デジタルメディア処理2

担当: 井尻 敬

1

主成分分析(Principal Component Analysis)

これなら分かる応用数学教室(p. 205)

『統計データから互いに無関係の因子を取り出して,観測値をそれらの因子の線 形結合で説明することを主成分分析と呼び,取り出された因子を主成分と呼ぶ』

ディジタル画像処理 (p. 273)

『高次元特徴空間に分散する多数の学習用入力画像から,分布をよく表現できる 低次元の特徴空間を求める手法』

Wikipedia (2018/05/23)

『相関のある多数の変数から相関のない少数で全体のばらつきを最もよく表す主成分と呼ばれる変数を合成する多変量解析の一手法』

デジタルメディア処理2、2018(前期)

4/19 序論: イントロダクション, テクスチャ合成

4/26 特徴検出1 : テンプレートマッチング、コーナー・エッジ検出

5/10 特徴検出2 : DoG特徴量、SIFT特徴量、ハフ変換

5/17 領域分割: 領域分割とは, 閾値法, 領域拡張法, 動的輪郭モデル5/24 領域分割: グラフカット, モーフォロジー処理, Marching cubes

5/31 パターン認識基礎1: パターン認識概論, サポートベクタマシン

6/07 パターン認識基礎2: ニューラルネットワーク、深層学習

6/14 パターン認識基礎3: 主成分分析とオートエンコーダ

6/21 筆記試験 (50点満点)(n点以下の場合レポート出すかも)

6/28 プログラミング演習 1 (基礎的な課題40点, 発展的な課題 20点)

7/05 プログラミング演習 2

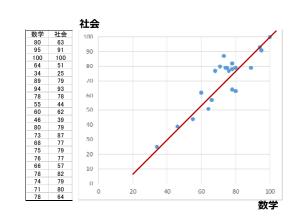
7/12 プログラミング演習 3

7/19 プログラミング演習 4

7/26 プログラミング演習 5

主成分分析

ある21人のテスト点数とその散布図 (横:数学 縦:社会)が下図の通り



数学の点数が良い人は社会でも 良い点だった(**正の相関**)

 $\downarrow \downarrow \downarrow$

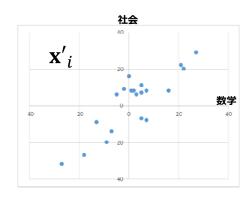
学力をひとつの変数で表したい! 左図のように,点数分布にフィット する直線を考える

※井尻が適当に作った 嘘 データ です

主成分分析

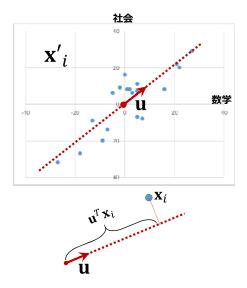
- 入力データ: $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^2$, i = 1, 2, ..., N
- 平均が原点となるよう平行移動する

$$\mathbf{x'}_i = \mathbf{x}_i - \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{x}_i$$



主成分分析

- ある単位ベクトル u を考える
- \mathbf{u} にデータ点を射影した距離の平均は $\frac{1}{N}\sum \mathbf{u}^T\mathbf{x}_i$
- ※この値は0→証明せよ



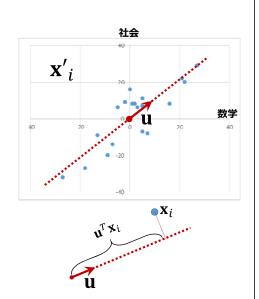
主成分分析

- ある単位ベクトル u を考える
- uにデータ点を射影した距離の2乗平均は

$$\frac{1}{N} \sum_{i} (\mathbf{u}^T \mathbf{x}_i)^2$$

これを最大化する u を探す! ※計算法後述

- →最もデータがばらつく方向が分かる
- →軸uにデータ点を射影した値で「学力」を説明できるのでは?



主成分分析

例) 右表のデータに対して以下の最大化 問題を計算すると...

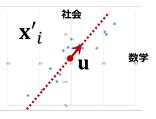
$$\underset{\mathbf{u}}{\operatorname{argmax}} \frac{1}{N} \sum_{i} (\mathbf{u}^{T} \mathbf{x}_{i})^{2}$$

$$\Rightarrow \mathbf{u} = (0.63, 0.78)$$

各データをu に射影する

(数学, 社会) の点が (80, 70)なら, 射影値 = (80-73)*0.63 +(70-71)*0.78 = 105

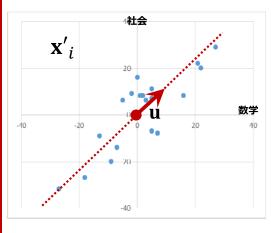
※(数学, 社会) の平均値は(73, 71)



数学	社会	第1主成分		
80	63	-1.7		
95	91	29.6		
100	100	39.8		
64	51	-21.1		
34	25	-60.3		
89	79	16.5		
94	93	30.5		
78	78	8.8		

この射影値を**主成分**と呼び,この例では 『学力』に対応すると考えられる

主成分分析 - 小休止

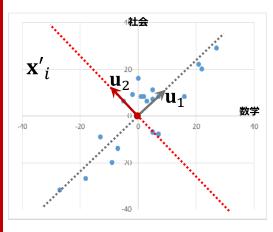


最もばらつきの大きい方向を発見しその 方向にデータを射影して**主成分**を取得し た…

残ってる主な疑問

- → uと直交する方向にもデータはばらついている けど無視していいの?
- → 射影によってデータ量が失われたのでは?
- → ばらつき方向uはどうやって計算するの?

主成分分析 - 第n主成分



データ点のばらつきが最も大きい方向への 射影を**第1主成分**と呼ぶ

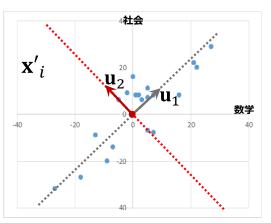
第一主成分軸と直交し、かつ、大きい方向への射影を**第2主成分**と呼ぶ

同様に第n主成分が定義される

例) 左図では・・・

第1主成分(\mathbf{u}_1 への射影)は『学力』を表現 第2主成分(\mathbf{u}_2 への射影)は『文型志向』を表現 ・・・・しているように考えられるかも

主成分分析 - 第n主成分

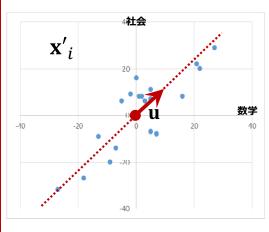


 $\mathbf{u}_1 = (0.63, 0.78)$ $\mathbf{u}_2 = (0.78, -0.63)$

数学	社会		第1主成分	第2主成分	
80	63		-1.7	-10.3	
95	91		29.6	-4.4	
100	100		39.8	-2.6	
64	51		-21.1	-5.4	
34	25		-60.3	1.6	
89	79		16.5	-7.3	
94	93	,	30.5	-2.3	
78	78		8.8	0.7	
55	44		-32.2	-2.8	
60	62		-15.1	4.7	
46	39		-41.8	1.1	
80	79		10.8	-0.2	
73	87		12.6	10.3	
68	77		1.7	7.9	
75	79		7.7	3.7	
76	77		6.7	1.6	
66	57		-15.2	-3.2	
78	82		11.9	3.2	
74	79		7.0	4.4	
71	80		5.9	7.4	
78	64		-2.2	-8.1	
 T—,	74.0			z + En ()	

『統計データから互いに無関係の因子を取り出して, 観測値をそれらの因子の線形結合で説明することを主 成分分析と呼び,取り出された因子を主成分と呼ぶ』 これなら分かる応用数学教室より

主成分分析 - 小休止



最もばらつきの大きい方向を発見しその 方向にデータを射影して**主成分**を取得し た...

残ってる主な疑問

- → uと直交する方向にもデータはばらついている けど無視していいの? → 第n主成分まで考え ればOk
- → 射影によってデータ量が失われたのでは?
- → ばらつき方向uはどうやって計算するの?

主成分分析 -

第1主成分軸の計算

入力点群: $\hat{\mathbf{x}}_i \in R^d, i = 1, 2, ..., N$

平均値: $\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i} \hat{\mathbf{x}}_{i}$

平行移動: $\mathbf{x}_i = \hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{m}$

以下の最大値問題を求めたい

$$\underset{||\mathbf{u}||=1}{\operatorname{argmax}} \sum_{i} (\mathbf{u}^T \mathbf{x}_i)^2$$

主成分分析 -

第1主成分軸の計算

入力点群: $\hat{\mathbf{x}}_i \in R^d, i = 1, 2, ..., N$

平均値: $\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i} \hat{\mathbf{x}}_{i}$

平行移動: $\mathbf{x}_i = \hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{m}$

以下の最大値問題を求めたい

$$\underset{||\mathbf{u}||=1}{\operatorname{argmax}} \sum_{i} (\mathbf{u}^T \mathbf{x}_i)^2$$

準備:

行列 $\mathbf{A} = \sum_{i} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{T} \in R^{d \times d}$ を考えると、この行列は対称行列であり、半正定置性を持つ. (\rightarrow 証明せよ)

Aの固有値を $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_d \ge 0$ とし、長さ1で互いに直交する固有ベクトルを $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_d$ とする.

すると…

$$V^{T}AV = diag(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_d)$$
$$V = (v_1, v_2, ..., v_d)$$

と対角化できる.

主成分分析 –

第1主成分軸の計算

入力点群: $\hat{\mathbf{x}}_i \in R^d, i = 1,2,...,N$

平均値: $\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i} \hat{\mathbf{x}}_{i}$

平行移動: $\mathbf{x}_i = \hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{m}$

以下の最大値問題を求めたい

 $\underset{||\mathbf{u}||=1}{\operatorname{argmax}} \sum_{i} (\mathbf{u}^T \mathbf{x}_i)^2$

コスト関数を以下の通り変形する,

$$\sum_{i} (\mathbf{u}^{T} \mathbf{x}_{i})^{2} = \sum_{i} \mathbf{u}^{T} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{T} \mathbf{u}$$
$$= \mathbf{u}^{T} (\sum_{i} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{T}) \mathbf{u}$$

 $\mathbf{A} = \sum_{i} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{T}$ と置いてさらに変形,

$$\mathbf{u}^{T} A \mathbf{u} = (\mathbf{V} \mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} A (\mathbf{V} \mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

$$= (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} \mathbf{V}^{T} A \mathbf{V} (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

$$= (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d}) (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

$$\leq (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{1}, \dots, \lambda_{1}) (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

$$= \lambda_{1} (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

$$= \lambda_{1}$$

以上より、 $\mathbf{V}^T\mathbf{u} = (1,0,0,\cdots,0)$ のとき、つまり $\mathbf{u} = \mathbf{v}_1$ のとき最大値となる.最大値は λ_1 .

主成分分析 -

第2主成分軸の計算

入力点群: $\hat{\mathbf{x}}_i \in R^d, i = 1, 2, ..., N$

平均值: $\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i} \hat{\mathbf{x}}_{i}$

平行移動: $\mathbf{x}_i = \hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{m}$

以下の最大値問題を求めたい

$$\underset{||\mathbf{u}||=1}{\operatorname{argmax}} \sum_{i} (\mathbf{u}^T \mathbf{x}_i)^2$$

ただし, $\mathbf{u}^T \mathbf{v}_1 = 0$ を満たすものとする

先と同様にコスト関数を変形する,

$$\sum_{i} (\mathbf{u}^{T} \mathbf{x}_{i})^{2} = \mathbf{u}^{T} (\sum_{i} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{T}) \mathbf{u}$$

$$= (\mathbf{V} \mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} \mathbf{A} (\mathbf{V} \mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

$$= (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})^{T} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, ..., \lambda_{d}) (\mathbf{V}^{T} \mathbf{u})$$

ここで条件 $\mathbf{u}^T \mathbf{v}_1 = 0$ より $\mathbf{V}^T \mathbf{u} = (0, u_2, u_3, ...)$ の形をしているので、

$$= (\mathbf{V}^T \mathbf{u})^T \operatorname{diag}(0, \lambda_2, \dots, \lambda_d) (\mathbf{V}^T \mathbf{u})$$

$$\leq (\mathbf{V}^T \mathbf{u})^T \operatorname{diag}(0, \lambda_2, \dots, \lambda_2) (\mathbf{V}^T \mathbf{u})$$

$$= \lambda_2$$

以上より、 $\mathbf{V}^T\mathbf{u} = (0,1,0,\cdots,0)$ のとき、つまり $\mathbf{u} = \mathbf{v}_2$ のとき最大値となる.最大値は λ_2 .

主成分分析 -

第n主成分軸の計算

入力点群: $\hat{\mathbf{x}}_i \in R^d, i = 1, 2, ..., N$

平均値: $\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i} \hat{\mathbf{x}}_{i}$

平行移動: $\mathbf{x}_i = \hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{m}$

以下の最大値問題を求めたい

$$\underset{\mathbf{u}=1}{\operatorname{argmax}} \sum_{i} (\mathbf{u}^{T} \mathbf{x}_{i})^{2}$$

ただし $\mathbf{u}^T \mathbf{v}_1 = \mathbf{u}^T \mathbf{v}_2 = \cdots = \mathbf{u}^T \mathbf{v}_{n-1} = 0$ を満たす

先と同様に計算すると…

u=vnのときに最大値を取ることが分かる.

つまり…

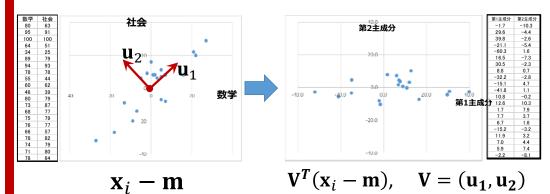
第n主成分の軸方向は、行列 $\mathbf{A} = \sum_i \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{o}$ 第n固有ベクトルと等しくなる.

また行列 Aは、分散共分散行列と呼ばれる

$$\mathbf{A} = \sum_{i} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{T} = \sum_{i} (\hat{\mathbf{x}}_{i} - \mathbf{m}) (\hat{\mathbf{x}}_{i} - \mathbf{m})^{T}$$

※対角成分に各軸方向の分散が並び、非対 角成分に共分散成分が並ぶ

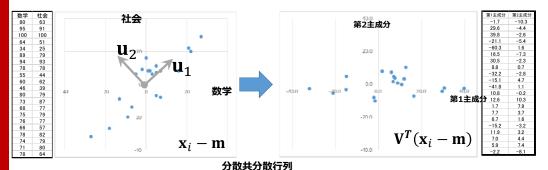
主成分分析 - 分散共分散行列を理解する



得られた第1/2主成分は、ばらつきの大きな軸へ射影したものなので… ⇒ データ点群を平均を中心に回転したと考えてよい

18

主成分分析 - 分散共分散行列を理解する



 $\sum_{i} (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m}) (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m})^{T}$ $= \mathbf{V} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d}) \mathbf{V}^{T}$ $= \begin{pmatrix} 0.63 & 0.78 \\ 0.78 & -0.63 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 552.8 & 0 \\ 0 & 28.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.63 & 0.78 \\ 0.78 & -0.63 \end{pmatrix}^{T}$

 $\sum_{i} \mathbf{V}^{T} (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m}) (\mathbf{V}^{T} (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m}))^{T}$ $= \mathbf{V}^{T} \mathbf{V} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d}) \mathbf{V}^{T} \mathbf{V}$ $= \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d})$ $= \begin{pmatrix} 552.8 & 0 \\ 0 & 28.2 \end{pmatrix}$

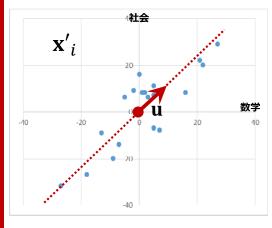
主成分分析 - 分数共分数行列を理解する



 $\sum_{i} (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m}) (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m})^{T}$ $= \mathbf{V} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d}) \mathbf{V}^{T}$ $= \begin{pmatrix} 0.63 & 0.78 \\ 0.78 & -0.63 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 552.8 \\ 0 & 28.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.63 & 0.78 \\ 0.78 & -0.63 \end{pmatrix}^{T}$ 20

 $\sum_{i} \mathbf{V}^{T} (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m}) (\mathbf{V}^{T} (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{m}))^{T}$ $= \mathbf{V}^{T} \mathbf{V} \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d}) \mathbf{V}^{T} \mathbf{V}$ $= \operatorname{diag}(\lambda_{1}, \lambda_{2}, \dots, \lambda_{d})$ $= \underbrace{\begin{pmatrix} 552.8 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 28.2 \end{pmatrix}}$

主成分分析 - 小休止



最もばらつきの大きい方向を発見しその 方向にデータを射影して**主成分**を取得し た…

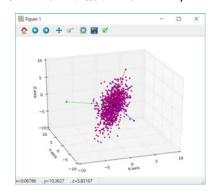
残ってる主な疑問

- uと直交する方向にもデータはばらついている けど無視していいの? → 第n主成分まで考え ればOk
- 射影によってデータ量が失われたのでは?
- ばらつき方向uはどうやって計算するの? →分散共分散行列の固有ベクトルを求めればok

主成分分析 - 次元圧縮への応用

例)

3次元データ点群が下図の通り分布している 分布にはあまり偏りがないため、すべての主成分にデータが含まれる



	points	
x	у	Z
0.86	-2.00	4.57
0.86	0.27	2.78
-1.19	0.73	-4.73
3.22	1.17	4.63
0.33	-1.07	-3.13
0.03	0.49	3.68
2.36	0.51	-1.73
-2.16	-0.07	-0.87
0.42	1.27	0.90
0.15	-1.02	-1.12
0.95	-0.20	0.01
2.26	-0.23	0.81
0.86	0.23	1.87
-2.28	-0.47	-3.74
0.67	-0.14	0.08
0.42	0.58	-0.15

	pca	
1	2	3
-4.74	-0.42	-1.81
-2.94	0.12	0.40
4.85	0.03	0.67
-5.31	1.98	1.28
2.88	1.02	-1.12
-3.60	-0.90	0.68
1.05	2.70	0.43
1.33	-1.91	0.04
-0.99	0.20	1.35
0.98	0.35	-1.00
-0.30	0.88	-0.17
-1.40	1.94	-0.21
-2.06	0.35	0.33
4.13	-1.32	-0.45
-0.29	0.59	-0.10
0.01	0.44	0.63

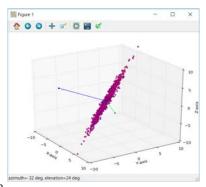
22

PCA PLOT 3D.py

主成分分析 - 次元圧縮への応用

例) 3次元データ点群が下図の通り分布している

データ点は平面に乗っているため,第三主成分には寄与がない.また,第一主成分に多くの情報が寄与する偏った分布になっている



points			pca			
х	у		z	1	2	
1.3	0	-2.07	-2.85	-3.32	1.58	0.0
0.6	1	0.36	1.33	1.45	0.52	0.0
-0.6	5	-0.33	-1.31	-1.30	-0.69	0.0
-1.6	1	-0.71	-3.04	-3.08	-1.63	0.0
-0.3	2	-2.74	-5.81	-6.37	-0.01	0.0
1.0	4	2.45	5.94	6.52	0.67	0.0
-0.4	9	-1.58	-3.66	-3.95	-0.34	0.0
-1.8	5	-0.36	-2.57	-2.53	-1.92	0.0
-0.7	4	-0.73	-2.20	-2.29	-0.73	0.0
0.0	2	2.57	5.16	5.81	-0.40	0.0
0.2	7	1.55	3.36	3.77	0.00	0.0
-0.5	7	-2.86	-6.29	-6.87	-0.24	0.0
-0.5	9	-0.42	-1.42	-1.44	-0.61	0.0
-1.1	5	0.27	-0.61	-0.44	-1.29	0.0
-1.6	2	2.08	2.53	3.13	-2.04	0.0
-0.0	1	1.02	2.02	2.31	-0.22	0.0
0.7	3	-2.72	-4.70	-5.30	1.09	0.0

主成分分析 - 寄与率

n次元データをPCAで圧縮することを考える

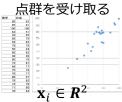
- **k**次元まで圧縮する
- 情報量の欠落を抑えられるいい感じの『**k**』を選択したい (平面に縮退しているような軸は削除しつつも、分散の大きな軸は利用したい)
- → 寄与率を利用する

寄与率 =
$$\frac{k 個 の軸方向の分散}{全軸方向の分散} = \frac{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{N} \lambda_i}$$

例)寄与率が 0.8 以上になる最小のkを選択する

主成分分析 - まとめ

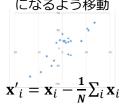
1.入力データ 点群を受け取る



3. 分散共分散行列 を計算し固有解析

$$\mathbf{A} = \sum_{i} (\mathbf{x}_i - \mathbf{m})(\mathbf{x}_i - \mathbf{m})^T$$

2. 平均値が原点 になるよう移動



4. 各点を固有ベクトル に射影し主成分を取得



射影して得られたのが主成分 下例では学力・文系指向を説明 (するかも)

数学	社会	第1主成分	第2主成分
80	63	-1.7	-10.3
95	91	29.6	-4.4
100	100	39.8	-2.6
64	51	-21.1	-5.4
34	25	-60.3	1.6
89	79	16.5	-7.3
94	93	30.5	-2.3
78	78	8.8	0.7
55	44	-32.2	-2.8
60	62	-15.1	4.7
46	39	-41.8	1.1
80	79	10.8	-0.2
73	87	12.6	10.3
68	77	1.7	7.9
75	79	7.7	3.7
76	77	6.7	1.6
66	57	-15.2	-3.2
78	82	11.9	3.2
74	79	7.0	4.4
71	80	5.9	7.4
78	64	-2.2	-8.1

主成分分析の画像処理応用

- 特徴ベクトルの次元圧縮
 - •特徴ベクトル群から寄与率の高い主成分のみ抽出し、低次元化して殻 計算(識別など)を行なう.
 - 情報量をあまり落とさずに、計算量・メモリ量などの削減が可能
- 画像の圧縮・編集・牛成
 - 同じクラスタに属する画像群(例,顔画像)を仮定する
 - 画像群を高次元データと考え主成分を計算
 - →寄与率の高い軸と主成分値のみを記憶する事で圧縮
 - →主成分値を修正して画像を編集
 - →主成分値のみを適当に編集して画像を生成 などなど

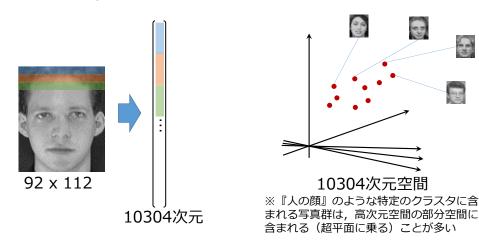
PCAによる画像の次元圧縮

- 例として顔データのPCA圧縮をしてみる
- AT&Tデータセットを利用 http://www.cl.cam.ac.uk/research/dtg/attarchive/facedatabase.html
- 40人*10枚 = 400枚の写真群 (PCAするには少し小さい)
- サイズは 92 x 112



PCAによる画像の次元圧縮

• 92 x 112 pixelの写真を, 10304次元ベクトルに変換

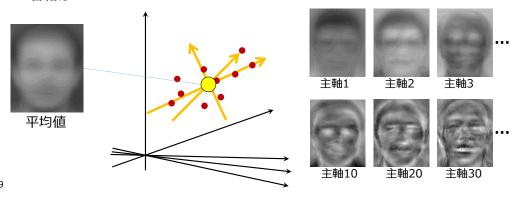


PCAによる画像の次元圧縮

- 分散共分散行列は10304 x 10304に
- 400個の固有値・固有ベクトルが取得できる

 $%\sum_{i}(\mathbf{x}_{i}-\mathbf{m})(\mathbf{x}_{i}-\mathbf{m})^{T}$ のrankは最大でN=400なので次元数分の軸は得られない

• 各軸は



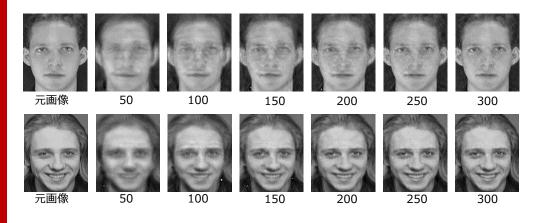
PCAによる画像の次元圧縮

- PCAは軸変換なので, 平均値 + ∑ 軸 * 係数 で元画像を再構築できる
- 係数が主成分
- 後半の主成分は寄与が少ない(はず)ので、切り捨てても影響が少ない(のでは?)



PCAによる画像の次元圧縮

• 実際に50個, 100個, …, 300個の主成分を利用して再構築してみた



顔の向きもそろっているデータを利用するともっと速く寄与率が減少すると思う。

主成分分析 - まとめ

主成分分析とは…

これなら分かる応用数学教室(p. 205)

『統計データから互いに無関係の因子を取り出して,観測値をそれらの因子の線形結合で説明することを主成分分析と呼び,取り出された因子を主成分と呼ぶ』

ディジタル画像処理 (p. 273)

『高次元特徴空間に分散する多数の学習用入力画像から,分布をよく表現できる低次元の特徴空間を求める手法』

Wikipedia (2018/05/23)

『相関のある多数の変数から相関のない少数で全体のばらつきを最もよ ₃ 〈表す主成分と呼ばれる変数を合成する多変量解析の一手法』

オートエンコーダ 自己符号化器

参考資料

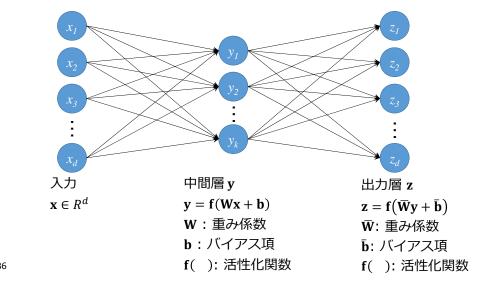


- 深層学習
- (機械学習プロフェッショナルシリーズ) 単行本
- 岡谷 貴之

オートエンコーダー(自己符号化器)とは

- ニューラルネットの一種
- •目的出力を伴わない入力だけの訓練データを利用した教師なし学習
- データをよく表す特徴の獲得を目指す

概要:下図のようなネットワークを考える



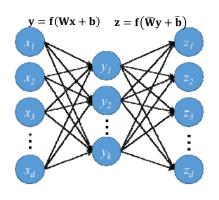
オートエンコーダの概要

- N個の入力データ $x_i \in R^d$
- 全入力 x_i に対し,その出力 z_i がなるべく等しくなるよう重み・バイアス項を学習する
- つまりデータx_iから, W, b, W̄, b̄を学習

※中間層の次元がdより小さい場合, $\mathbf{x}_i = \mathbf{z}_i$ を必ず満たすことは不可能

• 全データに対して,入力と近い出力が得られるような学習が行えたら…

 \rightarrow 元データ \mathbf{x}_i の情報をあまり落とさずに次元削減ができたことになる



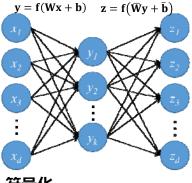
オートエンコーダの概要

- N個の入力データ $x_i \in R^d$
- 全入力 \mathbf{x}_i に対し,その出力 \mathbf{z}_i がなるべく等しくなるよう重み・バイアス項を学習する
- つまりデータx;から、W,b,W,bを学習

※中間層の次元がdより小さい場合, $\mathbf{x}_i = \mathbf{z}_i$ を必ず満たすことは不可能

• 全データに対して,入力と近い出力が得られるような学習が行えたら…

 \rightarrow 元データ \mathbf{x}_i の情報をあまり落とさずに次元削減ができたことになる



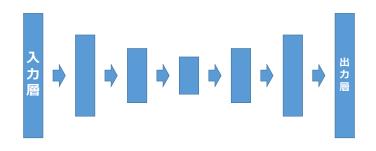
符号化

 $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})$

複合化

 $\mathbf{z} = \bar{\mathbf{f}} \big(\bar{\mathbf{W}} \mathbf{y} + \bar{\mathbf{b}} \big)$

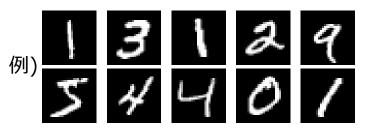
多層自己符号化器



- •中間層と出力層のみでなく、複数の層を積み重ねた自己符号化器
- 複雑な分布を持ったデータの特徴抽出に利用される

自己符号化器の例

- Mnist: URL: http://yann.lecun.com/exdb/mnist/
 - パターン認識の勉強によく利用される**手書き数字画像**データセット
 - 数字は画像の中心に配置され、数字のサイズは正規化されている
 - 各画像のサイズは 28x28
 - データ数: トレーニング用:60000文字 / テスト用:10000文字



ე.

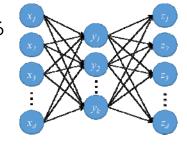
自己符号化器の例

• Mnist を自己符号化器で符号化してみる

• データの次元: 784 = 28x28

・中間層の次元:30・訓練データ数:60000・活性化関数:恒等関数

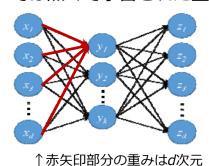
• epochs=50, batch size=20



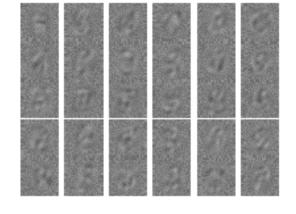


自己符号化器の例

•自己符号化器を利用したときの興味は、戻せたかどうか? では無くて学習された重み係数(特徴量)



これを画像に直すと…



_

まとめ

- •オートエンコーダ(自己符号化器)とは…
 - 入力データになるべく似たデータを出力するニューラルネット
 - 目的出力を伴わない入力だけの訓練データを利用した教師なし学習
 - データをよく表す特徴の獲得を目指す
 - バイアス項 b=0, 活性化関数を恒等写像とした場合主成分分析と実質的に同じ
- 応用例
 - 次元圧縮
 - 深層学習の前処理に利用