11. モデル推定

- 本章の説明手順

1.教師なし、モデル推定の問題設定

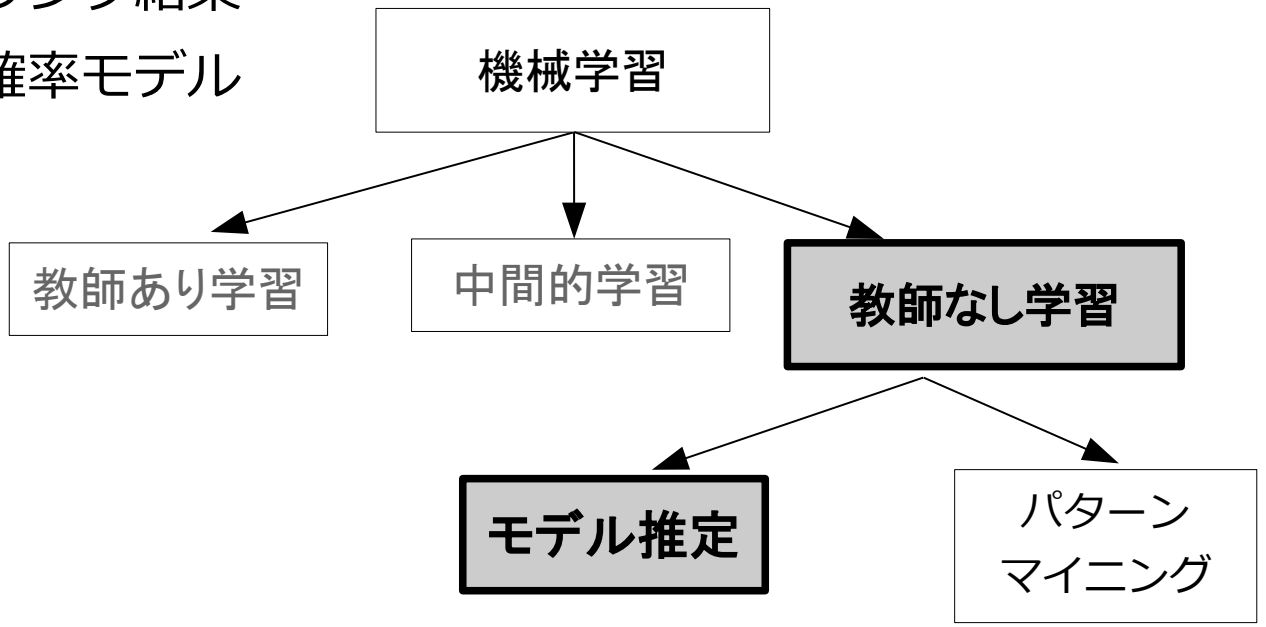
2.ボトムアップにデータをまとめてゆく階層的クラスタリング手法の説明

3.トップダウンにデータの分割を行い、最適化してゆく分割最適化クラスタリング手法の説明

4.分割最適化手法の一般化としての確率密度推定手法の説明

11.1 数値特徴に対する「教師なし・モデル推定」問題の定義

- 問題設定
  - 教師なし学習
  - （密な）数値ベクトル　→　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

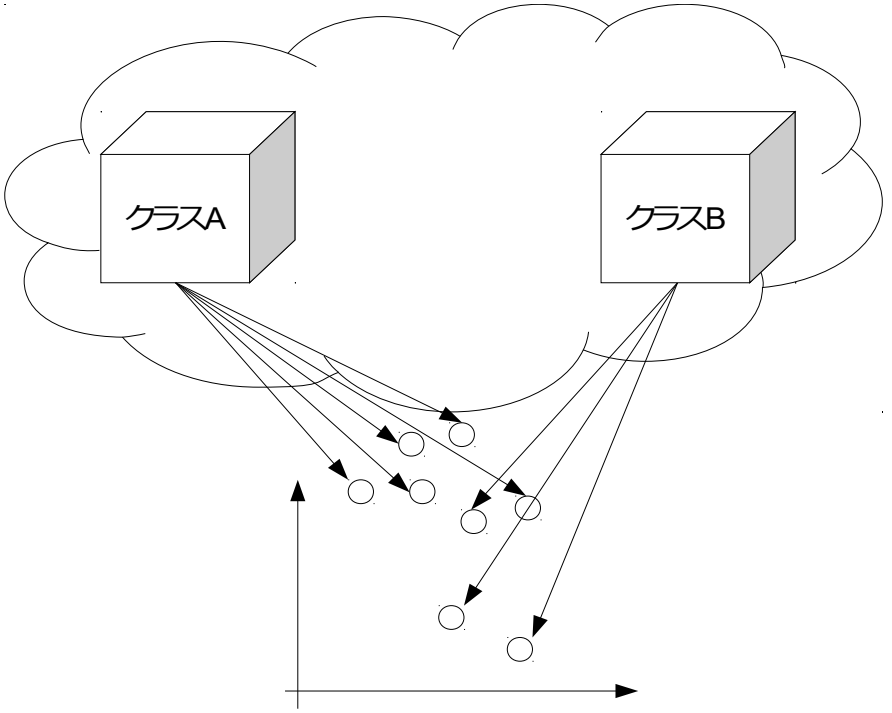


11.1 数値特徴に対する「教師なし・モデル推定」問題の定義

- データセット

$$\{\boldsymbol{x}_i\} \quad i = 1, \ldots, N$$

- モデル推定とは
  - 個々のデータを生じさせた共通の性質をもつクラスを見つける
  - そのクラスの統計的性質を推定する



11.2 クラスタリング

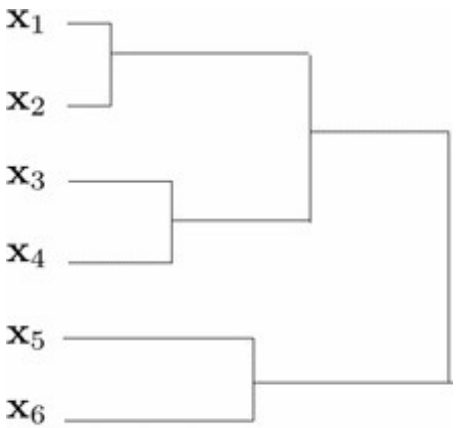
- クラスタリングとは
  - 「共通の性質をもつクラス」 = 「特徴空間上で近い値をもつデータの集まり」と考え、データのまとまりを見つける
  - 「まとまり」とは
    - 内的結合（同じ集合内のデータ間の距離は小さく）
      と
      外的分離（異なる集合間の距離は大きく）
      が達成されるような部分集合

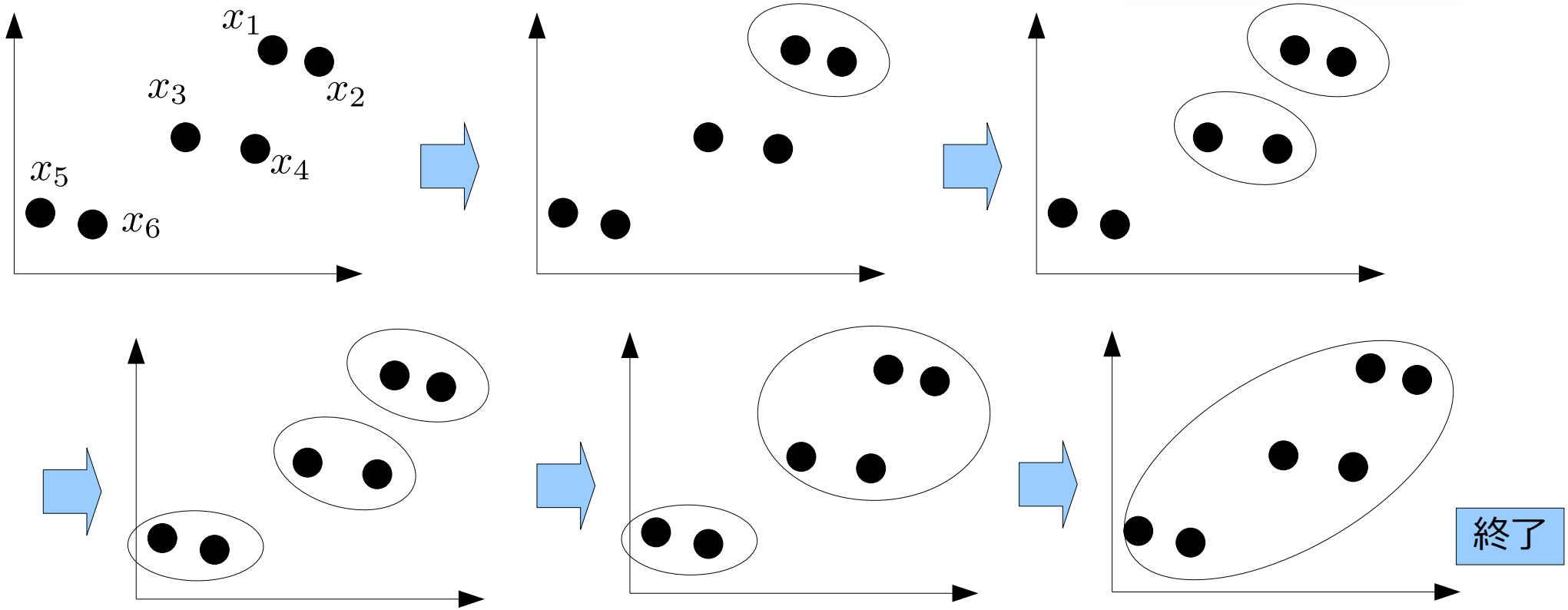
11.2 クラスタリング

- 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

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 */

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

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 */

$(c_m, c_n) \leftarrow \underset{c_i, c_j \in C}{\operatorname{argmax}} \operatorname{sim}(c_i, c_j)$

$\{c_m, c_n\}$ を融合

end while

11.2.1 階層的クラスタリング

- 類似度 sim の定義（正確にはこれらの反数）
  - 単連結法 (single)
    - 類似度：最も近いデータ対の距離
    - 傾向：クラスタが一方向に伸びやすくなる
  - 完全連結法 (complete)
    - 類似度：最も遠いデータ対の距離
    - 傾向：クラスタが一方向に伸びるのを避ける
  - 重心法 (average)
    - 類似度：クラスタの平均ベクトル間の距離
    - 傾向：単連結と完全連結の中間的な形
  - Ward 法 (ward)
    - 類似度：融合前後の「平均ベクトルとデータの距離の二乗和」の差
    - 傾向：極端な形になりにくく、よく用いられる基準

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、すべ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

    例： 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

評価関数：データとクラスタ中心との距離の和

1.分割数 k を予め与える

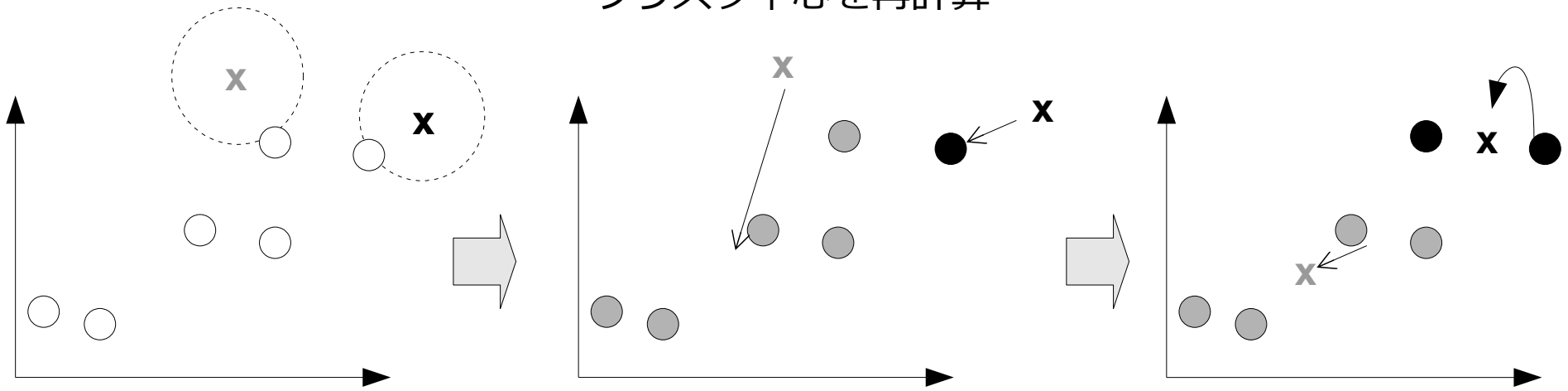
2.乱数で k 個のクラスタ中心を設定し、逐次更新

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、もっと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 $\boldsymbol{\mu}_j \quad (j = 1, \ldots, k)$

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 $\boldsymbol{\mu}_j$ とする

repeat

for all $\boldsymbol{x}_i \in D$ **do**

各クラスタ中心 $\boldsymbol{\mu}_j$ 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) */

$$\boldsymbol{\mu}_j \leftarrow \frac{1}{N_j} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in \text{クラスタ}_j} \boldsymbol{x}_i \qquad (j = 1, \ldots, k)$$

until クラスタ中心 $\boldsymbol{\mu}_j$ が変化しない

return $\boldsymbol{\mu}_j \quad (j = 1, \ldots, k)$

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 ⇒ 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

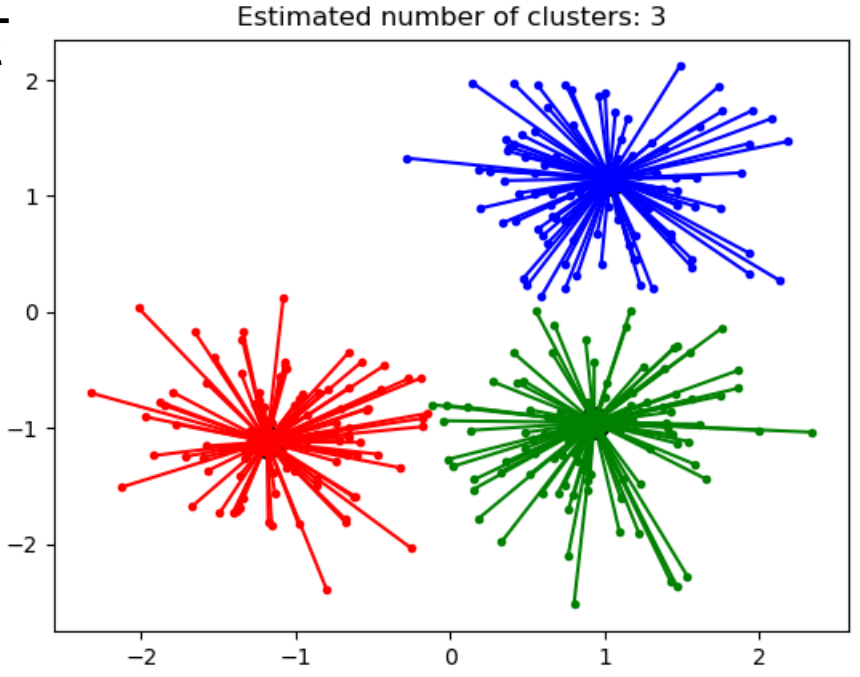
$$BIC = -2\log L + q\log N$$

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）

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

11.2.2 分割最適化クラスタリング

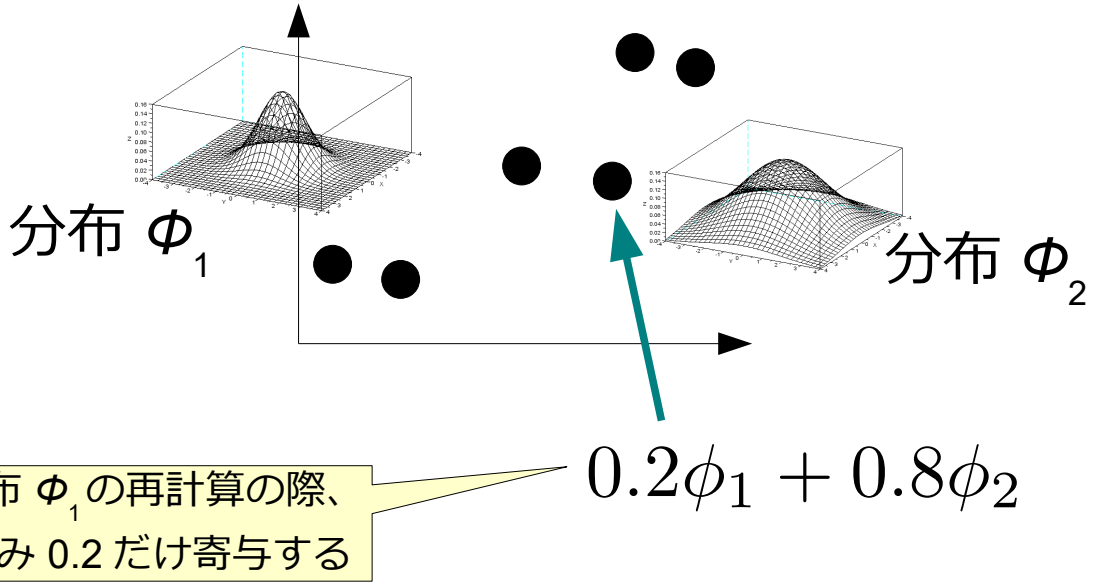
- Affinity Propagation とは
  - クラスタ数を自動的に決定するアルゴリズム
- 基本的な考え方
  - クラスタ中心らしさ (responsibility) とクラスタへの属しやすさ (availability) をデータ間で伝達して収束させる



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 個のクラスタ c_j の分布 ϕ_j をランダムに設定

repeat

/* E ステップ */

for all $\boldsymbol{x}_i \in D$ **do**

ϕ_j を用いて確率 $p(c_j \mid \boldsymbol{x}_i)$ $(j = 1, \ldots, k)$ を計算

end for

/* M ステップ*/

E ステップで求めた $p(c_j \mid \boldsymbol{x}_i)$ を使って分布 ϕ_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

return ϕ_j $(j = 1, \ldots, k)$

11.4 確率密度推定

- E ステップの確率計算

$$p(c_m \mid \boldsymbol{x}_i) = \frac{p(c_m)p(\boldsymbol{x}_i \mid c_m)}{p(\boldsymbol{x}_i)}$$

ベイズの定理

$$= \frac{p(c_m)p(\boldsymbol{x}_i \mid c_m)}{\sum_{j=1}^{k} p(c_j)p(\boldsymbol{x}_i \mid c_j)}$$

分母を周辺化

$$= \frac{p(c_m)\phi(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{\mu}_m, \boldsymbol{\Sigma}_m)}{\sum_{j=1}^{k} p(c_j)\phi(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}$$

尤度を分布の式に置き換え

- M ステップの分布の最尤推定

$$\boldsymbol{\mu}_m = \frac{1}{|D|} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in D} p(c_m \mid \boldsymbol{x}_i)\ \boldsymbol{x}_i$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_m = \frac{1}{|D|} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in D} p(c_m \mid \boldsymbol{x}_i)(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_m)(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_m)^T$$

補足

Affinity Propagation

- データ i とデータ k の間に定義される 3 つの関数
  - $s(i,k)$: データ i とデータ k の類似度。負の距離がよく用いられる
  - $r(i,k)$: 代表点 k からデータ i に送られるクラスタの代表点らしさ
  - $a(i,k)$: データ i から代表点 k に送られるクラスタへの所属度

r と a が更新対象

Affinity Propagation のアルゴリズム

1. a の値を 0 で初期化
2. r を以下の式で更新 (k' は競合している代表点候補)

$$r(i,k) \leftarrow s(i,k) - \max_{k' s.t. k' \neq k} \{a(i,k') + s(i,k')\}$$

3. a を以下の式で更新 (i' は代表点候補 k を最も高く評価している点)

$$a(i,k) \leftarrow \min\{0, r(k,k) + \sum_{i' s.t. i' \notin \{i,k\}} r(i',k)\}$$

4. r_t と a_t を用いて r_{t+1} と a_{t+1} を以下の式で更新

$$r_{t+1}(i,k) = \lambda r_t(i,k) + (1-\lambda) r_{t+1}(i,k)$$
$$a_{t+1}(i,k) = \lambda a_t(i,k) + (1-\lambda) a_{t+1}(i,k)$$

更新量があまり大きくならないように

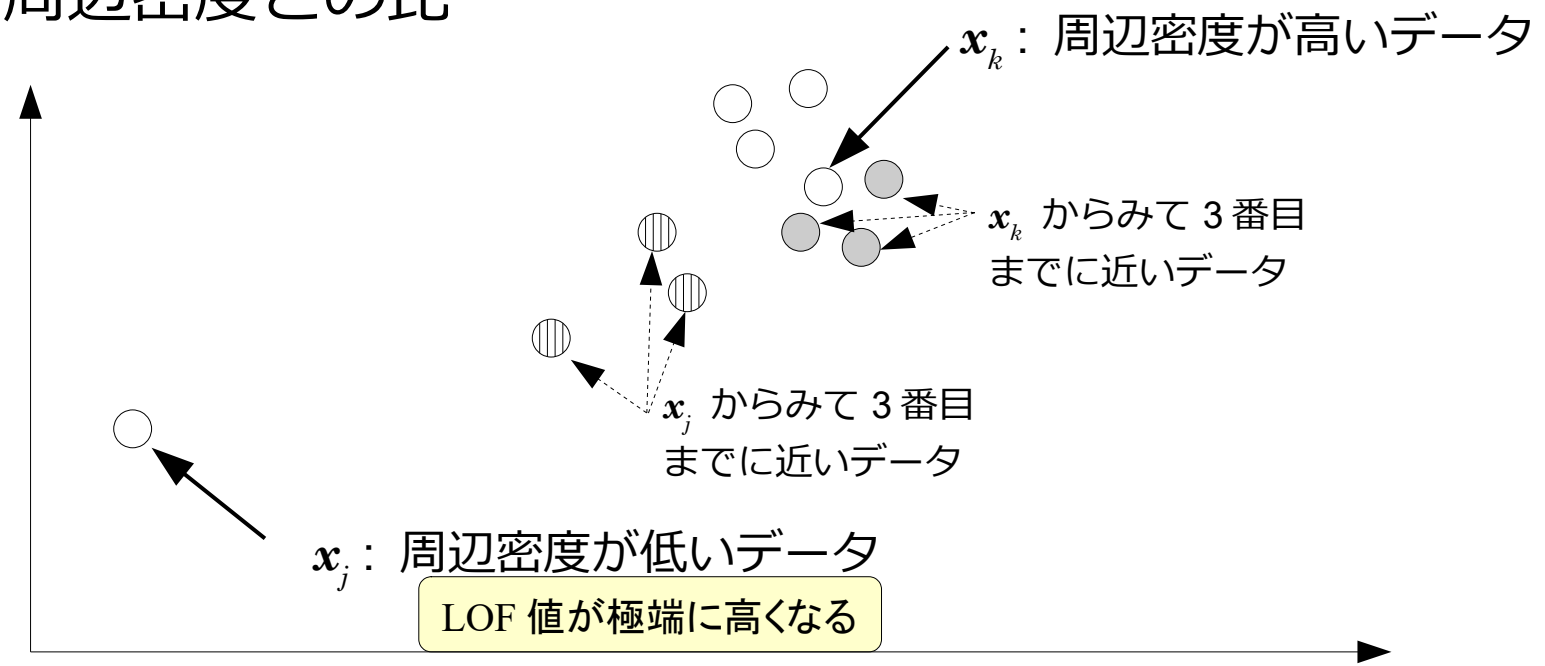
5. 更新量が一定値以下になれば終了。各データ i を $\mathrm{argmax}_k r(i,k)+a(i,k)$ となるデータ k を代表とするクラスタに割り当てる

11.3 異常検出

- 異常検出とは
  - 正常クラスのデータと、それ以外のデータとのクラスタリング
  - 外れ値検知：学習データ中の異常値を検出
  - 新規検知：新しく入力されるデータの異常性を発見
- 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

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

$\boldsymbol{x}^{(k)}$ は、$\boldsymbol{x}$ 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

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

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

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

One-class SVM

- One-class SVM による新規検知
  - RBF カーネルによる写像後の空間における学習データを正例、原点を負例とみなして境界を得る
  - 新規データに対して、境界の外の場合は異常とみなす