), \Phi(y) \rangle$

Mercerカーネルの例

■ *Linear*

$$k(x, y) = \langle x, y \rangle$$

■ *Polynomial*

$$k(x, y) = (\langle x, y \rangle + 1)^d$$

■ *Gaussian*

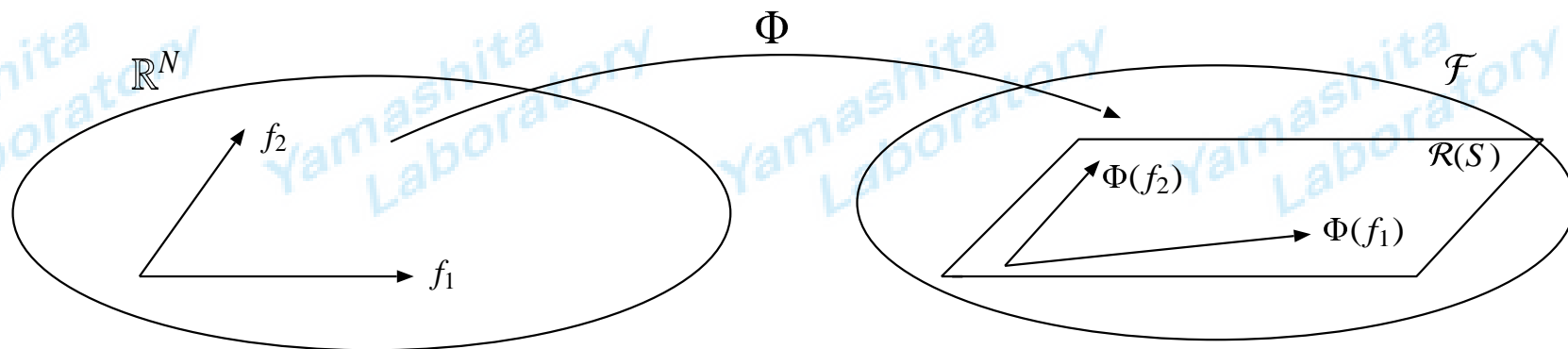
$$k(x, y) = \exp\left(\frac{-\|x-y\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

カーネル標本空間

–Kernel Sample Space–

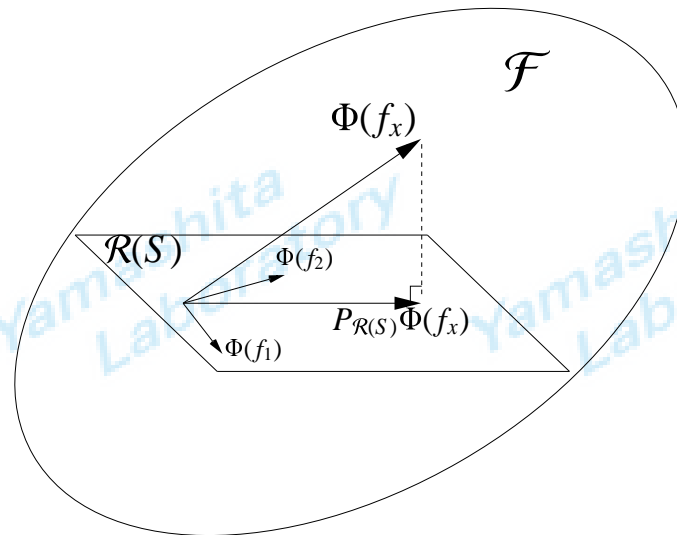
- クラス i のサンプル $f_1^i, f_2^i, \dots, f_{L_i}^i$ が Φ によって写像されたあとに特徴空間で張る部分空間
- *Gaussian* カーネルでは同じサンプルがない限りサンプルは特徴空間ですべて 1 次独立

$S_i = [\Phi(f_1^i) \ \Phi(f_2^i) \ \dots \ \Phi(f_{L_i}^i)]$ と置くと
 $\mathcal{R}(S_i)$ がクラス i のカーネル標本空間



カーネル標本空間射影(KSP)法1

- クラスごとに異なる特徴を持つサンプルは、偏ったカーネル標本空間を張る。
- 未知の入力 f_x とクラス i の類似度を $\Phi(f_x)$ のクラス i のカーネル標本空間への射影ノルムで測る。
- f_x をカーネル標本空間への射影ノルムが最大となるクラスへ決定する。



カーネル標本空間射影(KSP)法2

- カーネルグラム行列:

$$K_{S_i} = S_i^* S_i = \begin{bmatrix} k(f_1^i, f_1^i) & \cdots & k(f_1^i, f_{L_i}^i) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ k(f_{L_i}^i, f_1^i) & \cdots & k(f_{L_i}^i, f_{L_i}^i) \end{bmatrix}$$

- $h_i(x) = S_i^* \Phi(x) = (k(f_1^i, x), k(f_2^i, x), \dots, k(f_{L_i}^i, x))^T$

- $\mathcal{R}(S_i)$ への正射影作用素:

$$P_{\mathcal{R}(S_i)} = S_i K_{S_i}^\dagger S_i^*$$

- 未知の入力 f_x の正射影ノルム:

$$\|P_{\mathcal{R}(S_i)} \Phi(f_x)\|^2 = \langle h_i(f_x), K_{S_i}^\dagger h_i(f_x) \rangle$$

- 識別規則:

$$\|P_{\mathcal{R}(S_i)} \Phi(f_x)\|^2 > \|P_{\mathcal{R}(S_j)} \Phi(f_x)\|^2 \quad \forall j \neq i \Rightarrow f_x \in \Omega_i$$

カーネル標本空間射影(KSP)法3

- $P_{\mathcal{R}(S_i)}$ は以下の評価基準を最小にする .

$$\min : J[X_i] = \frac{1}{L_i} \sum_{s=1}^{L_i} \|\Phi(f_s^i) - X_i \Phi(f_s^i)\|^2$$

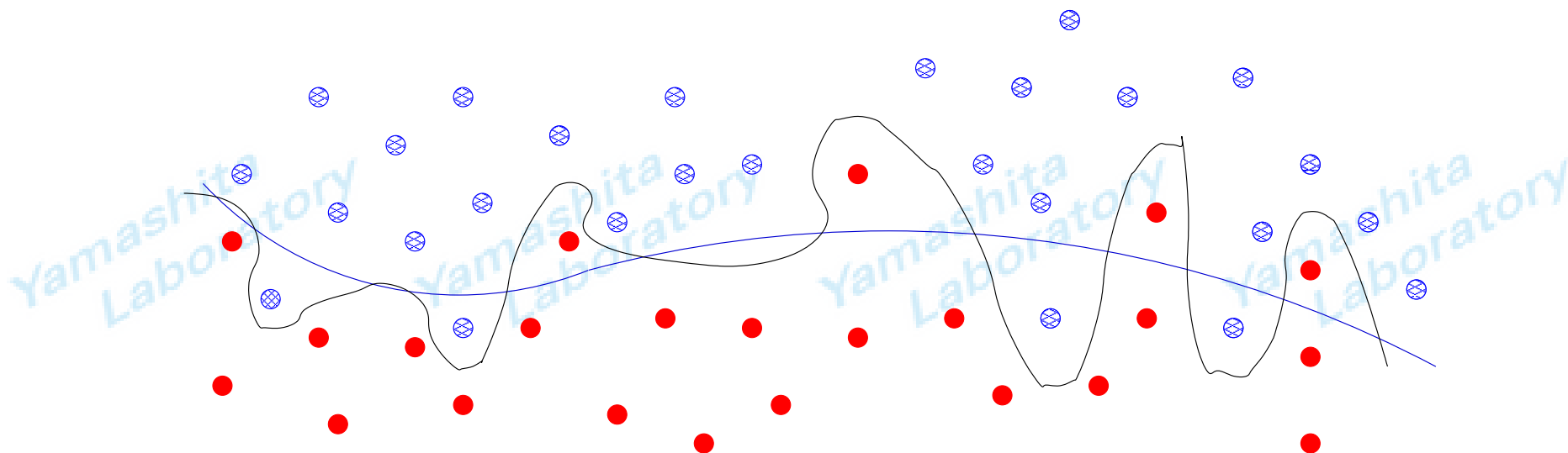
subject to : $\mathcal{N}(X_i) \supset \mathcal{R}(S_i)^\perp$

- 拡張にはこの評価基準を用いる .

Over fitting

- ノイズ，外れ値の混入
- 識別境界の複雑さとサンプルに対するエラー
- 汎化能力
- 誤差の拡大率 $\Delta = \frac{(d(f_x + \delta f_x) - d(f_x)) / d(f_x)}{\|\delta f_x\| / \|f_x\|} = \frac{d(f_x + \delta f_x) - d(f_x)}{\|\delta f_x\|} \cdot \frac{\|f_x\|}{d(f_x)}$

d : 識別関数， f_x : 未知の入力， δf_x : f_x の微小変化



正則化カーネル標本空間射影法 Tikhonov 近似

- 誤差の拡大率の最大値-作用素ノルム

$$\|A\| = \sup_{f \neq 0} \frac{\|Af\|}{\|f\|}$$

- $\|A\| \leq \|A\|_2$, $\|A\|_2 = \sqrt{\text{tr}(A^*A)}$: Frobenius ノルム

正則化カーネル標本空間射影法

$$\min : J[X_i] = \frac{1}{L_i} \sum_{s=1}^{L_i} \|\Phi(f_s^i) - X_i \Phi(f_s^i)\|^2 + \epsilon \|X_i\|_2^2$$

$$\text{subject to : } \mathcal{N}(X_i) \supset \mathcal{R}(S_i)^\perp$$

$\epsilon > 0$: 正則化パラメータ

解

$$\tilde{P}_{\mathcal{R}(S_i)} = S_i (K_{S_i} + \epsilon L_i I)^{-1} S_i^*$$

追加学習

- KSP の設計には (MP 一般) 逆行列の計算が必要.
- (正則化) KSP では追加学習を簡単に行うことができる.

$$S_L = [\Phi(f_1) \ \Phi(f_2) \ \dots \ \Phi(f_L)]$$

$$S_{L+1} = [\Phi(f_1) \ \Phi(f_2) \ \dots \ \Phi(f_L) \ \Phi(f_{L+1})]$$

$$K_L = S_L^* S_L$$

$$K_{L+1} = S_{L+1}^* S_{L+1}$$

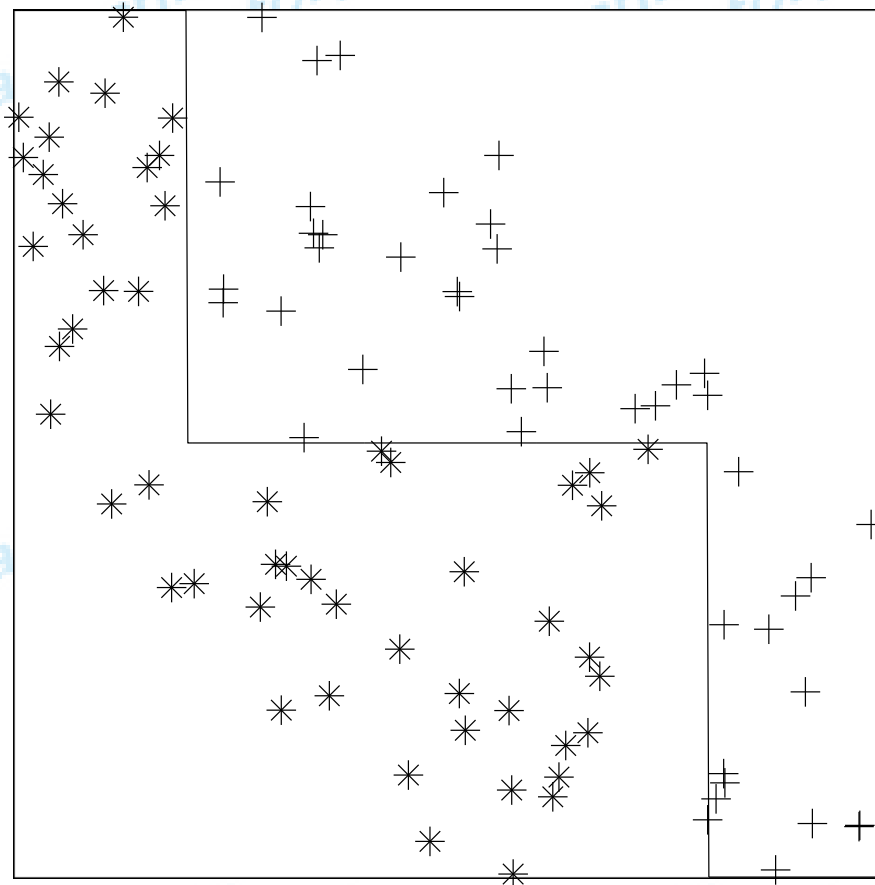
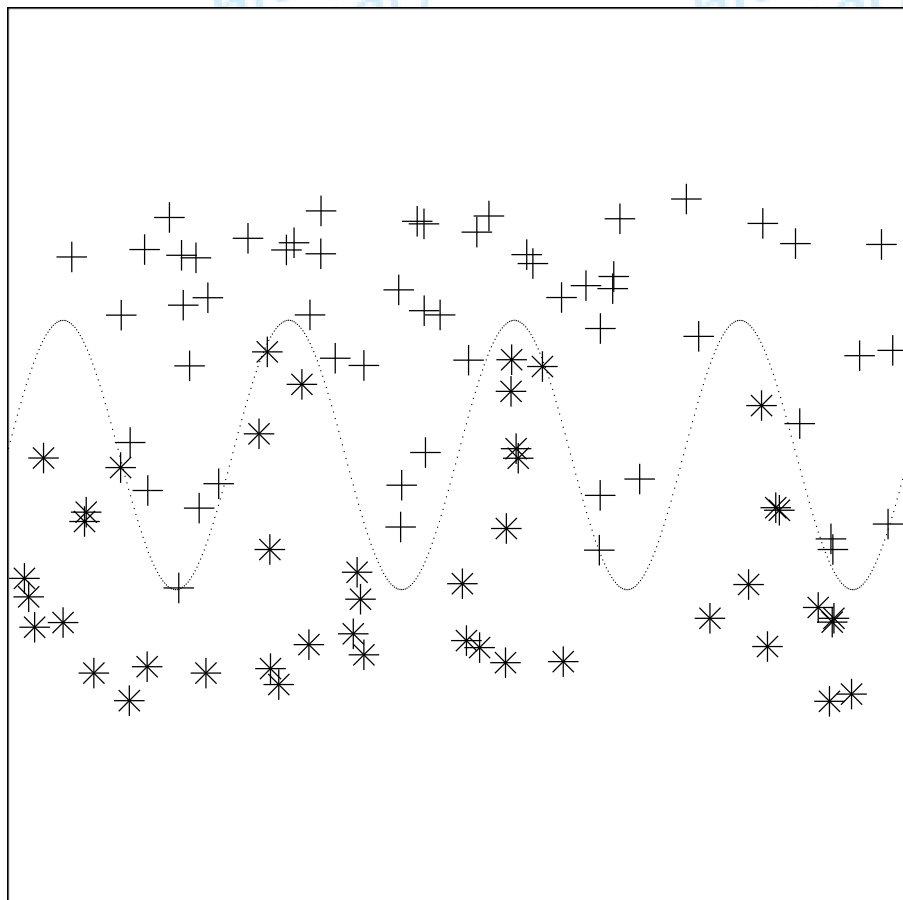
と置くと

$$K_{L+1}^\dagger = \begin{bmatrix} K_L^\dagger & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^\top & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\tau} t t^\top$$

$$t = \begin{bmatrix} K_L^\dagger h(f_{L+1}) \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\tau = k(f_{L+1}, f_{L+1}) - \langle h(f_{L+1}), t \rangle$$

Toy example



Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

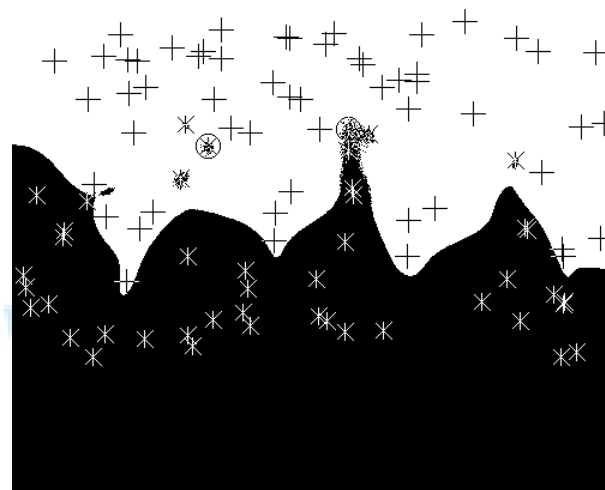
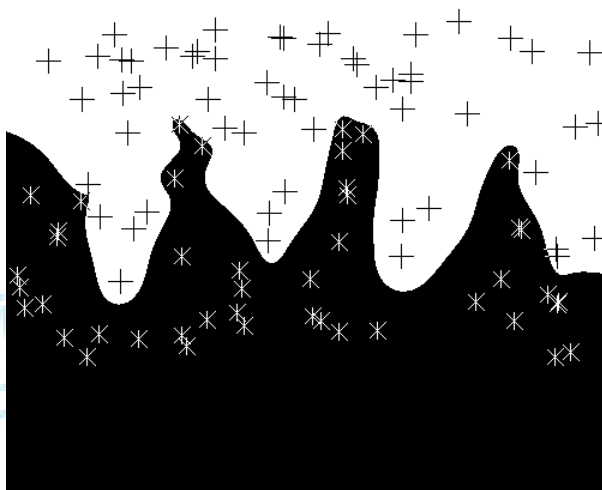
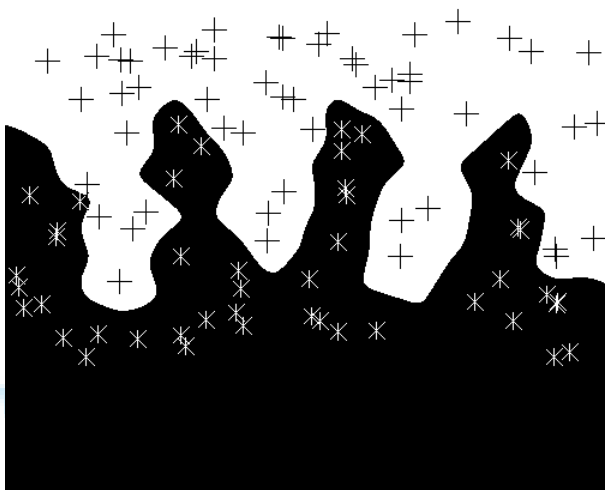
Toy example 1

$\sigma = 20$

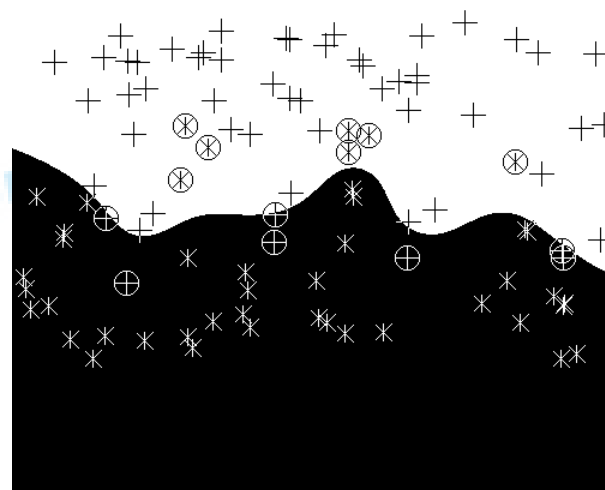
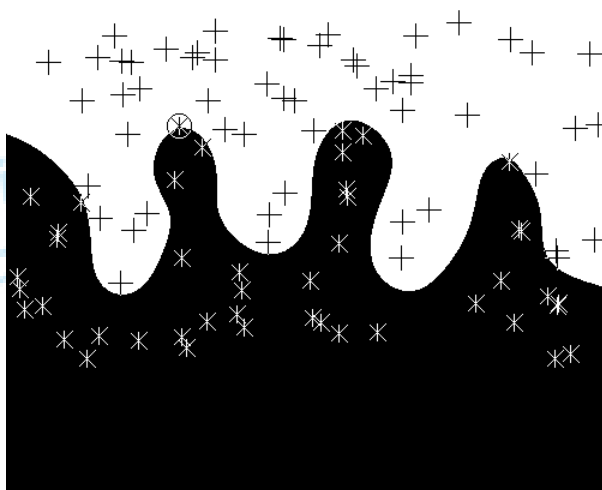
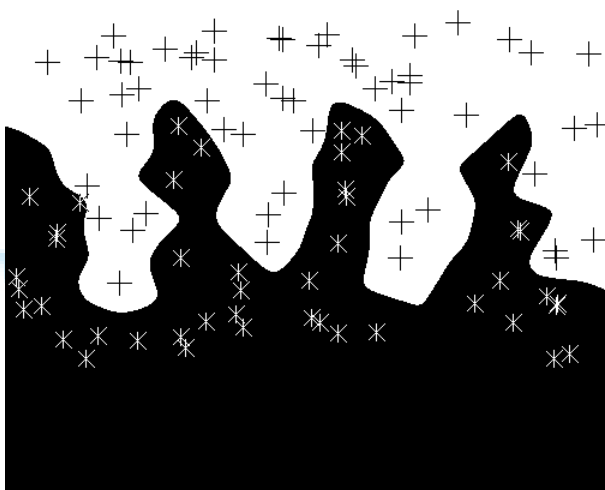
$\sigma = 50$

$\sigma = 100$

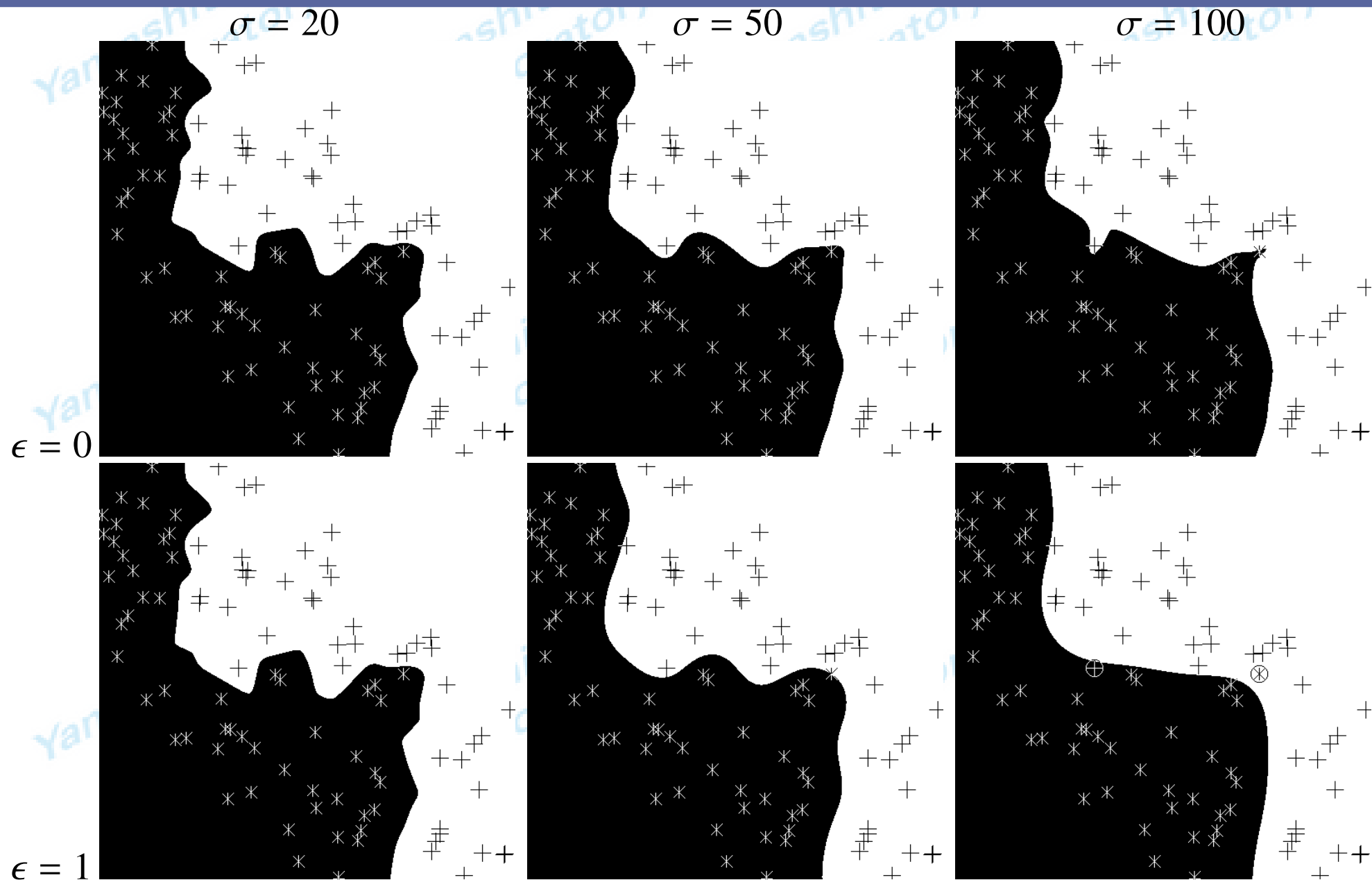
$\epsilon = 0$



$\epsilon = 1$



Toy example2



抑制型カーネル標本空間射影 (SKSP) 法

- **KSP法は1クラス識別器**
 - 複数のクラスに同じ様な特徴が存在するときは取り出さない方がよい。
 - **KSP法に他クラスの特徴の抑制を追加**
- ## 抑制型カーネル標本空間射影 (SKSP) 法

$$\begin{aligned} \min_X : J[X_i] &= \frac{1}{L_i} \sum_{s=1}^{L_i} \|\Phi(f_s^i) - X_i \Phi(f_s^i)\|^2 + \frac{1}{M_i} \sum_{t=1}^{M_i} \|X_i \Phi(g_t^i)\|^2 \\ \text{s.t.} : \mathcal{N}(X_i) &\supset \mathcal{R}(U_i)^\perp \end{aligned}$$

$g_1^i, g_2^i, \dots, g_{M_i}^i$: 他クラスのサンプル

$$T_i = [\Phi(g_1^i) \ \dots \ \Phi(g_{M_i}^i)]$$

$$U_i = [S_i \ T_i]$$

SKSP法の解と性質

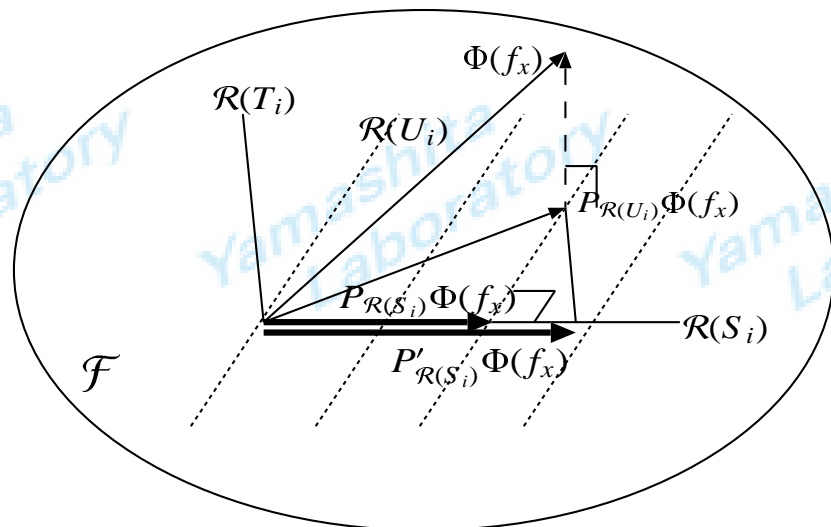
$K_{U_i} = U_i^* U_i$: 全クラスのカーネルグラム行列

$$D_i = \begin{bmatrix} I_{L_i} & \mathbf{0}_{L_i M_i} \\ \mathbf{0}_{M_i L_i} & \mathbf{0}_{M_i M_i} \end{bmatrix}$$

とおく。 K_{U_i} が正則のとき，SKSPの解 $P'_{\mathcal{R}(S_i)}$ は

$$P'_{\mathcal{R}(S_i)} = U_i D_i K_{U_i}^{-1} U_i^*$$

$P'_{\mathcal{R}(S_i)} \Phi(f_x)$ は， $\Phi(f_x)$ を $\mathcal{R}(U_i)$ に正射影したあと $\mathcal{R}(T_i)$ に沿って $\mathcal{R}(S_i)$ へ斜射影した元となる。



正則化SKSP法

正則化SKSP法

$$\min_X : J[X_i] = \frac{1}{L_i} \sum_{s=1}^{L_i} \|\Phi(f_s^i) - X_i \Phi(f_s^i)\|^2 + \frac{1}{M_i} \sum_{t=1}^{M_i} \|X_i \Phi(g_t^i)\|^2 + \epsilon \|X_i\|_2^2$$

$$\text{s.t.} : \mathcal{N}(X_i) \supset \mathcal{R}(U_i)^\perp$$

ϵ : 正則化パラメータ

解

$$\tilde{D}_i = \begin{bmatrix} L_i I_{L_i} & \mathbf{0}_{L_i M_i} \\ \mathbf{0}_{M_i L_i} & M_i I_{M_i} \end{bmatrix} \text{とおくと}$$

$$\tilde{P}'_{\mathcal{R}(S_i)} = U_i D_i (K_{U_i} + \epsilon \tilde{D}_i)^{-1} U_i^*$$

他クラスの抑制と識別規則

- 他クラスのサンプル $g_1^i, \dots, g_{M_i}^i$ には, 必ずしもすべてのサンプルを含める必要はない.

2クラス識別器ではない

- 自クラスに類似したサンプルのみを含めれば, 十分な効果が期待できる.

- 識別規則

- 1 . 射影ノルム

$$\|P'_{\mathcal{R}(S_i)} \Phi(x)\|^2 > \|P'_{\mathcal{R}(S_j)} \Phi(x)\|^2 \quad \forall i \neq j \Rightarrow x \in \Omega_i$$

- 2 . 投影距離

$$\|\Phi(x) - P'_{\mathcal{R}(S_i)} \Phi(x)\|^2 < \|\Phi(x) - P'_{\mathcal{R}(S_j)} \Phi(x)\|^2 \quad \forall i \neq j \Rightarrow x \in \Omega_i$$

計算機実験1

手書き数字認識実験1

- **MNISTデータベースを使用・学習60,000文字、認識10,000文字**

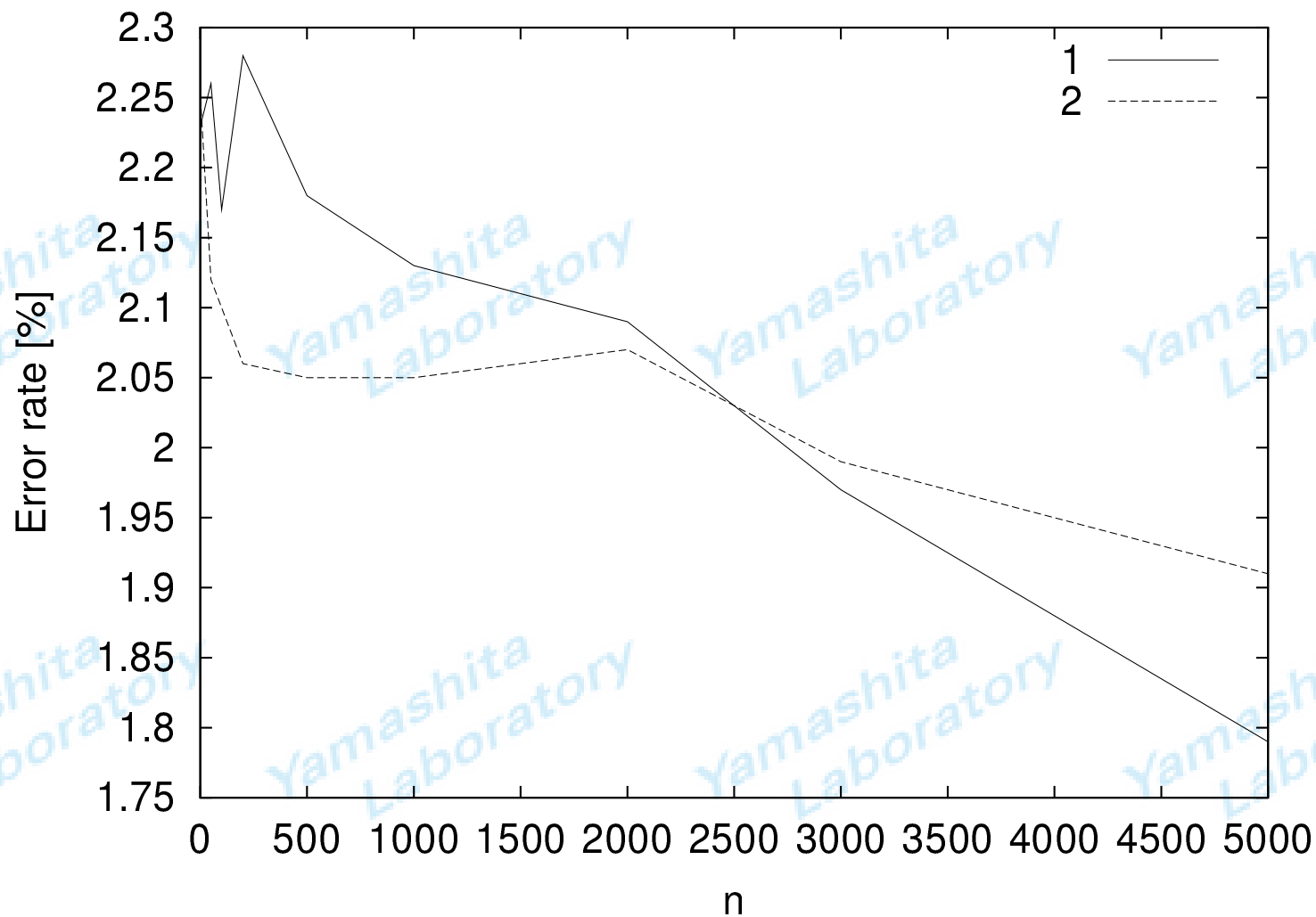
Method	Parameter	Error rate [%]
KSP - Gauss. kernel	$\sigma = 7$	2.25
SKSP - Gauss. kernel	$\sigma = 7, n = 5000$	1.79
KPCA - Gauss. kernel	$\sigma = 10, \text{rank} = 500$	2.32
SVM - Poly. kernel	$d = 4, C = 10$	1.49

設計，認識時間

識別手法	設計時間 [s]	認識時間 [s]
KSP	3.2×10^2	2.9
KPCA	1.5×10^3	1.6×10^{-1}
SVM	2.8×10^3	5.8×10^{-2}

計算機実験1 手書き数字認識実験2

■ SKSP法の実験，抑制項のサンプル数を変化させて実験



計算機実験2 公開データベース1

- **G. Rätsch**★らが用いたデータセットを使用。
 - **13種類**の識別問題
 - 各データセットに対し**100**あるいは**20**セットの学習用，認識用のサンプルが含まれる。
- ★ <http://ida.first.fraunhofer.de/projects/bench/benchmarks.htm>

計算機実験2 公開データベース2

■ 各手法の誤識別率の平均と標準偏差 (SKSP, KSP以外は引用)

dataset	SKSP	KSP	AB Reg	SVM	KFD
Banana	10.4 ± 0.5	10.4 ± 0.5	10.9 ± 0.4	11.5 ± 0.7	10.8 ± 0.5
Breast-cancer	26.0 ± 4.6	29.7 ± 4.5	26.5 ± 4.5	26.0 ± 4.7	24.5 ± 4.6
Diabetis	23.0 ± 1.6	24.5 ± 1.9	23.8 ± 1.8	23.5 ± 1.7	23.2 ± 1.6
Flare-solar	37.2 ± 4.5	39.1 ± 2.4	34.2 ± 2.2	32.4 ± 1.8	33.2 ± 1.7
German	23.4 ± 2.1	31.3 ± 2.5	24.7 ± 2.4	23.6 ± 2.1	23.7 ± 2.2
Heart	15.8 ± 3.1	15.4 ± 3.3	16.5 ± 3.5	16.0 ± 3.3	16.1 ± 3.4
Image	2.8 ± 0.4	2.9 ± 0.5	2.7 ± 0.6	3.0 ± 0.6	4.8 ± 0.6
Ringnorm	18.0 ± 2.3	19.9 ± 1.8	1.6 ± 0.1	1.7 ± 0.1	1.5 ± 0.1
Splice	11.2 ± 0.7	12.6 ± 0.7	9.5 ± 0.7	10.9 ± 0.7	10.5 ± 0.6
Thyroid	4.0 ± 2.3	4.2 ± 2.3	4.6 ± 2.2	4.8 ± 2.2	4.2 ± 2.1
Titanic	29.4 ± 10.3	28.3 ± 9.4	22.6 ± 1.2	22.4 ± 1.0	23.3 ± 2.1
Twonorm	2.4 ± 0.1	2.3 ± 0.1	2.7 ± 0.2	3.0 ± 0.2	2.6 ± 0.2
Waveform	9.6 ± 0.4	11.2 ± 0.6	9.8 ± 0.8	9.9 ± 0.4	9.9 ± 0.4
# of Red	5	3	2	2	2
# of Blue	4	1	3	2	4

Red : 1 番目, Blue : 2 番目

他の手法との比較1 KPCA (カーネル部分空間法)

- KPCAはカーネル標本空間の **KL部分空間** への正射影
- KSPはKPCAのフルランクのときに一致する。
- 部分空間法はクラス間の重なりが大きい
PCA(KLT)で次元を下げる必要がある。
特徴空間ではクラス間の重なりは小さい。
- 正則化
 - KSP : Tikhonov 近似
 - KPCA : TSVD (Truncated Singular Value Decomposition)
- 追加学習 : **KSP**
- 設計
 - KSP : カーネルグラム行列の (MP一般) 逆行列
 - KPCA : カーネルグラム行列の固有値分解

他の手法との比較 1 Support Vector Machine

■ 識別器の種類

- KSP : 1クラス
- SKSP : 他クラスを考慮した1クラス
- SVM : 2クラス

■ 設計

- KSP, SKSP : 逆行列 , 行列積 – 閉じた解
- SVM : 2次計画問題

■ 識別関数

- KSP, SKSP : 特徴空間での2次関数
- SVM : 特徴空間での1次関数

■ スパース性，頑健性

- KSP, SKSP : スパースでない，頑健
- SVM : スパース，頑健でない

■ マルチテンプレート

- KSP, SKSP : ○
- SVM : ×

■ クラス，サンプルの増減

- KSP : 簡単に計算できる．
- SKSP, SVM : 再設計の必要がある．

まとめと課題

- カーネル標本空間射影 (*KSP*)法
- 正則化
- 抑制型カーネル標本空間射影 (*SKSP*)法
- 計算機実験
- *KPCA*, *SVM*との比較

課題

- マルチテンプレートの導入

終り

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

Yamashita
Laboratory

KSP vs. SVM 頑健性の比較

エラーを混入させたときの誤認識率と1クラスあたりの設計時間

誤サンプル数	KSP		SVM		
	Error[%]	Time	Error[%]	Time	# of SV
90 (0.3%)	2.22	6分	2.21	2時間	3739
180 (0.6%)	2.35	6分	2.85	4時間	4965
270 (0.9%)	2.25	6分	3.91	7時間	6067

■ *KSP : Gaussian kernel* – $\sigma = 7$

■ *SVM : Polynomial kernel* – $d = 4, C = 10$