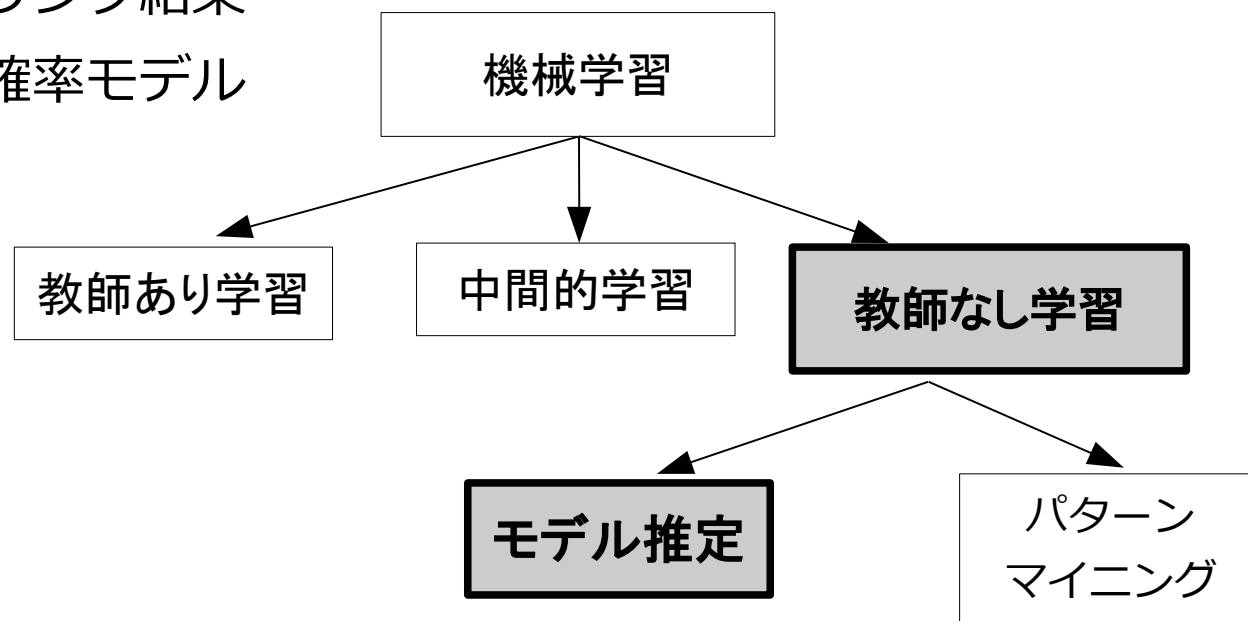


# 11. モデル推定

- 問題設定
  - 教師なし学習
  - 数値入力 → クラスモデル
    - クラスモデルの例
      - クラスタリング結果
      - クラスの確率モデル



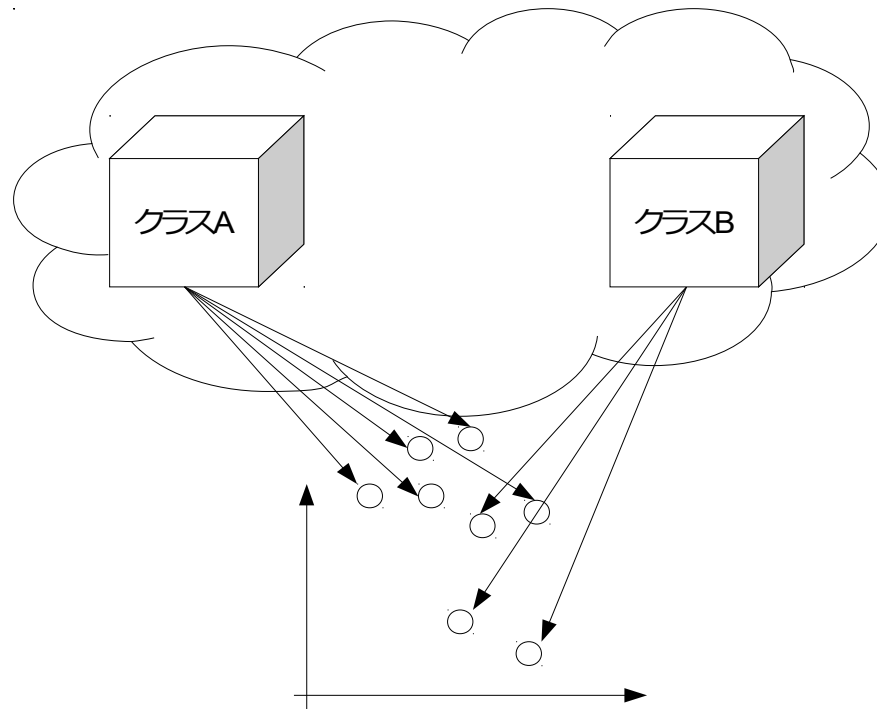
# 11.1 問題の定義

- 学習データ

$$\{x^{(i)}\} \quad i = 1, \dots, N$$

- 問題設定

- 特徴ベクトル  $x$  が生成された元のクラスの性質を推定する



## 11.2 クラスタリング

- クラスタリングとは
  - 対象のデータを、  
内的結合（同じ集合内のデータ間の距離は小さく）  
と  
外的分離（異なる集合間の距離は大きく）  
が達成されるような部分集合に分割すること
- クラスタリング手法の分類
  - 階層的手法
    - ボトムアップ的にデータをまとめてゆく
  - 分割最適化手法
    - トップダウン的にデータ集合を分割してゆく

要するに  
塊を見つ  
けること

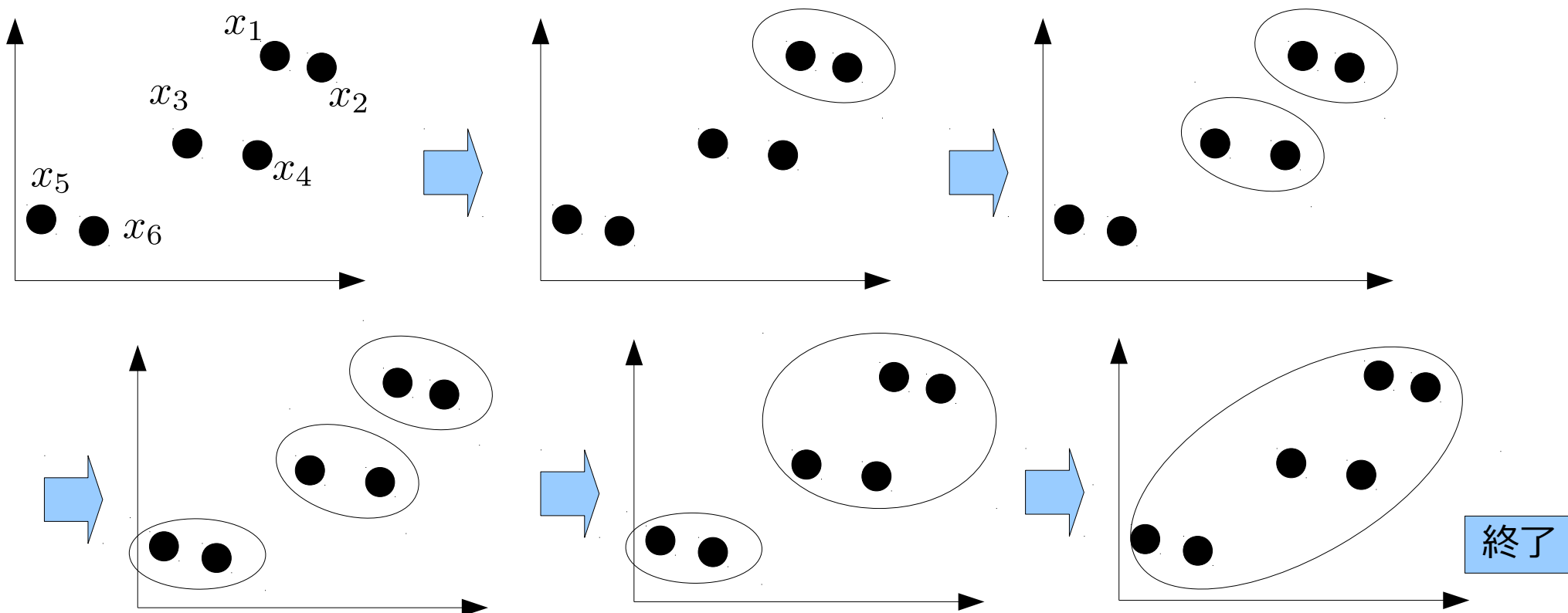
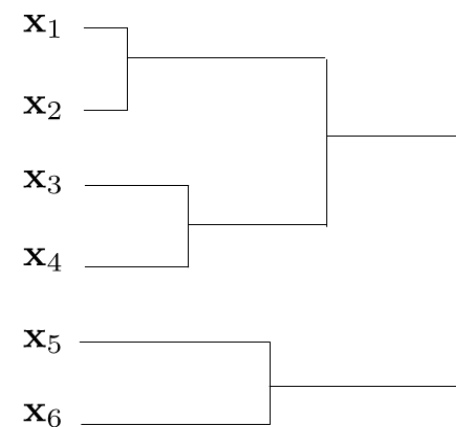
# 11.2.1 階層的クラスタリング

- 階層的クラスタリングとは

- 1.1 データ 1 クラスタからスタート

- 2.最も近接するクラスタをまとめる

- 3.全データが 1 クラスタになれば終了



# 11.2.1 階層的クラスタリング

---

**Algorithm 11.1** 階層的クラスタリング

---

入力: 正解なしデータ  $D$

出力: クラスタリング結果の木構造

/\* 学習データそれぞれをクラスタの要素としたクラスタ集合  $C$  を作成 \*/

$C \leftarrow \{c_1, c_2, \dots, c_N\}$

**while**  $|C| > 1$  **do**

/\* もっとも似ているクラスタ対  $\{c_m, c_n\}$  を見つける \*/

$(c_m, c_n) \leftarrow \arg \max_{c_i, c_j \in C} \text{sim}(c_i, c_j)$

$\{c_m, c_n\}$  を融合

**end while**

---

# 11.2.1 階層的クラスタリング

- 類似度  $\text{sim}$  の定義
  - 単連結法
    - 類似度：最も近い事例対の距離
    - 傾向：クラスタが一方向に伸びやすくなる
  - 完全連結法
    - 類似度：最も遠い事例対の距離
    - 傾向：クラスタが一方向に伸びるのを避ける
  - 重心法
    - 類似度：クラスタの重心間の距離
    - 傾向：単連結と完全連結の中間的な形
  - Ward 法
    - 類似度：融合前後の「平均ベクトルとの距離の二乗和」の差
    - 傾向：極端な形になりにくく、よく用いられる手法

## 11.2.2 分割最適化クラスタリング

- 分割最適化クラスタリングとは
  - データ分割の良さを評価する関数を定め、その評価関数の値を最適化することを目的とする
  - ただし、全ての可能な分割に対して評価値を求めることは、データ数  $N$  が大きくなると、不可能
    - 2 分割で  $2^N$  通り
  - 探索によって、準最適解を求める

## 11.2.2 分割最適化クラスタリング

- k-Means アルゴリズム

1. 分割数  $k$  を予め与える

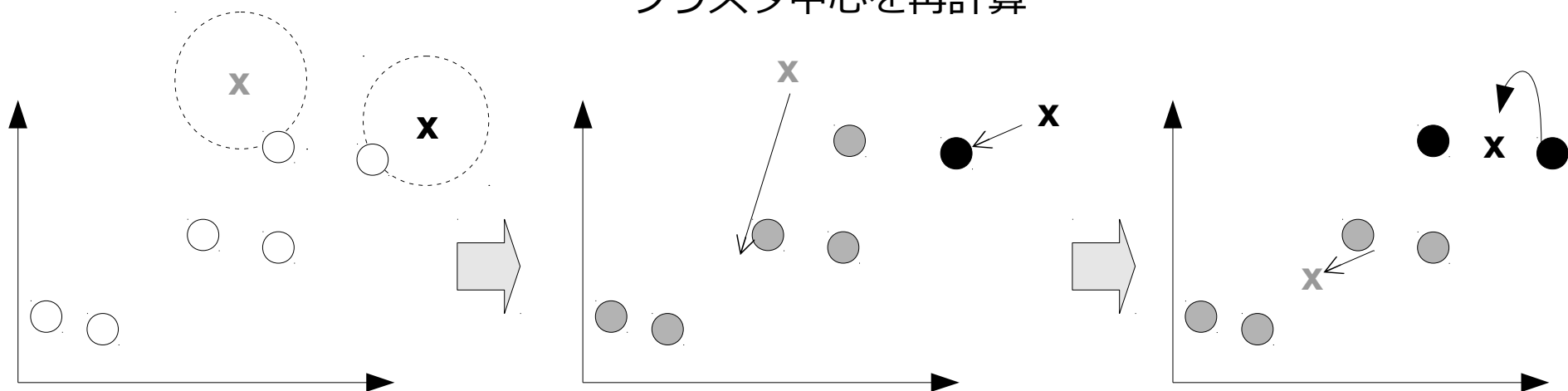
2. 乱数で  $k$  個のクラスタ中心を設定し、逐次更新

① 初期値として乱数でクラスタ中心を配置

② 各データを、最も近いクラスタ中心に配属

③ 所属しているデータからクラスタ中心を再計算

④ ②, ③ の処理をクラスタ中心が動かなくなるまで繰り返す





## 11.2.2 分割最適化クラスタリング

---

**Algorithm 11.2** k-means アルゴリズム

---

入力: 正解なしデータ  $D$

出力: クラスタ中心  $\mu_j$  ( $j = 1, \dots, k$ )

入力空間上に  $k$  個の点をランダムに設定し, それらをクラスタ中心  $\mu_j$  とする

**repeat**

**for all**  $x_i \in D$  **do**

    各クラスタ中心  $\mu_j$  との距離を計算し, もっとも近いクラスタに割り当てる

**end for**

  /\* 各クラスタについて, 以下の式で中心の位置を更新

  ( $N_j$  はクラスタ  $j$  のデータ数) \*/

$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{N_j} \sum_{x_k \in \text{クラスタ}_j} x_k$$

**until** クラスタ中心  $\mu_j$  が変化しない

**return**  $\mu_j$  ( $j = 1, \dots, k$ )

---

## 11.2.2 分割最適化クラスタリング

- k-means 法の問題点
  - 分割数  $k$  を予め決めなければならない
- 解決法  $\Rightarrow$  X-means アルゴリズム
  - 2 分割から始めて、分割数を適応的に決定する
  - 分割の妥当性の判断： BIC (Bayesian information criterion) が小さくなれば、分割を継続

$$BIC = -2 \log L + q \log N$$

- $L$ : モデルの尤度
- $q$ : モデルのパラメータ数
- $N$ : データ数

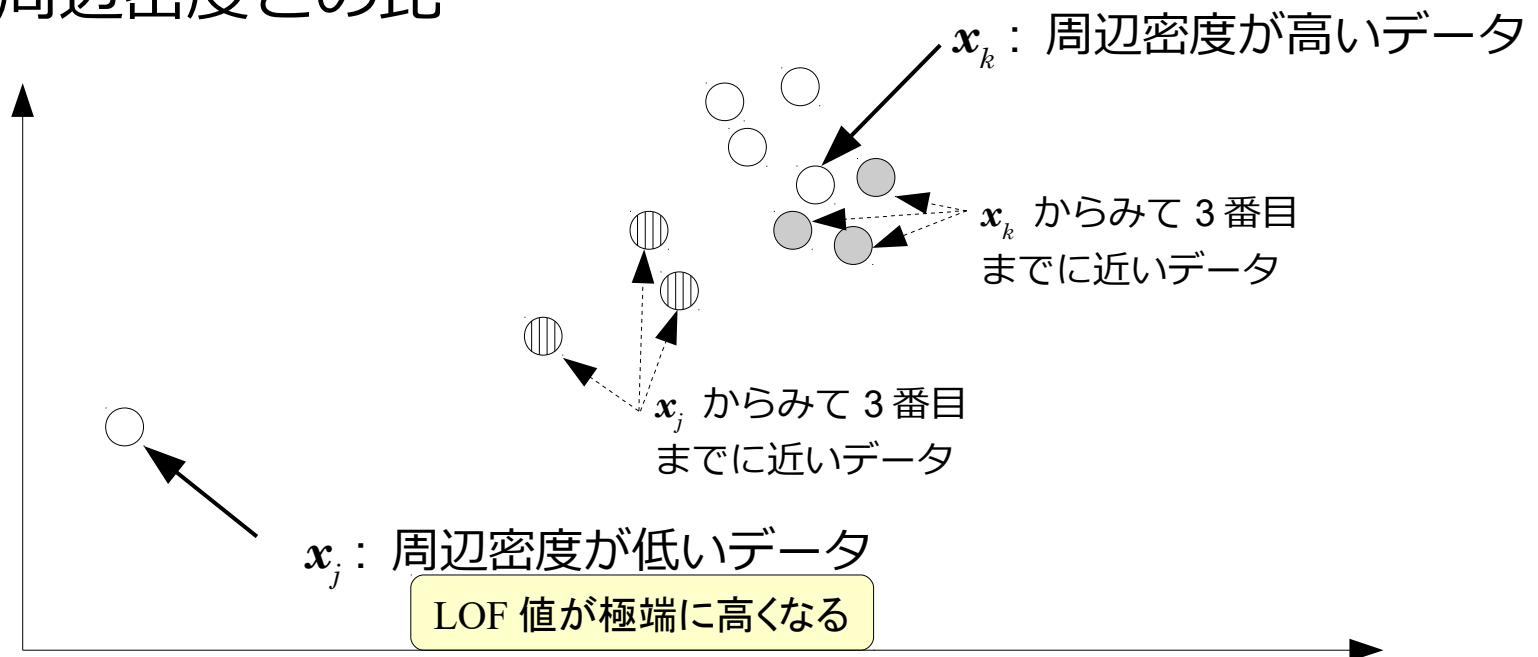
パラメータで表される  
統計モデルの選択基準  
(小さいほどよいモデル)

# 11.3 異常検出

- 異常検出とは
  - 正常クラスの数と、それ以外の数とのクラスタリング
  - 外れ値検知、変化点検出、異常状態検出など
  - 対象データが静的・動的で手法が異なる
- 外れ値検知（静的異常検出）
  - データの分布から大きく離れている値を見つける
  - 手法
    - 近くにデータがないか、あるいは極端に少ないものを外れ値とみなす
    - 「近く」の閾値を、予め決めておくことは難しい

# 11.3 異常検出

- 局所異常因子による外れ値検知
  - 周辺密度
    - あるデータの周辺の他のデータの集まり具合
  - 局所異常因子 (LOF: local outlier factor)
    - 近くの  $k$  個のデータの周辺密度の平均と、あるデータの周辺密度との比



# 11.3 異常検出

- 局所異常因子の計算
  - 到達可能距離

$$RD_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \max(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\|, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|)$$

$\mathbf{x}^{(k)}$  は、 $\mathbf{x}$  に  $k$  番目に近いデータ

近すぎる距離は、 $k$  番目との距離に補正される

- 局所到達可能密度

$$LRD_k(\mathbf{x}) = \left( \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k RD_k(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}) \right)^{-1}$$

$\mathbf{x}$  の周りの密度が高い場合、大きな値になる

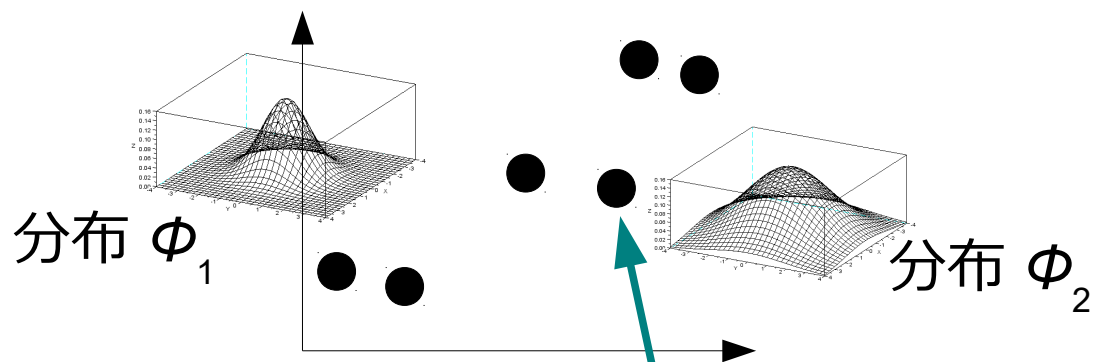
- 局所異常因子

$$LOF_k(\mathbf{x}) = \frac{\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k LRD_k(\mathbf{x}^{(i)})}{LRD_k(\mathbf{x})}$$

# 11.4 確率密度推定

- 教師なし学習で識別器を作る問題
  - クラスタリング結果からは、1 クラス 1 プロトタイプ  
の単純な識別器しかできない
  - 各クラスの事前確率や確率密度関数も推定したい

➡ EM アルゴリズム



# 11.4 確率密度推定

- k-means 法の一般化
  - k 個の平均ベクトルを乱数で決める  
⇒ k 個の正規分布を乱数で決める
  - 平均ベクトルとの距離を基準に、各データをいずれかのクラスタに所属させる  
⇒ 各分布が各データを生成する確率を計算し、  
各クラスタにゆるやかに帰属させる
  - 所属させたデータをもとに平均ベクトルを再計算  
⇒ 各データのクラスタへの帰属度に基づき各分布のパラメータ（平均値、共分散行列）を再計算

# 11.4 確率密度推定

---

## Algorithm 11.3 EM アルゴリズム

---

入力: 正解なしデータ  $D$

出力: 各クラスを表す確率密度関数のパラメータ

入力空間上に  $k$  個の分布  $\phi_j$  をランダムに設定

**repeat**

    /\* E ステップ \*/

**for all** 学習データ  $\mathbf{x}^{(i)}$  **do**

$p(\mathbf{x}^{(i)}|c_j) = \phi_j(\mathbf{x}^{(i)})$  ( $j = 1, \dots, k$ ) を計算

**end for**

    /\* M ステップ \*/

        E ステップの確率  $p(\mathbf{x}^{(i)}|c_j)$  を使って分布  $\phi_j$  のパラメータを再計算

**until** 分布のパラメータの変化量が閾値以下

---