# モデルの微分による非線形モデルの解釈

明治大学 理工学部 応用化学科
データ化学工学研究室　金子 弘昌

# モデルの微分による非線形モデルの解釈



✓線形モデル

- 標準回帰係数などの重みを見ることで、
  各説明変数 (記述子・特徴量) の重みを検討できる

✓非線形モデル

- モデルを各説明変数で偏微分
- 説明変数空間におけるある点 (たとえば、あるサンプル) における微分係数を計算することで、その点における説明変数ごとの傾きを計算できる
- 傾きが大きいということは、その点において値を変化させることで、目的変数の値の変化も大きい説明変数であるということ

# 線形モデルの解釈の検討



線形の 2 クラス分類モデルもしくは回帰モデル $y = f(\mathbf{x})$
( 2 クラス分類モデルにおいて、目的変数 $y$ は -1 もしくは 1)

$$f(\mathbf{x}) = a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_mx_m + b \qquad (m: \text{説明変数の数})$$

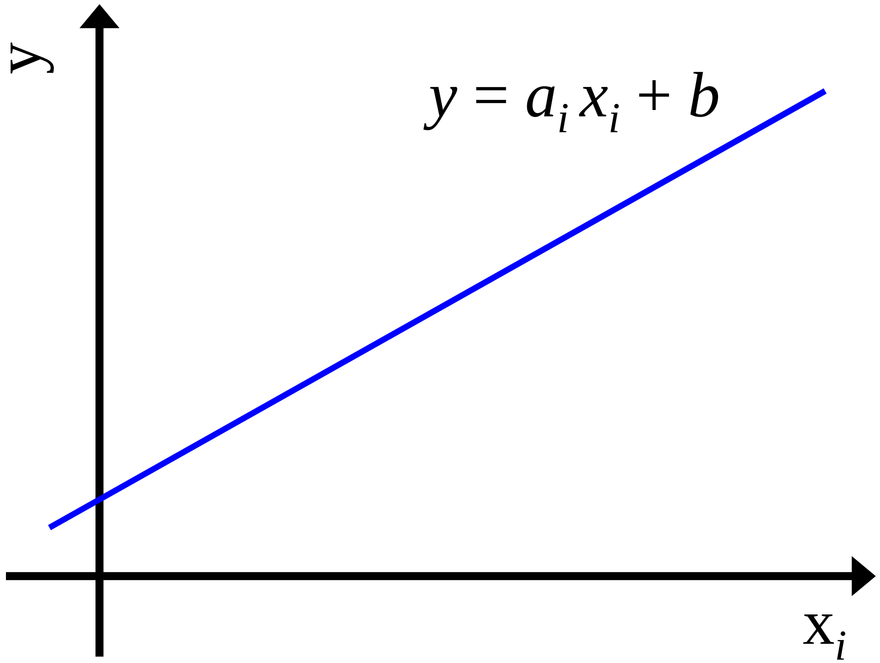
モデルにおける各説明変数 $x_\mathrm{i}$ の重み $a_i$ を見ることで、
$x_i$ を 1 変化させたときに、$f(\mathbf{x})$ がどれくらい変化するかわかる

ただし、説明変数の間に相関があるときは $x_i$ だけ 1 変化させることは難しく、単純に $a_i$ を $x_i$ の $y$ への寄与の大きさとすることはできないことに注意

# 非線形モデルでは？

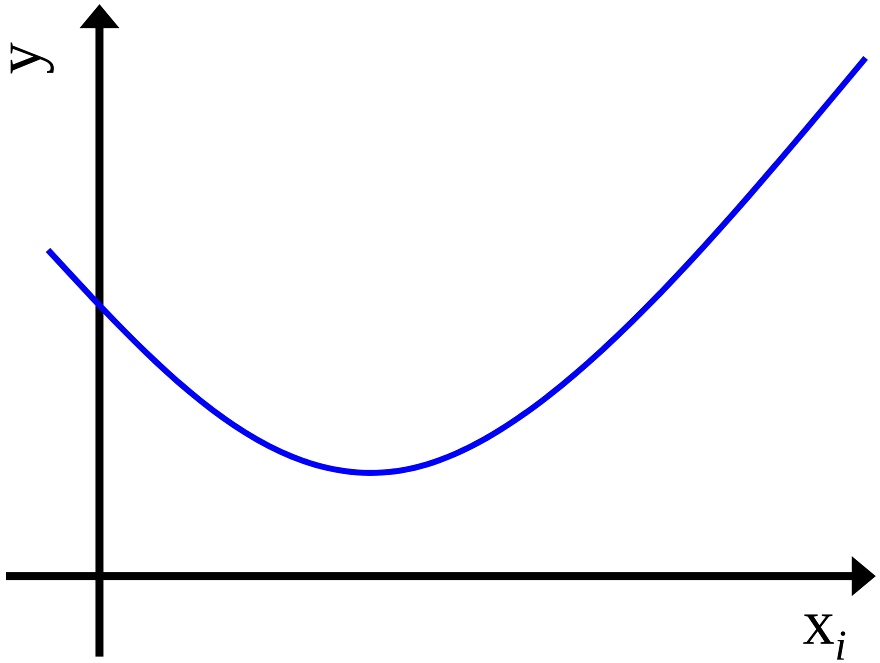


線形モデル




傾き = 重み = $a_i$

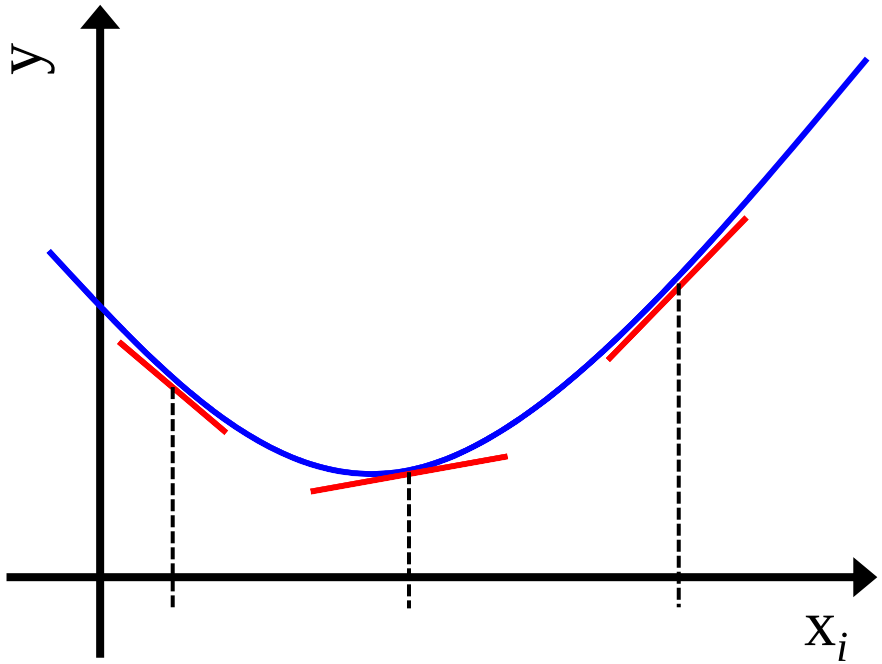
非線形モデル




？

# 局所的に傾きを求めよう！→ 微分






説明変数の値 (たとえばサンプル) ごとの、局所的な傾きは計算できる

⇨ モデルを、$x_i$ で偏微分する

# 非線形モデルの微分



$f(\mathbf{x})$ を $x_i$ で偏微分すると、 $\dfrac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$

$f(\mathbf{x})$ が線形モデル、つまり

$f(\mathbf{x}) = a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_mx_m + b$ ($m$ : 説明変数の数)

のとき、 $\dfrac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = a_i$ となり重みと一致

線形モデルでは定数になるが、非線形モデルでは $\mathbf{x}$ の関数になる

# 非線形モデルの例



今回は、サポートベクターマシン関係の３つの非線形モデルを
説明変数 $x_i$ で偏微分してみる

２クラス分類：Support Vector Machine (SVM)
詳細：https://datachemeng.com/supportvectormachine/

回帰分析：Support Vector Regression (SVR)
詳細：https://datachemeng.com/supportvectorregression/

モデルの適用範囲：One-Class SVM (OCSVM)
詳細：https://datachemeng.com/ocsvm/

カーネル関数は、ガウシアンカーネルとする

# 非線形モデルの式



SVM $$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y^{(j)} K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) + b$$

SVR $$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} \left(\alpha_j - \alpha_j^{*}\right) K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) + b$$

OCSVM $$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) + b$$

$$K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) = \exp\left(-\gamma \left\|\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x}\right\|^{2}\right)$$

$n$ : サンプル数
$y^{(j)}$ : $j$ 番目のトレーニングサンプルの目的変数の値
$\mathbf{x}^{(j)}$ : $j$ 番目のトレーニングサンプルの説明変数ベクトル
$\alpha_j$, $\alpha_j^{*}$: SVM, SVR, OCSVMモデリングにより求められる値
$b$ : 定数項

# SVMモデルの微分



SVMモデル $f(\mathbf{x})$ を $x_i$ で偏微分すると、

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sum_{j=1}^{n}\alpha_j y^{(j)} K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) + b\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{n}\alpha_j y^{(j)} \frac{\partial}{\partial x_i} K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right)$$

カーネル関数 $K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) = \exp\left(-\gamma\left\|\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x}\right\|^2\right)$ を $x_i$ で偏微分する

# カーネル関数の微分



$$\frac{\partial}{\partial x_i} K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \exp\left(-\gamma \left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2\right)$$

$$= -\gamma \exp\left(-\gamma \left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2\right) \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2\right)$$

$$\left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2 = \left(x_1^{(j)} - x_1\right)^2 + \left(x_2^{(j)} - x_2\right)^2 + \ldots + \left(x_i^{(j)} - x_i\right)^2 + \ldots + \left(x_m^{(j)} - x_m\right)^2$$ より、

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2\right) = -2\left(x_i^{(j)} - x_i\right)$$

よって、

$$\frac{\partial}{\partial x_i} K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) = 2\gamma\left(x_i^{(j)} - x_i\right) \exp\left(-\gamma \left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2\right)$$

# SVMモデルの微分



p.8, p.9 より、

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_i} = 2\gamma \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y^{(j)} \left( x_i^{(j)} - x_i \right) \exp\left( -\gamma \left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2 \right)$$

# SVMモデルの微分係数によって分かること



$$2\gamma \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y^{(j)} \left( x_i^{(j)} - x_i \right) \exp\left( -\gamma \left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2 \right)$$ の値が正 (もしくは負) のとき、

あるサンプル $\mathbf{x}$ から 説明変数 $x_i$ の値だけを大きくしたとき、

クラス 1 (もしくは-1) の方向に変化するということ

$$2\gamma \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y^{(j)} \left( x_i^{(j)} - x_i \right) \exp\left( -\gamma \left\| \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x} \right\|^2 \right)$$ の絶対値が

大きいということは、その変化が大きいということ

# SVRモデルの微分



SVRモデル $f(\mathbf{x})$ を $x_i$ で偏微分すると、

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sum_{j=1}^{n}\left(\alpha_j - \alpha_j^{*}\right)K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) + b\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{n}\left(\alpha_j - \alpha_j^{*}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right)$$

p. 9 より、

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_i} = 2\gamma\sum_{j=1}^{n}\left(\alpha_j - \alpha_j^{*}\right)\left(x_i^{(j)} - x_i\right)\exp\left(-\gamma\left\|\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x}\right\|^2\right)$$

# SVRモデルの微分係数によって分かること



$$2\gamma\sum_{j=1}^{n}\left(\alpha_j-\alpha_j^{*}\right)\left(x_i^{(j)}-x_i\right)\exp\left(-\gamma\left\|\mathbf{x}^{(j)}-\mathbf{x}\right\|^2\right)$$ の値が正 (もしくは負)

のとき、あるサンプル $\mathbf{x}$ から 説明変数 $x_i$ の値だけを大きくしたとき、

目的変数の値が正 (もしくは負) の方向に変化するということ

$$2\gamma\sum_{j=1}^{n}\left(\alpha_j-\alpha_j^{*}\right)\left(x_i^{(j)}-x_i\right)\exp\left(-\gamma\left\|\mathbf{x}^{(j)}-\mathbf{x}\right\|^2\right)$$ の絶対値が

大きいということは、その変化が大きいということ

# OCSVMモデルの微分

OCSVMモデル $f(\mathbf{x})$ を $x_i$ で偏微分すると、

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sum_{j=1}^{n} \alpha_j K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right) + b\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \frac{\partial}{\partial x_i} K\left(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}\right)$$

p. 9 より、

$$\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_i} = 2\gamma \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \left(x_i^{(j)} - x_i\right) \exp\left(-\gamma \left\|\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x}\right\|^2\right)$$

# OCSVMモデルの微分係数によって分かること



$$2\gamma\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\left(x_i^{(j)}-x_i\right)\exp\left(-\gamma\left\|\mathbf{x}^{(j)}-\mathbf{x}\right\|^2\right)$$ の値が正 (もしくは負) のとき、

あるサンプル $\mathbf{x}$ から 説明変数 $x_i$ の値だけを大きくしたとき、

$f(\mathbf{x})$ が大きく (もしくは小さく) なり、モデルの適用範囲内

(もしくは適用範囲外) の方向に変化するということ

$$2\gamma\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\left(x_i^{(j)}-x_i\right)\exp\left(-\gamma\left\|\mathbf{x}^{(j)}-\mathbf{x}\right\|^2\right)$$ の絶対値が

大きいということは、その変化が大きいということ