Scalaで実装するパターン認識と機械学習

JOURNAL OF HAMRADIO INFORMATICS LETTERS THE UNIVERSITY OF TOKYO AMATEUR RADIO CLUB

No. 3

2024年8月15日

無線部開発班 川勝孝也

nextzlog.dev

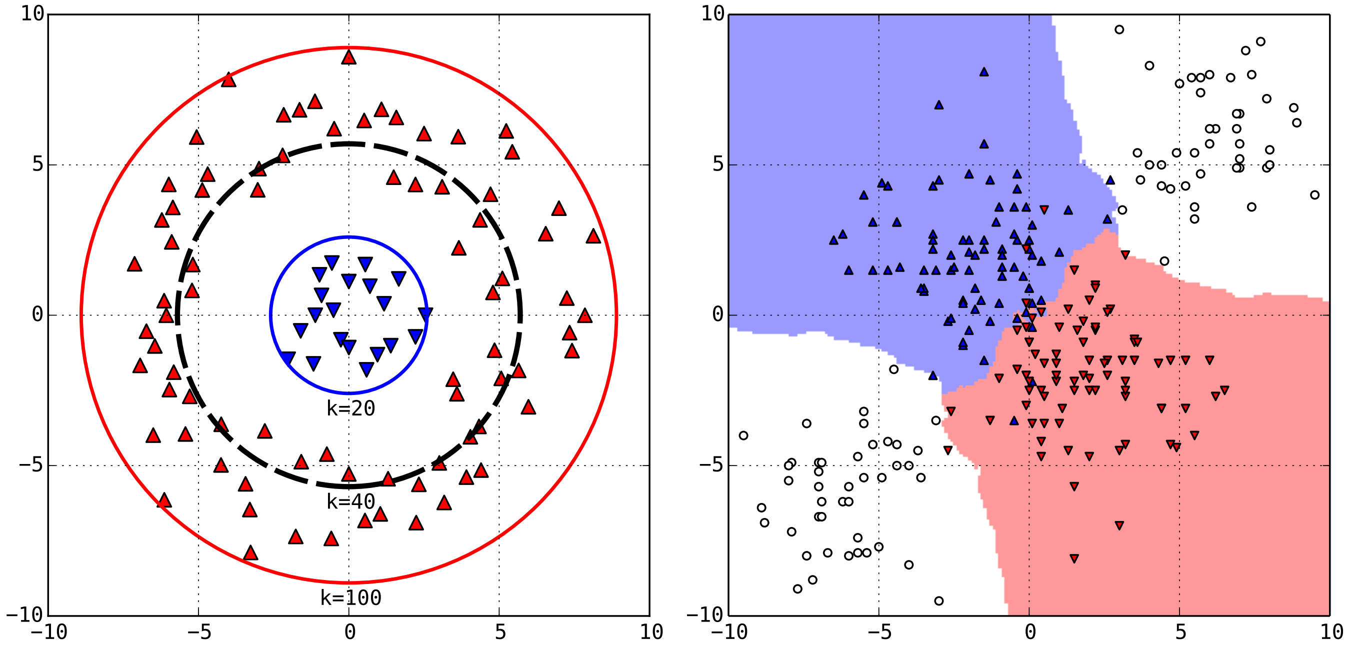
目次

第1章　初歩的な機械学習モデル

機械学習とは、説明変数 $\boldsymbol{x}$ と目的変数 $\boldsymbol{y}$ の組 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ の集合 $\mathbb{T}$ から、変数 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ の関係を表す関数 f を推定する方法である。集合 $\mathbb{T}$ が、関数 f の取る値 $\boldsymbol{y}$ を具体的に列挙する場合は、その問題を**教師あり学習**と呼び、集合 $\mathbb{T}$ を**教師データ**と呼ぶ。

$$\forall \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\colon\ (\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in \mathbb{T} \Rightarrow \boldsymbol{y} \approx f(\boldsymbol{x}). \tag{1.1}$$

教師あり学習で、目的変数 $\boldsymbol{y}$ が、**クラス**と呼ばれる離散値を取る場合を**分類**と呼ぶ。その初歩的な例が**最近傍法**である。最近傍法では、未知の点 $\boldsymbol{x}$ のクラスは、$\boldsymbol{x}$ の至近距離にある既知の K 個の点の多数決で決まる。Fig. 1.1(a) に例を示す。



(a) k nearest neighbor diameters.　(b) $k = 10$ region segmentation.

Fig. 1.1: k nearest neighbor model.

Fig. 1.1(b) は、各々が正規分布に従う 3 クラスの点の集合を学習し、空間全体をそれらのクラスに分類した結果である。最近傍法では、適当な距離関数 d を使う。距離関数 d は、式 (1.2) の**距離の公理**を満たし、任意の 2 点の距離を定義する。

$$\forall \boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^D : 0 \le d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = d(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) \le d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}) + d(\boldsymbol{z},\boldsymbol{y}),\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \Leftrightarrow d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = 0. \tag{1.2}$$

最近傍法は、他の著名な教師あり学習の手法と比較して、事前の学習が不要である点が特徴的で、**遅延学習**と呼ばれる。以上の議論に基づき、最近傍法を実装しよう。引数は、参照する近傍点の個数 K と、集合 $\{\boldsymbol{x},y\}$ と、距離関数 d である。

```scala
class KNN[D,T](k: Int, data: Seq[(D,T)], d: (D,D)=>Double) {
  def apply(x: D) = data.sortBy((p,t)=>d(x,p)).take(k).groupBy((p,t)=>t).maxBy((g,s)=>s.size)._1
}
```

使用例を以下に示す。距離関数の例として、初等幾何学の基礎であるユークリッド距離や**マンハッタン距離**を使用した。後者は、座標の差の絶対値の総和を距離とする。距離関数の最適な選択肢は、分類対象の問題の性質に応じて変化する。

```scala
val samples2d = Seq.fill(100)(Seq.fill(2)(util.Random.nextGaussian) -> util.Random.nextBoolean)
val euclidean = new KNN(5, samples2d, (a,b) => math.sqrt(a.zip(b).map((a,b)=>(a-b)*(a-b)).sum))
val manhattan = new KNN(5, samples2d, (a,b) => a.zip(b).map(_-_).map(_.abs).sum)
```

1.1 線型回帰

教師あり学習で、目的変数 $\boldsymbol{y}$ が連続な値を取る場合を**回帰**と呼ぶ。その代表的な例が、**線型回帰**である。式 (1.3) に示す。適当な基底関数 ϕ の線型結合である。基底関数は、関数 f の形に応じて選ぶ。例えば、多項式基底やガウス基底を使う。

$$\boldsymbol{y} + \varepsilon \approx f(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=0}^{K} w_k \phi_k(\boldsymbol{x}) = {}^t\boldsymbol{w}\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}). \tag{1.3}$$

基本的に、変数 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ は誤差 ε を含む。例えば、映像や音声信号には、式 (1.4) に示す、分散 σ^2 の**ガウスノイズ**が重畳する。

$$y \sim \mathcal{L}(f) = p\left(y \,|\, \boldsymbol{x}, f\right) = \mathcal{N}\left(y \,\middle|\, f(\boldsymbol{x}), \sigma^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(y - f(\boldsymbol{x}))^2}{2\sigma^2}\right\}. \tag{1.4}$$

式 (1.4) の確率は、確率 f の妥当性と見做せる。これを**尤度**と呼ぶ。尤度の最大値を探せば、最適な関数 $\hat{f}$ が推定できる。これを**最尤推定**と呼び、機械学習の基本原理である。尤度の対数から、式 (1.5) が導出される。関数 E を 2 乗誤差と呼ぶ。

$$\hat{f} = \arg\max_f \log p\left(y \,|\, \boldsymbol{x}, f\right) = \arg\min_f \left\{y - f(\boldsymbol{x})\right\}^2 = \arg\min_f E(\boldsymbol{w}). \tag{1.5}$$

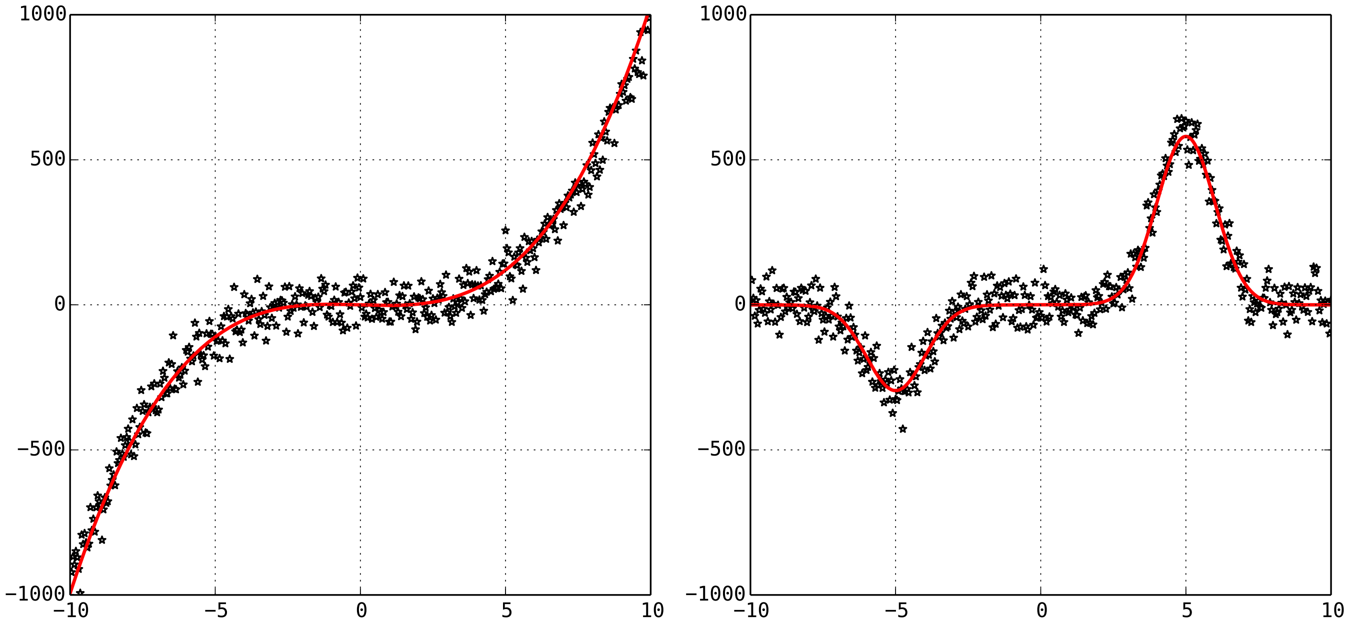
誤差 E を削減する方向に加重 $\boldsymbol{w}$ を動かす操作を繰り返すと、極小点に収束する。これを**勾配法**と呼ぶ。式 (1.6) に示す。

$$\hat{\boldsymbol{w}} = \boldsymbol{w} - \eta \nabla E(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w} + \eta \sum_{n=1}^{N} \left\{y_n - {}^t\boldsymbol{w}\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_n)\right\}\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_n), \quad \text{where} \ \ \eta \ll \left|\frac{\boldsymbol{w}}{\nabla E(\boldsymbol{w})}\right|. \tag{1.6}$$

定数 η を**学習率**と呼ぶ。以上の議論に基づき、線型回帰を実装する。引数は、学習率 η と、集合 $\{x, y\}$ と、基底 Φ である。

```
class Regression(e: Double, data: Seq[(Double,Double)], p: Seq[Double=>Double], epochs: Int = 1000) {
  val w = Array.fill[Double](p.size)(0)
  def apply(x: Double) = w.zip(p.map(_(x))).map(_ * _).sum
  for(n <- 1 to epochs; (x,y) <- data) w.zip(p).map(_ + e * (y - this(x)) * _(x)).copyToArray(w)
}
```

Fig. 1.2 は、多項式基底とガウス基底を利用して、各々の基底に適した形状の曲線に対し、線型回帰を行った結果である。



(a) $\{x^3, x^2, x, 1\}$ (b) $G(x|\pm 5, 1)$

Fig. 1.2: linear basis function model.

なお、加重 $\boldsymbol{w}$ は最適化されたが、基底関数 Φ 自体は最適化されず、**ハイパーパラメータ**として扱った点に注意を要する。

1.2 単純ベイズ分類器

自然言語で記述された記事の話題を分類する問題を考える。記事 d は単語 w_n の列であり、単語は話題 c から生成される。記事 d の内容を話題 c と仮定する。この仮説の尤度は、単語の共起を無視すれば、式 (1.7) の条件付き確率で定義される。

$$\mathcal{L}(c) = P(d \mid c) = P(w_1, \ldots, w_{N_d} \mid c) = \prod_{n=1}^{N_d} P(w_n \mid c, w_1, ..., w_{n-1}) \simeq \prod_{n=1}^{N_d} P(w_n \mid c). \tag{1.7}$$

最適な話題 $\hat{c}$ は、式 (1.8) の条件付き確率を最大化する。確率 $P(c)$ は記事 d とは独立した確率で、**事前確率**と呼ばれる。式 (1.8) は、記事 d を観測した後の話題 c の確率で、これを**事後確率**と呼ぶ。式 (1.8) の変形は、**ベイズの定理**を使った。

$$\hat{c} = \arg\max_c P(c \mid d) = \arg\max_c \frac{P(c)\, P(d \mid c)}{P(d)} = \arg\max_c P(c)\, P(d \mid c) = \arg\max_c P(c) \prod_{n=1}^{N_d} P(w_n \mid c). \tag{1.8}$$

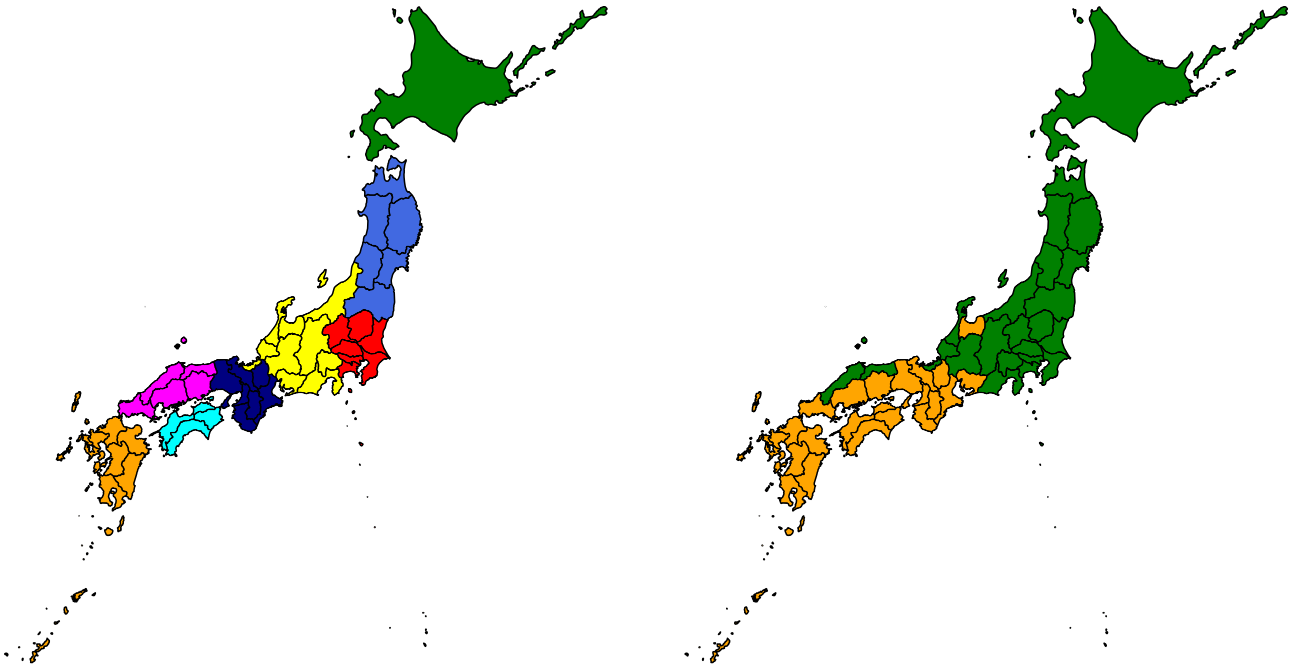
ただし、初めて出現した単語 w に対して、式 (1.8) の確率が 0 になる事態を防ぐため、式 (1.9) の**ラプラス平滑化**を行う。

$$P(w \mid c) = \frac{P(w, c)}{P(c)} \simeq \frac{N_{wc} + 1}{N_c + 1} > 0, \Leftarrow P(w) = \frac{1}{|V|}, \quad \text{where} \;\; N_c = \sum_{w \in V} N_{wc}. \tag{1.9}$$

変数 N_{wc} は、組 (w, c) の頻度である。式 (1.9) は、単語 w の事前確率を第 5 章で学ぶディリクレ分布と仮定して導かれる。式 (1.8) の分類器を**単純ベイズ分類器**と呼ぶ。以下に実装を示す。引数は、既知の記事の列と、対応する話題の列である。

```scala
class NaiveBayes[D<:Seq[W],W,C](texts: Seq[D], classes: Seq[C]) {
  val nw = scala.collection.mutable.Map[(W,C),Double]().withDefaultValue(1)
  val pc = classes.groupBy(identity).map(_ -> _.size.toDouble / texts.size)
  def pwc(c: C)(w: W) = nw(w,c) / texts.flatten.distinct.map(nw(_,c)).sum
  def pcd(d: D)(c: C) = math.log(pc(c)) + d.map(pwc(c)).map(math.log).sum
  def apply(d: D) = classes.distinct.maxBy(pcd(d))
  for((d,c) <- texts.zip(classes); w <- d) nw(w,c) += 1
}
```

Fig. 1.3(a) は、百科事典で各地方の記事から固有名詞を抽出して学習し、都道府県の記事の地方を推定した結果である。



(a) 8-regional division. (b) 2-regional division.

Fig. 1.3: Japanese map division into regions based on classification of Wikipedia pages.

Fig. 1.3(b) は、東日本と西日本の記事を学習して、都道府県を分類した結果である。単純だが、高精度な分類ができる。

第2章　ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークは、線型回帰に似た**ニューロン**と呼ばれる関数を連結して、連鎖構造にした複雑な関数である。単体のニューロンは、線型回帰の後に、**活性化関数**と呼ばれる非線型な関数 f を適用した関数で、式 (2.1) で定義される。

$$\boldsymbol{y} \simeq f(\boldsymbol{z}) = f(W\boldsymbol{x}). \tag{2.1}$$

単体では、線型回帰と同じ程度の表現能力だが、何層も重ねることで、任意の**滑らかな関数**を任意の精度で近似できる。循環構造がなく、直線的な構造の**順伝播型**の動作は、式 (2.2) の漸化式で定義できる。循環構造の場合は第 2.5 節で扱う。

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{x}_{n+1} = f_n(\boldsymbol{z}_n) = f_n(W_n\boldsymbol{x}_n). \tag{2.2}$$

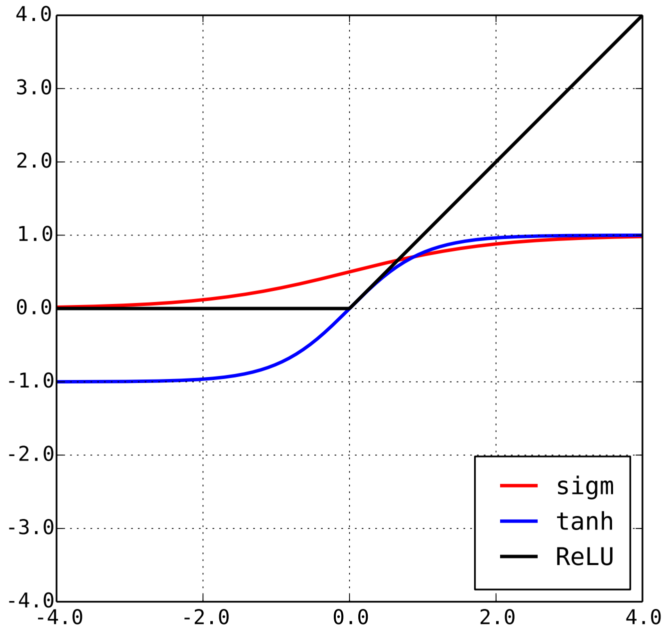
式 (2.2) で、第 n 層は前の層から値 $\boldsymbol{x}_n$ を受容し、行列 W_n で加重して活性化関数 f_n を適用し、後続の層に値 $\boldsymbol{y}_n$ を渡す。活性化関数には、**シグモイド関数**が広く利用される。式 (2.3) に定義する。これは、2 クラスの分類器のように振る舞う。

$$f_{\mathrm{sigm}}(z) = \frac{1}{1+e^{-z}} = \frac{1}{2}\tanh\frac{z}{2} + \frac{1}{2}. \tag{2.3}$$

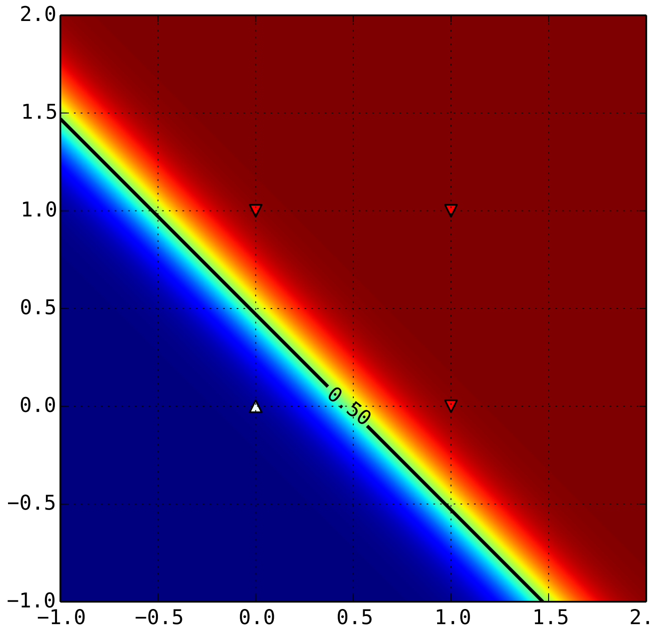
代表的な活性化関数の例を Fig. 2.1(a) に示す。他には、式 (2.4) に示す**ソフトマックス関数**も特に最終層で利用される。

$$y \sim \hat{p}(y) = f_{\mathrm{smax}}(\boldsymbol{z}) = \frac{1}{e^{z_1} + \cdots + e^{z_K}} \begin{pmatrix} e^{z_1} \\ \vdots \\ e^{z_K} \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

最終層の活性化関数を適切に選ぶと、回帰や分類など、様々な問題に対応できる。特に分類問題の例は第 2.3 節に述べる。Fig. 2.1(b) は、活性化関数にシグモイド関数を利用し、論理和を求める例である。直線 $f(\boldsymbol{x}) = 0.5$ は分類の境界を表す。



(a) activation functions.



(b) OR learned by neuron.

Fig. 2.1: neuron mechanism.

論理和や論理積は、分類の境界が直線や超平面となる単純な問題で、これを**線型分離可能**と呼び、単層でも表現できる。第 2 章で学ぶ誤差逆伝搬法は、多数の層を訓練して、線型分離が困難な問題に適合させる**深層学習**を支える技法である。

2.1 誤差逆伝播法の理論

深層学習では、多数の層の加重を最適化して、誤差 E を最小化する。最適解の計算は困難なので、逐次的に最適化する。具体的な手順は、以下の通りである。まず、第 n 層の加重 W_n を最適化の対象とし、式 (2.5) に示す勾配法で最適化する。

$$w_n'^{ij} = w_n^{ij} - \eta \frac{\partial E}{\partial w_n^{ij}} = w_n^{ij} - \eta \frac{\partial z_n^j}{\partial w_n^{ij}} \frac{\partial x_{n+1}^j}{\partial z_n^j} \frac{\partial E}{\partial x_{n+1}^j} = w_n^{ij} - \eta x_n^i \frac{\partial f}{\partial z_n^j}(z_n^j) \frac{\partial E}{\partial x_{n+1}^j}. \tag{2.5}$$

定数 η は学習率で、変数 x_n^i, z_n^j は、変数 $\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{z}_n$ の第 i, j 成分である。さて、式 (2.2) から式 (2.6) の漸化式が導出される。式 (2.6) の漸化式を利用して、誤差 E を逆方向に伝播させ、式 (2.5) の最適化を各層で行う。これを**誤差逆伝播法**と呼ぶ。

$$\frac{\partial E}{\partial x_n^i} = \sum_{j=1}^{J} \frac{\partial z_n^j}{\partial x_n^i} \frac{\partial x_{n+1}^j}{\partial z_n^j} \frac{\partial E}{\partial x_{n+1}^j} = \sum_{j=1}^{J} w_n^{ij} \frac{\partial f}{\partial z_n^j}(z_n^j) \frac{\partial E}{\partial x_{n+1}^j}. \tag{2.6}$$

漸化式の初期値を考える。2 乗誤差関数 E_{sq} を仮定すると、最終層の値 $\hat{\boldsymbol{y}}$ と目的変数 $\boldsymbol{y}$ に対し、導関数は式 (2.7) になる。

$$\frac{\partial E_{\mathrm{sq}}}{\partial \hat{y}^j} = \frac{\partial}{\partial \hat{y}^j} \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \right\|^2, \quad \text{where} \quad E_{\mathrm{sq}}(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \right\|^2. \tag{2.7}$$

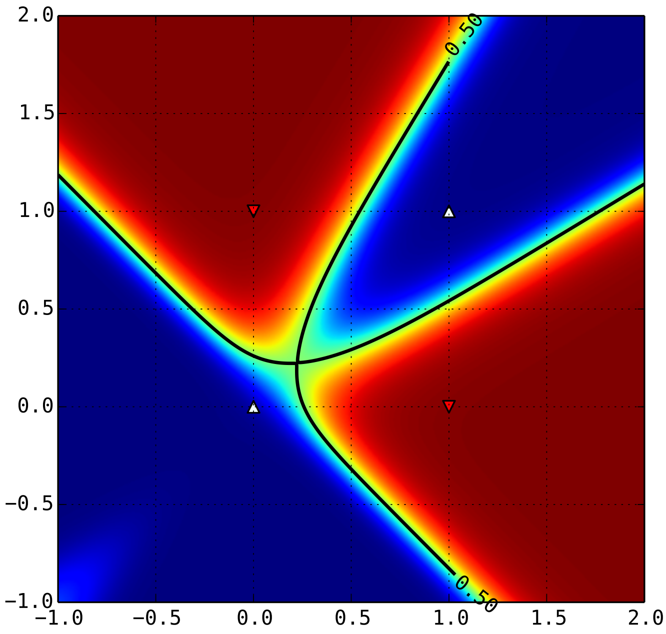
式 (2.6) には、活性化関数の微分が含まれるが、活性化関数は巧妙に設計されており、実に単純な四則演算で計算できる。

$$\frac{\partial f_{\mathrm{sigm}}}{\partial z_n^j}(z_n^j) = \frac{e^{-z_n^j}}{(1 + e^{-z_n^j})^2} = x_{n+1}^j (1 - x_{n+1}^j). \tag{2.8}$$

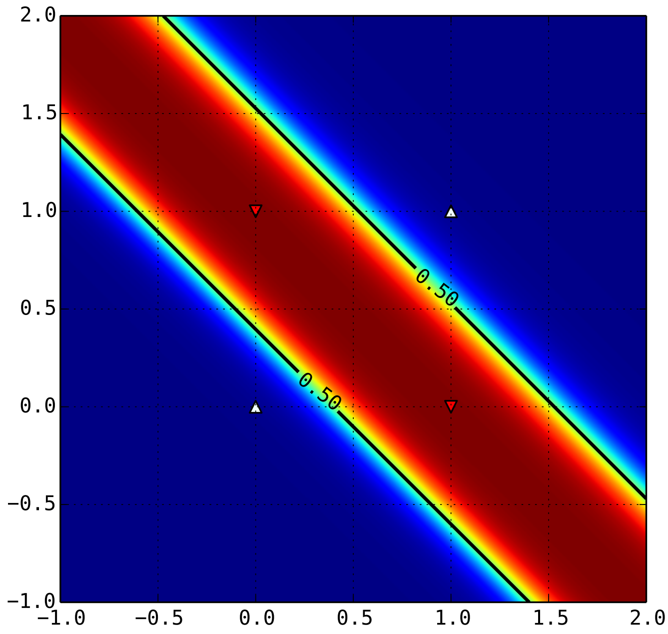
第 2.2 節では、誤差逆伝播法を備えると同時に、自在に層構造を定義可能な深層学習を実装する。利用方法を以下に示す。

```scala
val model3 = new Output(1, _-_)
val model2 = new Offset(3, new Sigmoid, ()=>new PlainSGD, model3)
val model1 = new Offset(2, new Sigmoid, ()=>new PlainSGD, model2)
for(n <- 1 to 1000000; x <- 0 to 1; y <- 0 to 1) model1.bp(Seq(x,y), Seq(x^y))
```

複数の非線型変換を持つ恩恵で、線型分離が困難な分類問題にも対応できる。具体例として、排他的論理和を学習する。通常の結果を Fig. 2.2(a) に、各層の変数 $\boldsymbol{x}$ に定数項を含む場合の結果を (b) に示す。定数項の有無で、境界が変化した。



(a) Hidden + Hidden.



(b) Offset + Offset.

Fig. 2.2: exclusive OR learned by a three-layer perceptron.

ぜひ実装して、学習の途中経過を観察しよう。また、加重の初期値によって、収束までの時間が変わる様子も観察できる。

2.2 誤差逆伝播法の実装

以上の数式を実装し、誤差 E を逆伝播させ、最終層から最初層まで逐次的に最適化しよう。最初に、勾配法を定義する。

```
abstract class SGD(var w: Double = math.random) extends (Double => Unit)
```

これは、加重 w の抽象化であり、式 (2.5) による最適化も行う。具体的な最適化の手順は、勾配法を継承して実装する。

```
class PlainSGD(e: Double = 0.01) extends SGD {
  def apply(dE: Double): Unit = this.w -= e * dE
}
```

引数は、学習率 η である。学習時は、誤差 E の勾配 ∇E を受け取り、加重 w を修正する。次に、活性化関数を定義する。

```
trait Act {
  def fp(z: Seq[Double]): Seq[Double]
  def bp(y: Seq[Double]): Seq[Double]
}
```

活性化関数は、順伝播と逆伝播を行う。以下に、具体的な実装例を示す。順伝播は式 (2.3) に、逆伝播は式 (2.8) に従う。

```
class Sigmoid extends Act {
  def fp(z: Seq[Double]) = z.map(z => 1 / (1 + math.exp(-z)))
  def bp(z: Seq[Double]) = this.fp(z).map(y => y * (1.0 - y))
}
```

次に、層を定義する。加重と活性化関数を持ち、順伝播と逆伝播を行う中間層と、誤差関数を計算する最終層が派生する。

```
abstract class Neuron(val dim: Int) {
  def fp(x: Seq[Double]): Seq[Double]
  def bp(x: Seq[Double], t: Seq[Double]): Seq[Double]
}
```

最終層を実装する。引数は、最終層が出力する値の要素数と、誤差の導関数である。誤差関数は、**損失関数**とも呼ばれる。

```
class Output(dim: Int = 1, loss: (Double,Double)=>Double = _-_) extends Neuron(dim) {
  def fp(x: Seq[Double]) = x
  def bp(x: Seq[Double], t: Seq[Double]) = x.zip(t).map(loss.tupled)
}
```

中間層も実装する。引数は、中間層が受け取る値の要素数と、活性化関数と、加重を生成する関数と、後続の層である。

```
class Hidden(dim: Int, act: Act, weight: ()=>SGD, next: Neuron) extends Neuron(dim) {
  lazy val w = List.fill(next.dim, dim)(weight())
  def fp(x: Seq[Double]) = next.fp(act.fp(wx(x)))
  def wx(x: Seq[Double]) = w.map(_.map(_.w).zip(x).map(_ * _).sum)
  def bp(x: Seq[Double], t: Seq[Double]) = ((z: Seq[Double]) => {
    val bp = next.bp(act.fp(z),t).zip(act.bp(z)).map(_ * _)
    for((w,g) <- w.zip(bp); (sgd,x) <- w.zip(x)) sgd(x * g)
    w.transpose.map(_.zip(bp).map(_.w * _).sum)
  })(wx(x))
}
```

最後に、定数項を実装する特殊な中間層も実装する。仕組みは単純で、中間層が受け取る値に定数 1 の要素を追加する。

```
class Offset(dim: Int, act: Act, weight: ()=>SGD, next: Neuron) extends Neuron(dim) {
  lazy val body = new Hidden(dim + 1, act, weight, next)
  def fp(x: Seq[Double]) = body.fp(x.padTo(dim + 1, 1d))
  def bp(x: Seq[Double], t: Seq[Double]) = body.bp(x.padTo(dim + 1, 1d), t).init
}
```

2.3 ソフトマックス関数

多クラス分類の問題では、最終層の活性化関数に式 (2.4) のソフトマックス関数とし、各クラスの確率分布 p を学習する。誤差関数には、式 (2.9) の**交差エントロピー**を使う。式 (2.9) の $H(p)$ は、確率分布 p の不偏性を表す**平均情報量**である。

$$E_{\mathrm{CE}}(p,\hat{p}) = -\int p\left(\boldsymbol{y}\right)\log\hat{p}\left(\boldsymbol{y}\right)d\boldsymbol{y} = -\int p\left(\boldsymbol{y}\right)\left\{\log p\left(\boldsymbol{y}\right) - \log\frac{p\left(\boldsymbol{y}\right)}{\hat{p}\left(\boldsymbol{y}\right)}\right\}d\boldsymbol{y} = H(p) + D(p\|\hat{p}) \geq D(p\|\hat{p}). \tag{2.9}$$

式 (2.10) の $D(p\|\hat{p})$ を**カルバック・ライブラー情報量**と呼ぶ。これは非負で、確率分布 $p,\hat{p}$ が等価な場合に限り 0 になる。式 (2.10) から確率分布 $\hat{p}$ の項を抽出すると、分布 $\hat{p}$ の対数の期待値である。また、分布 $\hat{p}$ は各層の加重 W_n の尤度である。

$$D(p\|\hat{p}) = \int_K p\left(y\right)\log\frac{p\left(y\right)}{\hat{p}\left(y\right)}dy \geq \int_K p\left(y\right)\left(1-\frac{\hat{p}\left(y\right)}{p\left(y\right)}\right)dy = 0. \tag{2.10}$$

分類器が推定する確率分布 $\hat{p}$ を真の確率分布 p に近付けるには、式 (2.9) を最小化し、間接的に式 (2.10) を最小化する。これは、尤度 $\hat{p}$ の対数の期待値の最大化に相当し、即ち最尤推定である。例えば、最終層では式 (2.11) の勾配法を行う。

$$\frac{\partial E_{\mathrm{CE}}}{\partial z^k} = -\frac{\partial}{\partial z^k}\sum_{i=1}^{K} y^i\left(\log e^{z^i} - \log\sum_{j=1}^{K} e^{z^j}\right) = -y^k + \sum_{i=1}^{K} y^i\hat{y}^k = -y^k + \hat{y}^k. \tag{2.11}$$

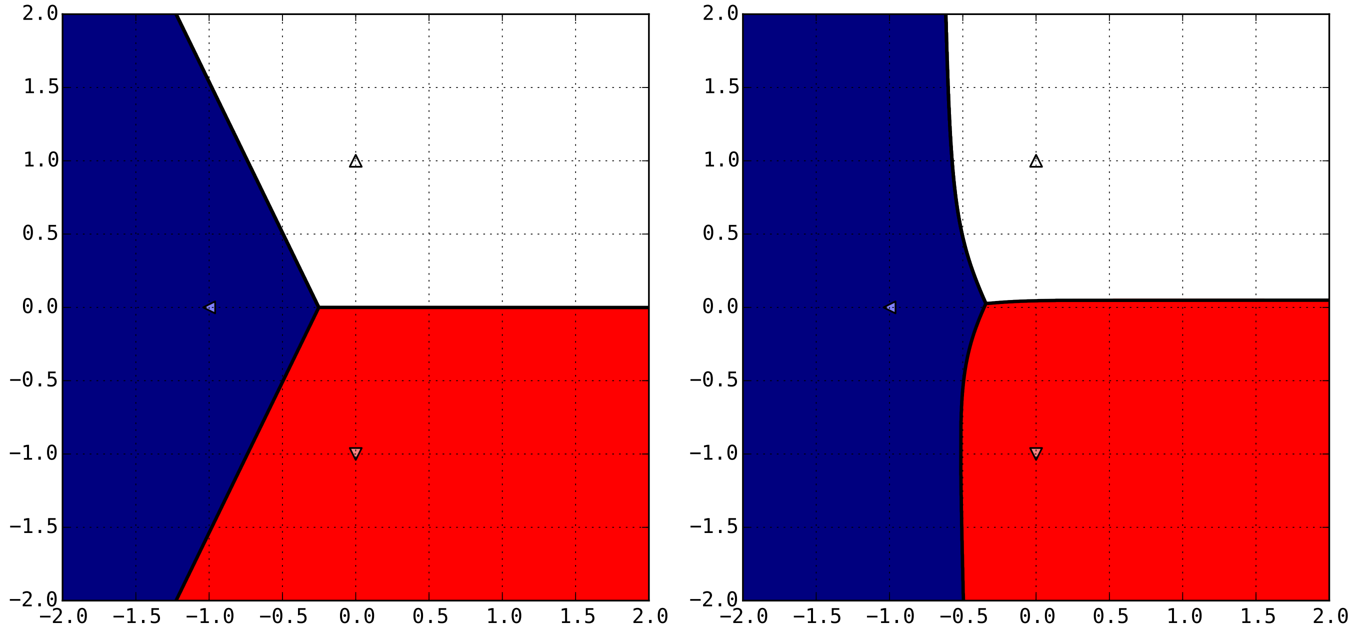
以上の議論を踏まえ、式 (2.4) の順伝播と式 (2.11) の勾配計算を実装する。この活性化関数は、最終層でのみ使用できる。

```
class Softmax extends Act {
  def fp(z: Seq[Double]) = z.map(math.exp(_)/z.map(math.exp).sum)
  def bp(z: Seq[Double]) = Seq.fill(z.size)(1.0)
}
```

勾配 $\nabla f(\boldsymbol{z})$ の計算を誤魔化したので、中間層で使うと、逆伝播が妨害される。その点に目を瞑れば、簡単に実装できた。

```
val model = new Offset(3, new Softmax, ()=>new PlainSGD, new Output(3, _-_))
```

Fig. 2.3 は、チェコ共和国の国旗を学習する例である。意匠が直線的なので、単層の方が多層より正確な旗を学習できる。



(a) 2-layer perceptron　　(b) 3-layer perceptron

Fig. 2.3: Czech flag learned by a perceptron.

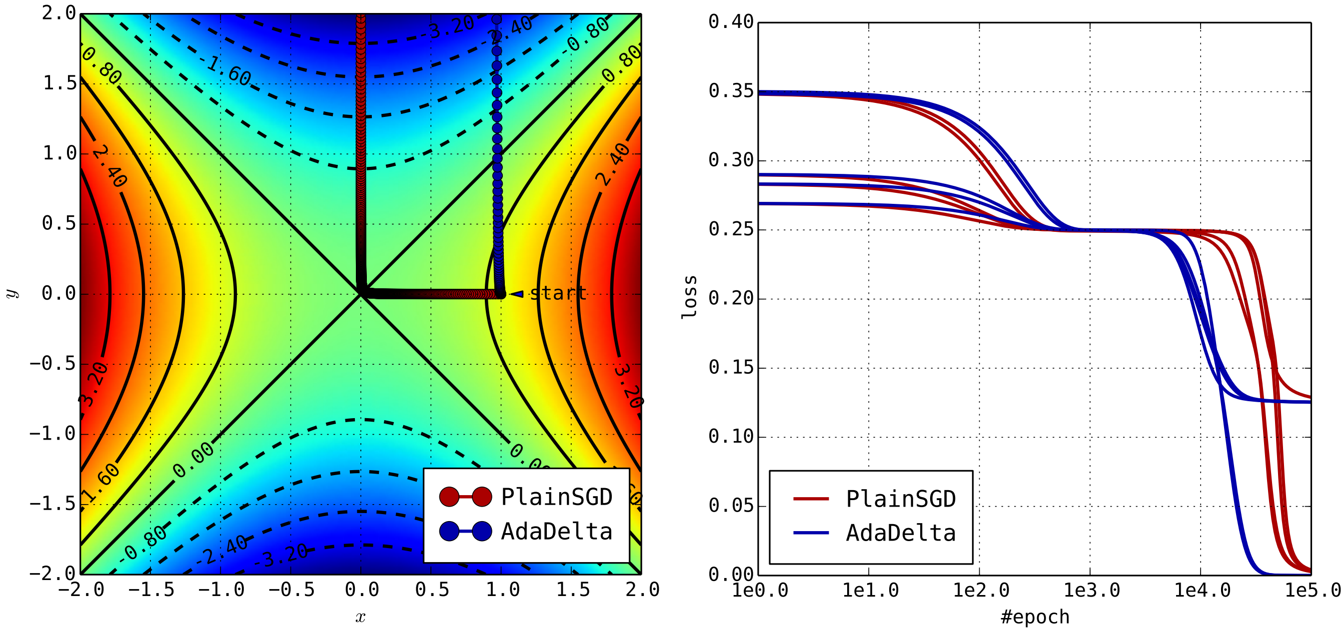
層を増やすと、表現能力は高まるが、第 2.4 節でも述べる通り、学習が停滞しやすく、却って精度が低下する場合がある。

2.4 鞍点と学習率の調整

勾配法には、最適解に到達する前に**鞍点**で最適化が停滞する場合がある。式 (2.12) に示す関数 E の最小化の例で考える。鞍点とは、ある方向では極大値だが、別の方向では極小値となる停留点である。関数 E の場合は、原点 $\boldsymbol{O}$ が鞍点である。

$$\Delta E = \frac{\partial f}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial f}{\partial y}\Delta y = 2x\Delta x - 2y\Delta y, \quad \text{where} \;\; E(x,y) = x^2 - y^2. \tag{2.12}$$

原点 $\boldsymbol{O}$ に嵌ると、Fig. 2.4(a) のように最適化が止まる。しかし、$y \neq 0$ に動けば、勾配が負になり、最適化を再開できる。鞍点は頻繁に現れる。Fig. 2.4(b) は、5 通りの初期値で排他的論理和を学習した際の誤差 E_{sq} の推移で、停滞が見られる。



(a) saddle point avoidance mechanism.

(b) loss diminution through training.

Fig. 2.4: comparison of `PlainSGD` and `AdaDelta`.

対策として、最適解の近傍では学習率を小さく、鞍点の近傍で学習率を大きく調節する、適応的な勾配法が利用される。例えば、式 (2.13) の *AdaGrad* は、時刻 t での学習率を勾配 ∇E_t の期待値の逆数とし、また、時刻 t に従って減衰させる。

$$\Delta w = -\frac{\eta}{t\sqrt{\mathbf{E}\left[\,(\nabla E)^2\,\right]_t}}, \quad \text{where} \quad \begin{cases} \mathbf{E}\left[\,(\nabla E)^2\,\right]_t = \dfrac{1}{t}\displaystyle\sum_{\tau=0}^{t}(\nabla E_\tau)^2, \\ \mathbf{E}\left[\,(\nabla E)^2\,\right]_0 = \varepsilon. \end{cases} \tag{2.13}$$

AdaGrad は全時間の勾配を考慮するが、式 (2.14) の *AdaDelta* では、期待値に加重 ρ を導入し、直近の勾配を重視する。式 (2.14) の分数には、加重 w と勾配 ∇E の単位を変換する役割がある。なお、定数 ε はゼロ除算を防ぐ微小な値である。

$$\Delta w_{mt} = -\frac{\sqrt{\mathbf{E}\left[\,(\Delta w)^2\,\right]_t + \varepsilon}}{\sqrt{\mathbf{E}\left[\,(\nabla E)^2\,\right]_t + \varepsilon}}\nabla E_{mt}, \quad \text{where} \quad \begin{cases} \mathbf{E}\left[\,x\,\right]_t = \rho\mathbf{E}\left[\,x\,\right]_{t-1} + (1-\rho)x_t, \\ \mathbf{E}\left[\,x\,\right]_0 = 0. \end{cases} \tag{2.14}$$

以上の議論を踏まえ、*AdaDelta* を実装する。引数は、定数 ρ, ε である。Fig. 2.4 に、単純な勾配法との性能の比較を示す。

```
class AdaDelta(r: Double = 0.95, e: Double = 1e-8) extends SGD {
  var eW, eE = 0.0
  def apply(dE: Double) = {
    lazy val v = math.sqrt(eW + e) / math.sqrt(eE + e)
    this.eE = r * eE + (1 - r) * math.pow(1 * dE, 2.0)
    this.eW = r * eW + (1 - r) * math.pow(v * dE, 2.0)
    this.w -= v * dE
  }
}
```

2.5 通時的誤差逆伝播法

自然言語や信号など、時系列の未来を予測するには、状態を記憶し、時系列を逐次的に順伝播させる機能が必要である。**再帰型ニューラルネットワーク**が代表的で、中間層の状態 $\boldsymbol{y}$ を、次の時刻の入力 $\boldsymbol{x}$ の順伝播に合流させ、中間層に戻す。

$$\boldsymbol{y}^t = f(\boldsymbol{z}^t) = f(W_i\boldsymbol{x}^t + W_h\boldsymbol{y}^{t-1}). \tag{2.15}$$

再帰構造を展開して、擬似的に再帰を除去すれば、従来通り勾配法で最適化できる。これを**通時的誤差逆伝播法**と呼ぶ。以下に実装を示す。順伝播は、同じ中間層を繰り返し通過し、最後に、後続の層に伝播する。逆伝播も、同様に実装する。

```
class RNN(dim: Int, hidden: Neuron, output: Neuron, value: Double = 0) extends Neuron(dim) {
  val hist = Seq[Seq[Double]]().toBuffer
  val loop = Seq[Seq[Double]]().toBuffer
  def fp(x: Seq[Double]) = output.fp(hp(x).last)
  def tt(x: Seq[Double]) = hist.zip(loop).map(_++_).foldRight(x)
  def hp(x: Seq[Double]) = loop.append(hidden.fp(hist.append(x).last++loop.last))
  def bp(x: Seq[Double], t: Seq[Double]) = tt(output.bp(hp(x).last,t))(hidden.bp)
  def init = hist.clear -> loop.clear -> loop.append(Seq.fill(hidden.dim)(value))
}
```

順伝播や逆伝播を行う度に、中間層の状態が記憶される。従って、時系列の処理が終わる度に、初期化する必要がある。勾配法も実装し直す。逆伝播の間に、中間層の挙動が変わると最適化に障るので、逆伝播の完了まで、加重を据え置く。

```
class DelaySGD(sgd: SGD = new PlainSGD, var d: Double = 0) extends SGD {
  def apply(dE: Double) = (sgd.w = w, sgd(dE), d += sgd.w - w)
  def force = (w += d, d = 0)
}
```

使用例を示す。なお、中間層で逆伝播を繰り返す際に、勾配は引数で渡される。その勾配を、専用の最終層で取り出す。

```
val params = Seq[DelaySGD]().toBuffer
val model3 = new Offset(5, new Sigmoid, ()=>params.append(new DelaySGD).last, new Output(1))
val model2 = new Offset(6, new Sigmoid, ()=>params.append(new DelaySGD).last, new Output(5, (x,e)=>e))
val model1 = new RNN(1, model2, model3)
```

時系列の具体的な例として、波形を学習させる。余弦波を受け取り、位相を遅らせて正弦波を予測する回帰問題である。

```
val x = Seq.tabulate(200)(n => Seq(0.5 * math.cos(0.02 * math.Pi * n) + 0.5))
val y = Seq.tabulate(200)(n => Seq(0.5 * math.sin(0.02 * math.Pi * n) + 0.5))
for(step <- 1 to 100000) model1.init -> x.zip(y).foreach(model1.bp(_,_) -> params.foreach(_.force))
```

Fig. 2.5 に予測した波形と真の波形を示す。学習の初期段階では、歪な波形だが、学習が進むと、綺麗な正弦波に近付く。

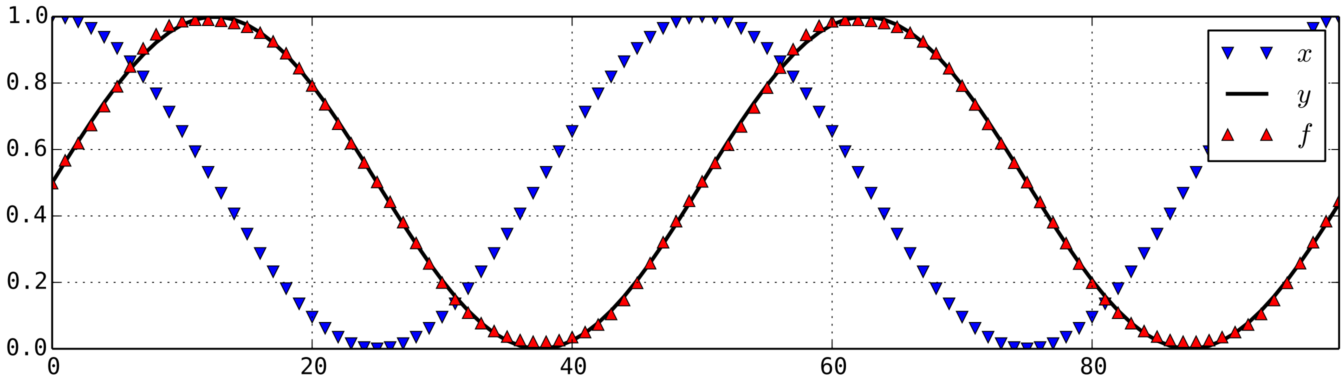
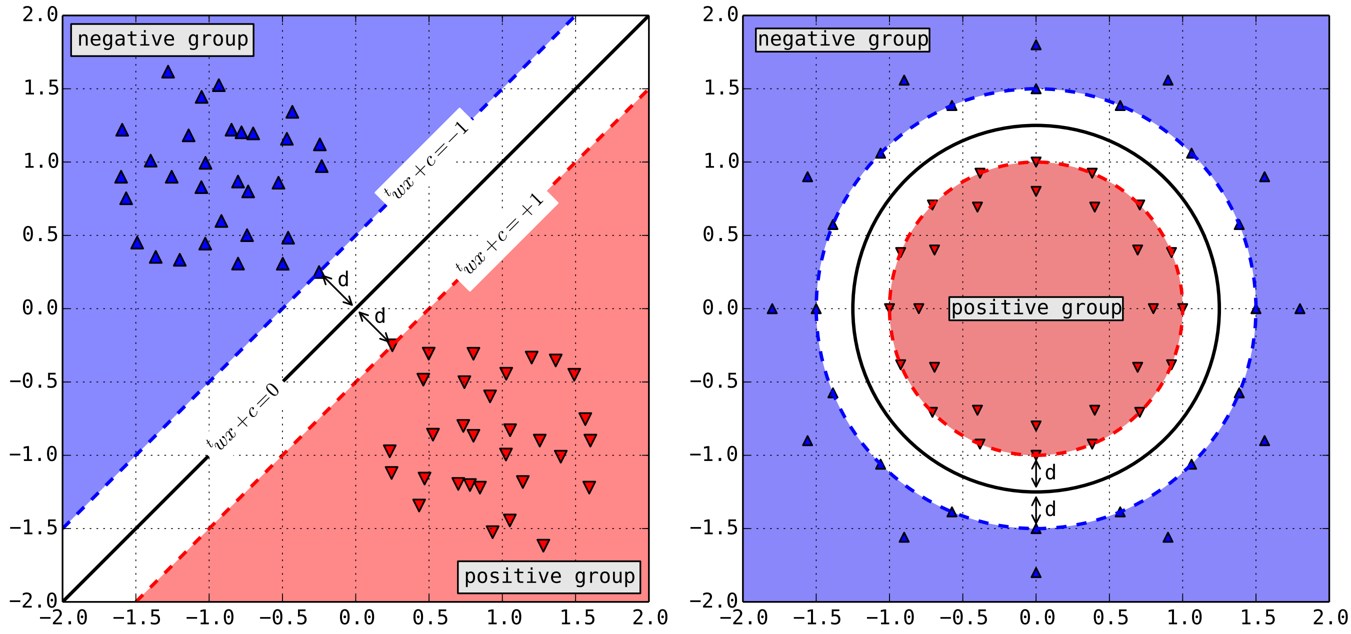


Fig. 2.5: sine curve prediction.

時系列の機械学習は、機械翻訳や映像生成など、発展が顕著な分野で、複雑な文脈構造を如何に捉えるかが課題である。

第3章　サポートベクターマシン

サポートベクターマシンは、分類問題に対し、各クラスの集団からの距離 d が最大になる境界を学習する分類器である。Fig. 3.1(a) に線型分離可能な問題の、(b) に線型分離が困難な問題の例を示す。まずは、線型分離可能な場合を解説する。



(a) linear problem.　(b) curved problem.

Fig. 3.1: a support vector machine.

Fig. 3.1(a) の分類器は、式 (3.1) に従って、説明変数 $\boldsymbol{x}$ に対し、目的変数 y を推定する。$\boldsymbol{w}$ は加重で、c は定数項である。

$$\hat{y} = \mathrm{sign}\left(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c\right) \in \{1,-1\}\,. \tag{3.1}$$

距離 d の最適化は**制約付き最適化問題**であり、学習対象の集合 $\mathbb{T}$ に対して、式 (3.2) に示す制約条件を満たす必要がある。

$$\forall\,(\boldsymbol{x},y)\in\mathbb{T}\colon\, y(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c)\geq 1,\ \ \text{where}\ \ y\in\{1,-1\}\,. \tag{3.2}$$

距離 d は式 (3.3) で求まる。式 (3.2) を念頭に、式を簡略化すると、距離 d の最大化は加重 $\boldsymbol{w}$ の最小化と等価だと言える。

$$d(\mathbb{T}) = \min\frac{|\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|},\ \ \text{where}\ \ \boldsymbol{x}\in\mathbb{T}. \tag{3.3}$$

現実には、式 (3.2) の**ハードマージン**は、誤分類に対して過剰に敏感なので、式 (3.4) に示す**ソフトマージン**を利用する。

$$\forall\,(\boldsymbol{x},y)\in\mathbb{T}\colon\, y(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c)\geq 1-\xi,\ \ \text{where}\ \ \xi=\begin{cases}0 & \text{if}\ y(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c)>1,\\ |y-(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c)|\geq 0 & \text{if}\ y(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+c)\leq 1.\end{cases} \tag{3.4}$$

式 (3.4) は、誤分類された点 $\boldsymbol{x}$ に対し、罰を与える役割がある。ξ を**ヒンジ損失**と呼ぶ。最終的に式 (3.5) を最小化する。

$$f(\boldsymbol{w}) = C\sum_{n}^{N}\xi_n + \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{w}\right\|^2,\ \ \text{where}\ \ C>0. \tag{3.5}$$

定数 C は、誤分類の許容量を決定する。小さな値に設定すると誤分類に鈍感になり、大きな値に設定すると敏感になる。

3.1 双対問題の導出

式 (3.5) は、式 (3.4) を束縛条件として、**ラグランジュの未定乗数法**で最小化できる。条件が 2 個ある点に注意を要する。

$$L(\boldsymbol{w}, c, \xi, \lambda, \mu, \mathbb{T}) = f(\boldsymbol{w}) - \sum_{i=1}^{N} \lambda_n \{y_n(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_n + c) - 1 + \xi_n\} - \sum_{i=1}^{N} \mu_n \xi_n. \tag{3.6}$$

式 (3.4) の条件は不等式なので、式 (3.7) の**カルーシュ・クーン・タッカー条件**を満たす場合のみ、未定乗数法が使える。

$$\lambda_n \left\{ y_n \left(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_n + c \right) - 1 + \xi_n \right\} = 0, \begin{cases} \lambda_n \geq 0, \\ \mu_n \geq 0, \\ \mu_n \xi_n = 0. \end{cases} \tag{3.7}$$

変数 λ_n, μ_n は未定乗数である。式 (3.6) を加重 $\boldsymbol{w}$ と定数 c と未定乗数で偏微分すれば、L が極値になる条件が得られる。

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \frac{\partial L}{\partial c} = \frac{\partial L}{\partial \lambda} = \frac{\partial L}{\partial \mu} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{w} = \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \lambda_n y_n \boldsymbol{x}_n, \\ 0 = \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \lambda_n y_n, \\ \lambda_n = C - \mu_n. \end{cases} \tag{3.8}$$

Fig. 3.1(a) を振り返ると、$C = 0$ の場合は、式 (3.7) より、境界から距離 d の点だけが $\lambda > 0$ となり、加重 $\boldsymbol{w}$ に寄与する。その点を**サポートベクトル**と呼ぶ。式 (3.6) に式 (3.8) を代入すると、都合よく ξ や C が消去され、式 (3.9) が得られる。

$$\tilde{L}(\lambda) = \min_{\boldsymbol{w}, c} L(\boldsymbol{w}, c, \lambda) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \left\{ 1 - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_i y_j (\boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_j) \right\} \leq f(\boldsymbol{w}). \tag{3.9}$$

式 (3.9) の $\tilde{L}$ の最大化を $f(\boldsymbol{w})$ の**ラグランジュ双対問題**と呼ぶ。$\tilde{L}$ と $f(\boldsymbol{w})$ の最適値は合致する。これを**強双対性**と呼ぶ。

3.2 逐次的な最適化

式 (3.9) の解析的な最適化は困難なため、**逐次最小問題最適化法**での最適化を検討する。まず、適当な 2 点 $\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j$ を選ぶ。その 2 点の乗数 λ_i, λ_j を式 (3.10) を満たす範囲で最適化する。以上の操作を、全ての点が式 (3.7) を満たすまで繰り返す。

$$y_i \delta_i + y_j \delta_j = 0, \ \text{where} \ \begin{Bmatrix} \delta_i = \hat{\lambda}_i - \lambda_i \\ \delta_j = \hat{\lambda}_j - \lambda_j \end{Bmatrix} \Leftarrow 0 = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i. \tag{3.10}$$

2 点 $\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j$ に対し、$\tilde{L}$ の極大値を求める。式 (3.10) に注意して、式 (3.9) を δ_i, δ_j で偏微分すると、式 (3.11) が得られる。

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \delta_i} = y_i (y_i - y_j) - \delta_i \left| \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \right|^2 - y_i \sum_{n=1}^{N} \lambda_n y_n \boldsymbol{x}_n \cdot (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j). \tag{3.11}$$

乗数 λ_i, λ_j の移動量は式 (3.12) となる。ただし、式 (3.7) を満たす必要があり、$0 \leq \lambda \leq C$ の範囲で**クリッピング**を行う。

$$\delta_i = -\frac{y_i}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|^2} \left\{ \sum_{n=1}^{N} \lambda_n y_n \boldsymbol{x}_n \cdot (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j) - y_i + y_j \right\}. \tag{3.12}$$

なお、定数 c の値は、$y(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x})$ を最小化する点 $\boldsymbol{x}$ に着目すると、式 (3.13) で計算できる。以上で、必要な数式が出揃った。

$$c = -\frac{1}{2} \left\{ \min_{i|y_i=+1} \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j \boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_j + \max_{j|y_j=-1} \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_j \cdot \boldsymbol{x}_j \right\}. \tag{3.13}$$

逐次最小問題最適化法の最悪計算時間は $O(n^3)$ だが、点 $\boldsymbol{x}_i$ を選ぶ際に、式 (3.7) に反する点を重視すると効率的である。

3.3 線型分離の学習

第 3.2 節までの議論に基づき、逐次最小問題最適化法を実装する。まず、組 $(\boldsymbol{x}, y)$ を実装する。乗数 λ を変数として持つ。

```
case class Data(x: Seq[Double], t: Int, var l: Double = 0) {
  def kkt(svm: SVM, C: Double) = t * svm(this) match {
    case e if e < 1 => l >= C
    case e if e > 1 => l == 0
    case _ => true
  }
}
```

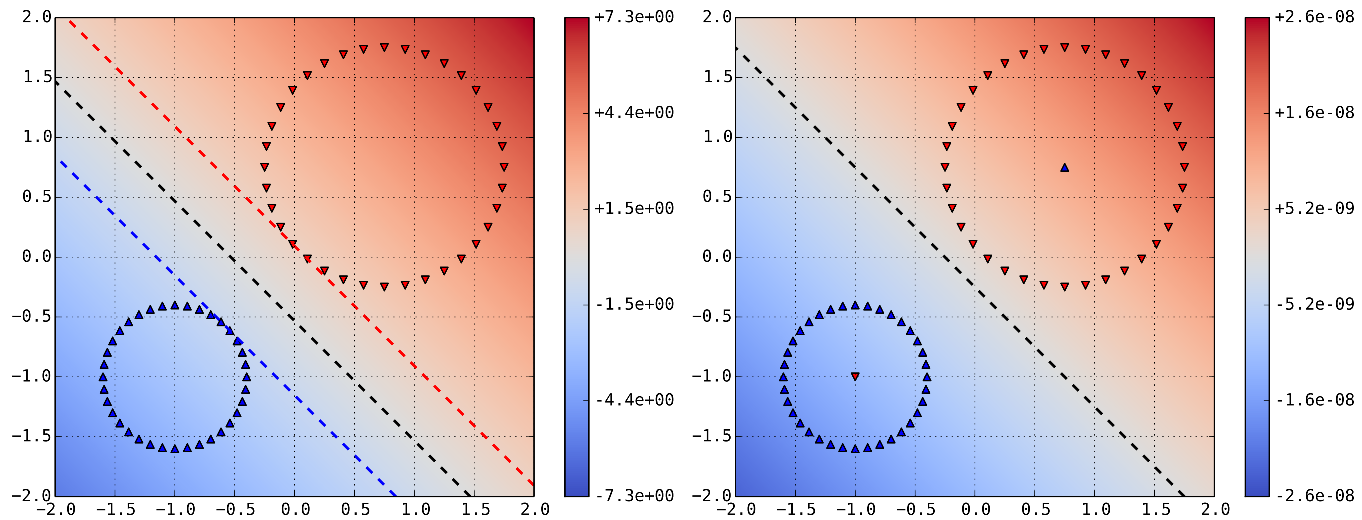
次に、サポートベクターマシンの本体を実装する。引数 k は内積である。敢えて抽象化したのは、第 3.4 節の布石である。

```
class SVM(data: Seq[Data], k: (Data, Data) => Double) {
  var const = 0.0
  def group(t: Int) = data.filter(_.t == t).map(apply)
  def apply(x: Data) = data.map(d => d.l * d.t * k(x,d)).sum + const
}
```

最後に、逐次最小問題最適化法を実装する。第 3.2 節に述べた数式を実装し、式 (3.7) を満たすまで逐次的に最適化する。

```
class SMO(data: Seq[Data], k: (Data, Data) => Double, C: Double = 1e-10) extends SVM(data,k) {
  while(data.filterNot(_.kkt(this,C)).size >= 2) {
    val a = data(util.Random.nextInt(data.size))
    val b = data(util.Random.nextInt(data.size))
    val min = math.max(-a.l, if(a.t == b.t) b.l - this.C else -b.l)
    val max = math.min(-a.l, if(a.t == b.t) b.l - this.C else -b.l) + C
    val prod = this(Data(a.x.zip(b.x).map(_-_), 0)) - this.const
    val best = -a.t * (prod - a.t + b.t) / (k(a,a) - 2 * k(a,b) + k(b,b))
    if(!best.isNaN) a.l += a.t * a.t * math.max(min, math.min(max, best))
    if(!best.isNaN) b.l -= a.t * b.t * math.max(min, math.min(max, best))
    this.const = -0.5 * (group(+1).min + group(-1).max) + this.const
  }
}
```

Fig. 3.2 に学習の例を示す。綺麗な境界を学習できた。(b) では、誤分類によりサポートベクトルが消える様子がわかる。



(a) sample data separable by a line. (b) sample data with outlier points.

Fig. 3.2: decision surface learned by a linear SVM.

黒の点線はクラスの境界を表し、赤と青の点線はサポートベクトルを表す。赤と青の濃淡は $\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x} + c$ の値の勾配を表す。

3.4 特徴空間の変換

第 3.2 節までの議論は、線型分離可能な問題が前提だった。第 3.4 節では、線型分離が困難な問題に議論の対象を拡げる。線型分離が困難な問題でも、非線型の適当な関数 Φ で他の空間に写像し、線型分離可能な問題に変換できる場合がある。

$$\Phi : \boldsymbol{x} \mapsto \Phi_{\boldsymbol{x}}. \tag{3.14}$$

具体例を挙げると、式 (3.15) の写像 Φ_g は、点 $\boldsymbol{x}$ を無限の次元を持つ点 $\Phi_{\boldsymbol{x}}$ に変換する、無限次元の空間への写像である。低次元の空間では、点 $\boldsymbol{x}$ を線型分離するのが困難でも、無限次元に引き延ばせば、必ず適当な超平面で線型分離できる。

$$\Phi_g(\boldsymbol{x}) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left\|\boldsymbol{x}\right\|^2\right)\left[\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{x_d^n}{\sigma^n}\right]_{dn}, \quad \text{where} \ \ n = 0, 1, 2, \ldots, \infty. \tag{3.15}$$

第 3.2 節までの議論を振り返ると、内積 $\boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_j$ が何度も現れた。第 3.4 節では写像 Φ を通すので、$\Phi_{\boldsymbol{x}_i} \cdot \Phi_{\boldsymbol{x}_j}$ の形になる。無限次元の内積の計算量は無限で、写像 Φ の計算も困難である。しかし、**テイラー級数**を使えば、簡単に内積が求まる。

$$\Phi_{\boldsymbol{x}_i} \cdot \Phi_{\boldsymbol{x}_j} = \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\left\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\right\|^2\right\} \Leftarrow e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}. \tag{3.16}$$

内積を計算可能な写像 Φ を使うことで、陽に Φ を計算せずに、仮想的な高次元空間に写像する技法を**カーネル法**と呼ぶ。理論的には、**正定値性**を満たす対称関数 k に対し、内積が k で定義される**再生核ヒルベルト空間**への写像 Φ が存在する。

$$k \colon \mathbb{M} \times \mathbb{M} \to \mathbb{R}, \ \ \text{where} \ \ k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = k(\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_i). \tag{3.17}$$

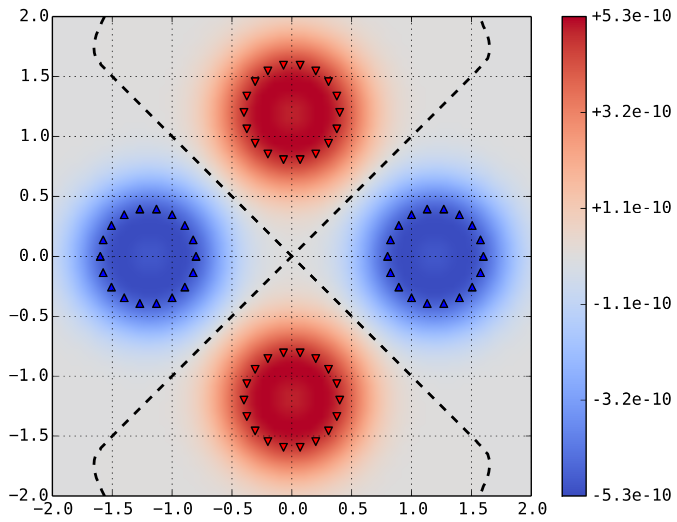
関数 k が正定値性を満たすとは、点 $\boldsymbol{x}$ を元に持つ空間 Ω に対し、式 (3.18) の**グラム行列**が正定値行列である場合を指す。

$$\Big[k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)\Big]_{ij}, \ \ \text{where} \ \ \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j \in \Omega. \tag{3.18}$$

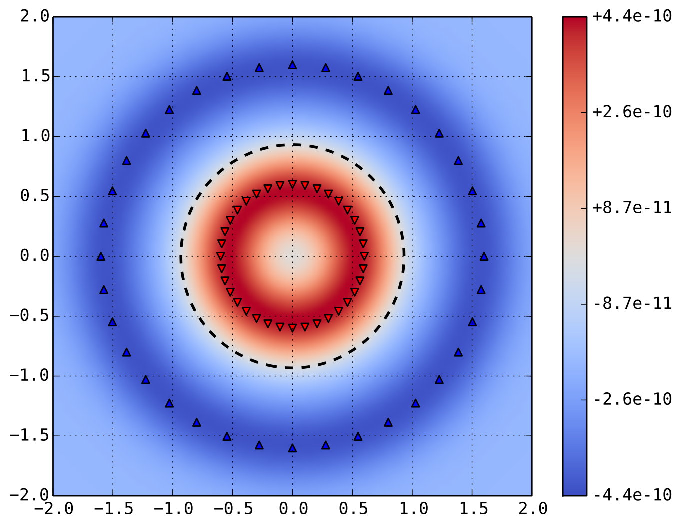
関数 k を利用して空間 Ω を空間 H_k に写像すると、空間 H_k の元 f, g の内積 $\langle f, g\rangle$ は、**再生性**により関数 k で定義できる。

$$\forall a_i, b_j \in \mathbb{R} \colon \langle f, g\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{N} a_i k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i), \sum_{j=1}^{N} b_j k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)\right\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} a_i b_j k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j). \tag{3.19}$$

要するに、正定値性を満たす任意の対称関数 k に対し、内積が関数 k で定義された空間 H_k が存在し、内積を計算できる。最も汎用的な例は、式 (3.16) の**ガウシアンカーネル**である。Fig. 3.3 に、線型分離が困難な問題を学習した結果を示す。



(a) diamond-shaped samples.



(b) two concentric circles.

Fig. 3.3: decision surface learned by a Gaussian SVM.

第 3.2 節に掲載した実装に、適当な内積の定義を与えれば、任意の写像を試せる。手作りで、無限次元の魔法を味わおう。

3.5 ヒルベルト空間

第 3.4 節は、内積と距離が式 (3.17) の関数 k で定義され、無限級数の極限も計算可能な空間 H_k が存在する点に依拠する。空間 H が線型空間で、式 (3.20) を満たす関数 $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$ が存在する場合に、これを内積と呼び、空間 H を**内積空間**と呼ぶ。

$$\forall a_i, b_j \in \mathbb{R}\colon \left\langle \sum_{i=1}^{I} a_i \boldsymbol{x}_i, \sum_{j=1}^{J} b_j \boldsymbol{y}_j \right\rangle = \left\langle \sum_{j=1}^{J} b_j \boldsymbol{y}_j, \sum_{i=1}^{I} a_i \boldsymbol{x}_i \right\rangle = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} a_i b_j \langle \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_j \rangle, \ \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \geq 0. \tag{3.20}$$

高校数学で学ぶ標準内積は、この定義に従う。また、関数 f, g を元とする空間では、その内積は式 (3.21) で定義できる。

$$\langle f, g \rangle = \int_H f(\boldsymbol{x}) \overline{g(\boldsymbol{x})} d\mu(\boldsymbol{x}). \tag{3.21}$$

関数 μ は関数空間 H の**測度**である。さて、内積空間 H では、式 (3.22) に示す通り、内積を使って**ノルム**を定義できる。

$$\|\boldsymbol{x}\| = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle^{\frac{1}{2}} \in \mathbb{R}. \tag{3.22}$$

式 (3.22) を利用して、任意の 2 点の距離 d を定義できる。距離 d が式 (1.2) を満たす場合に、空間 H は**距離空間**である。

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\| \geq 0. \tag{3.23}$$

空間 H で定義された任意の級数が、空間 H の元に収束する場合に、空間 H は**完備性**を満たし、**ヒルベルト空間**となる。正定値性を満たす適当な対称関数 k を定義して、関数 k の線型結合で式 (3.24) の空間 H_0 を作る。これを**線型包**と呼ぶ。

$$H_0 = \operatorname{span} \left\{ \sum_{n=1}^{n} a_n k(\boldsymbol{x}_n, \cdot) | a_n \in \mathbb{R} \right\}. \tag{3.24}$$

空間 H_0 の元 f, g に対し、内積を式 (3.25) の通りに定義する。証明は省くが、空間 H_0 はヒルベルト空間の条件を満たす。

$$\langle f, g \rangle_{H_0} = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} a_i b_j k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j), \ \text{where} \ \begin{cases} f(\boldsymbol{x}) = \displaystyle\sum_{i=1}^{I} a_i k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}), \\ g(\boldsymbol{x}) = \displaystyle\sum_{j=1}^{J} b_j k(\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}). \end{cases} \tag{3.25}$$

ぜひ、式 (3.25) が式 (3.20) の性質を満たし、その内積で距離 d を定義すると、式 (1.2) の公理を満たす点を確認しよう。さて、式 (3.25) より自明だが、空間 H_0 の元 f は、式 (3.26) の再生性を満たし、空間 H_0 は**再生核ヒルベルト空間**となる。

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{n=1}^{N} a_n k(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}) = \langle f, k(\cdot, \boldsymbol{x}) \rangle_{H_0}. \tag{3.26}$$

再生性を持つ関数 k を**再生核**と呼ぶ。核は式 (3.27) に示す**積分変換**に由来する。これは、空間 Ω_s, Ω_t の間の写像である。

$$F(\boldsymbol{s}) = \int_{\Omega_t} k(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{t}) f(\boldsymbol{t}) d\boldsymbol{t}, \ \text{where} \ \begin{cases} \boldsymbol{s} \in \Omega_s, \\ \boldsymbol{t} \in \Omega_t. \end{cases} \tag{3.27}$$

例えば、**ラプラス変換**や**フーリエ変換**が該当する。さて、式 (3.28) で定義される核関数 k は、再生核である。証明しよう。

$$k(x, y) = \frac{a}{\pi} \operatorname{sinc} a(y - x). \tag{3.28}$$

式 (3.21) に従って内積を求めると、式 (3.29) を得る。式 (3.28) が矩形関数の双対である点に注目して、再生性を導ける。

$$\langle f, k(x, \cdot) \rangle_{L^2} = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \overline{k(x, y)} dy = \frac{1}{2\pi} \int_{-a}^{a} \mathcal{F}_f(\omega) e^{i\omega x} d\omega = f(x). \tag{3.29}$$

積分変換と機械学習の関係は興味深く、特に、深層学習の優れた性能の理由を積分変換に求める研究は、注目に値する。簡単な例では、式 (3.30) に示す**シグモイドカーネル**の挙動は、式 (2.1) で加重 $\boldsymbol{w}$ が固定されたニューロンと等価になる。

$$k(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}) = \tanh {}^t\boldsymbol{w}\boldsymbol{x}. \tag{3.30}$$

深層学習は、勾配法を通じて加重 $\boldsymbol{w}$ を最適化するため、自在に最適化される高次元空間の層を持つのと等価だと言える。

第4章　決定木の学習と汎化性能

意思決定の分野では、しばしば**決定木**と呼ばれる、質問と条件分岐の再帰的な木構造で、条件 $\boldsymbol{x}$ と結論 y の関係を表す。例えば、式 (4.1) は、海水浴の是非 y を判断する決定木である。気象 $\boldsymbol{x}$ に対し、質問と条件分岐を繰り返し、結論を導く。

$$y \approx f(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \mathrm{wavy}(\boldsymbol{x}) = 1 \\ \text{otherwise} \begin{cases} 0 & \text{if } \mathrm{rain}(\boldsymbol{x}) = 1 \\ 1 & \text{if } \mathrm{rain}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases} & \text{if } \mathrm{wavy}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases} \tag{4.1}$$

決定木の学習では、意思決定の事例の集合 $\{\boldsymbol{x}, y\}$ に対し、簡潔で解釈の容易な質問と条件分岐と、その順序を習得する。

4.1　情報源符号化定理

理想的な決定木は、簡潔明瞭である。即ち、最低限の質問で、結論に至る。ここで、**情報源符号化**の概念を導入しよう。質問と条件分岐を繰り返す過程は、条件 $\boldsymbol{x}$ の情報を分解し、情報の断片に 2 進数の**符号語**を割り振る操作と等価である。

$$C(\boldsymbol{x})\colon \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{s} \in \{0, 10, 11\}\,. \tag{4.2}$$

事象 $\boldsymbol{x}$ が従う確率分布 $p\left(\boldsymbol{x}\right)$ を仮定して、事象 $\boldsymbol{x}$ が伴う情報の価値 $I(\boldsymbol{x})$ を定義する。質問の妥当性に相当する量である。情報の価値とは、その事象の希少性である。即ち、価値 $I(\boldsymbol{x})$ は、確率 $p\left(\boldsymbol{x}\right)$ に対して単調減少であり、式 (4.3) を満たす。

$$p\left(\boldsymbol{x}_i\right) \leq p\left(\boldsymbol{x}_j\right) \Leftrightarrow I(\boldsymbol{x}_i) \geq I(\boldsymbol{x}_j). \tag{4.3}$$

また、複数の事象が同時に発生した場合の情報の価値は、個別に発生した場合の情報の価値の総和となると自然である。

$$I(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_N) = \sum_{n=1}^{N} I(\boldsymbol{x}_n). \tag{4.4}$$

式 (4.4) の性質を**情報の加法性**と呼ぶ。以上の性質を満たす定義を考えると、式 (4.5) を得る。この $I(\boldsymbol{x})$ を**情報量**と呼ぶ。

$$I(\boldsymbol{x}) = \log_2 \frac{1}{p\left(\boldsymbol{x}\right)} = -\log_2 p\left(\boldsymbol{y}\right) \geq 0. \tag{4.5}$$

符号 C の符号語を圧縮するには、事象 $\boldsymbol{x}$ に、情報量に応じた長さの符号語を割り振る。これを**エントロピー符号**と呼ぶ。符号語の長さの期待値 $\overline{L}$ は、式 (4.6) の**シャノンの情報源符号化定理**に従う。関数 H を確率分布 p の**平均情報量**と呼ぶ。

$$\overline{L(C)} \geq H(p) = \sum_{\boldsymbol{x}} p\left(\boldsymbol{x}\right) I(\boldsymbol{x}) = -\sum_{\boldsymbol{x}} p\left(\boldsymbol{x}\right) \log_2 p\left(\boldsymbol{x}\right) \geq 0. \tag{4.6}$$

情報量の議論を利用して、質問の回数を圧縮する方法を検討しよう。まず、最初の質問は、情報量が最大の質問を選ぶ。質問 Q により、集合 X が K 通りの部分集合 X_k に分割される場合は、質問 Q の情報量 $G(Q)$ は、式 (4.7) で定義される。

$$G(Q) = H(X) - H(X|Q) = H(X) - \sum_{k=0}^{K-1} P\left(X_k \,|\, X\right) H(X_k) \geq 0. \tag{4.7}$$

同様に、部分集合 X_k に対し、情報量が最大の質問を選び、次の質問とする。この操作を繰り返し、最適な決定木を得る。質問の回数は整数なので、決定木が表す分布 $\hat{p}$ は、分布 p と異なる。その様子を表す $H(p,\hat{p})$ を**交差エントロピー**と呼ぶ。

$$\overline{L(C)} = H(p,q) = -\sum_{\boldsymbol{x}} p\left(\boldsymbol{x}\right) \log \hat{p}\left(\boldsymbol{x}\right) = -\sum_{\boldsymbol{x}} p\left(\boldsymbol{x}\right) \left\{ \log p\left(\boldsymbol{x}\right) - \log \frac{p\left(\boldsymbol{x}\right)}{\hat{p}\left(\boldsymbol{x}\right)} \right\} = H(p) + D(p\|q) \geq H(p). \tag{4.8}$$

余分な質問の回数を表す $D(p\|\hat{p})$ を**カルバック・ライブラー情報量**と呼ぶ。これは、確率分布 $p, \hat{p}$ の差を表す量でもある。

4.2 条件分岐の最適化

第 4.1 節の議論に基づき、決定木を実装する。まず、推論を抽象化する。条件 $\boldsymbol{x}$ は整数の列で、結論 y は任意の型とする。

```
trait Node[T] extends (Seq[Int] => T)
```

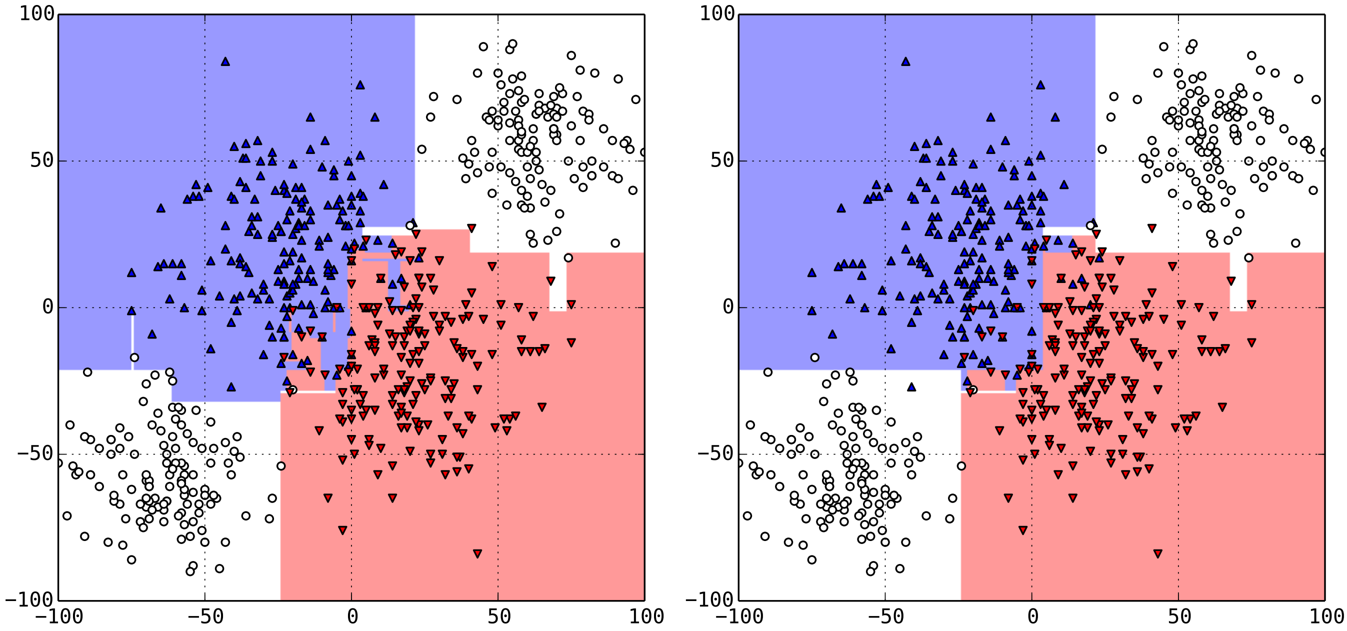
次に、決定木の本体を実装する。引数は、決定木が学習する集合 $\{\boldsymbol{x}, y\}$ と、決定木の末端の細分化を抑える閾値である。決定木は再帰的に生成されるが、質問の情報量が微小の場合は、分布 $p(y)$ の最大値を与える y を定数値として出力する。

```
case class Question[T](x: Seq[(Seq[Int], T)], limit: Double = 1e-5) extends Node[T] {
  lazy val m = x.groupBy(_._2).maxBy(_._2.size)._1
  lazy val p = x.groupBy(_._2).map(_._2.size.toDouble / x.size)
  lazy val ent = p.map(p => -p * math.log(p)).sum / math.log(2)
  lazy val division = x.head._1.indices.map(split).minBy(_.ent)
  def apply(x: Seq[Int]) = if(ent - division.ent < limit) m else division(x)
  def split(v: Int) = x.map(_._1(v)).toSet.map(Division(x,v,_)).minBy(_.ent)
}
```

次に、条件分岐を実装する。引数は、決定木が学習する集合 $\{\boldsymbol{x}, y\}$ と、条件 $\boldsymbol{x}$ を分割する軸と、分割を行う閾値である。分割する軸と値は、式 (4.7) で議論した通り、質問の情報量を最大化する軸と値が選択される。これで決定木が完成した。

```
case class Division[T](x: Seq[(Seq[Int], T)], axis: Int, value: Int) extends Node[T] {
  val sn1 = Question(x.filter(_._1(axis) >  value))
  val sn2 = Question(x.filter(_._1(axis) <= value))
  val ent = (sn1.ent * sn1.x.size + sn2.ent * sn2.x.size) / x.size
  def apply(x: Seq[Int]) = if(x(axis) >= value) sn1(x) else sn2(x)
}
```

Fig. 4.1 は、各々が正規分布に従う 3 クラスの点の集合を学習し、決定木で空間をそれらのクラスに分割した結果である。結果的に、過剰に複雑な境界となった。個別の事例には忠実だが、正規分布の形からは乖離した。これを**過学習**と呼ぶ。



(a) `limit` $= 1e-5$.　(b) `limit` $= 1e-1$.

Fig. 4.1: region segmentation by a decision tree.

過学習は、機械学習で普遍的な課題だが、特に、決定木は、際限なく細分化できるため、しばしば表現能力が過剰である。過学習を抑えるには、Fig. 4.1(b) のように、分割の閾値を調節するか、第 4.3 節で学ぶ**アンサンブル学習**が有効である。

4.3 アンサンブル学習

決定木に限らず、機械学習では、真の関係 f と、習得した関係 $\hat{f}$ の間に若干の差があり、それが過学習として顕在化する。過学習の原因は、教師データの偏りや、関数 $\hat{f}$ の過剰な表現能力にある。関数 $f, \hat{f}$ の差を 2 乗誤差関数で定式化しよう。

$$\int_{\boldsymbol{x}} p(\boldsymbol{x})\,(y-\hat{f}(\boldsymbol{x}))^2 d\boldsymbol{x} = \mathbf{V}[\,y-f(\boldsymbol{x})\,] + \left(\mathbf{E}\left[\,\hat{f}(\boldsymbol{x})\,\right] - f(\boldsymbol{x})\right)^2 + \mathbf{V}\left[\,\hat{f}(\boldsymbol{x})\,\right]. \tag{4.9}$$

式 (4.9) の第 2 項の平方根を**バイアス**と、第 3 項を**バリアンス**と呼ぶ。この 2 項が過学習や、逆に学習不足の原因となる。両者はトレードオフの関係にあるが、T 個の関数 $\hat{f}_t$ を**弱学習器**とし、投票を行う**アンサンブル学習**により、調節できる。

$$\hat{f}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} \hat{f}_t(\boldsymbol{x}). \tag{4.10}$$

過学習を防ぐには、相互に独立した弱学習器の訓練が重要である。そこで、事例を選び直す**ブートストラップ法**を行う。要素の重複を許して T 通りの部分集合を作成し、T 通りの弱学習器 f_t を訓練する。これで、式 (4.11) の分散が低減する。

$$\mathbf{V}\left[\,\hat{f}(\boldsymbol{x})\,\right] = \frac{1}{T^2}\sum_{i=1}^{T}\sum_{j=1}^{T} \mathbf{C}[\,f_i(\boldsymbol{x}), f_j(\boldsymbol{x})\,]. \tag{4.11}$$

この手法は**バギング**とも呼ばれる。基本的には、決定木や深層学習など表現能力が過剰な手法に使う。以下に実装する。

```
case class Bagging[T](x: Seq[(Seq[Int], T)], t: Int, n: Int) extends Node[T] {
  val f = Seq.fill(t)(Question(Seq.fill(n)(x(util.Random.nextInt(x.size)))))
  def apply(x: Seq[Int]) = f.map(_(x)).groupBy(identity).maxBy(_._2.size)._1
}
```

4.4 ブースティング法

逆に、学習不足の解消には、弱学習器の表現能力を補う弱学習器を作り、加重投票を行う**ブースティング法**を適用する。

$$\hat{f}(\boldsymbol{x}) = \sum_{t=1}^{T} w_t \hat{f}_t(\boldsymbol{x}). \tag{4.12}$$

弱学習器 f_t は、弱学習器 $f_1, \ldots, f_{t-1}$ が判断を誤った点 $\boldsymbol{x}$ を重点的に学習する。点 $\boldsymbol{x}$ を選ぶ確率分布 $q_t(\boldsymbol{x})$ を検討しよう。分類問題を想定し、式 (4.13) に示す**指数誤差**を最小化する。指数誤差の最小化は、関数 $\boldsymbol{f}, \hat{\boldsymbol{f}}$ の値の内積の最大化である。

$$E(\hat{\boldsymbol{f}}) = \exp\left\{-{}^t\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\hat{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})\right\} = \exp\left\{-{}^t\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\sum_{t=1}^{T} w_t \hat{\boldsymbol{f}}_t(\boldsymbol{x})\right\} \geq 0. \tag{4.13}$$

次に、特に分類問題を想定し、関数 $\hat{\boldsymbol{f}}$ が取り得る値に制約条件を設定する。関数 $\boldsymbol{f}, \hat{\boldsymbol{f}}$ の値は、式 (4.14) の条件を満たす。

$$\sum_{k=1}^{K} f(\boldsymbol{x},k) = \sum_{k=1}^{K} \hat{f}(\boldsymbol{x},k) = 1,\ \ \text{where}\ \ \begin{cases} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \Big[f(\boldsymbol{x},k)\Big]_k, \\ \hat{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}) = \Big[\hat{f}(\boldsymbol{x},k)\Big]_k. \end{cases} \tag{4.14}$$

具体的には、真の関数 $\boldsymbol{f}$ は、式 (4.15) に示す値を取る。ただし、関数 $\hat{\boldsymbol{f}}$ は、式 (4.14) を満たす範囲で、自由な値を取る。

$$f(\boldsymbol{x},k) = \begin{cases} 1 & \text{if } y = k, \\ \dfrac{1}{1-K} & \text{if } y \neq k. \end{cases} \tag{4.15}$$

式 (4.13) を分解すると、式 (4.16) を得る。この関数 q_T を確率分布として、弱学習器 f_T が学習する集合を無作為に選ぶ。

$$E(\hat{\boldsymbol{f}}) = q_T(\boldsymbol{x})\exp\left\{-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})w_T\hat{\boldsymbol{f}}_T(\boldsymbol{x})\right\},\ \ \text{where}\ \ q_T(\boldsymbol{x}) = \exp\left\{-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\sum_{t=1}^{T-1} w_t\hat{\boldsymbol{f}}_t(\boldsymbol{x})\right\}. \tag{4.16}$$

弱学習器 f_T に対し、指数誤差 E を最小化する加重 w_T は、式 (4.17) で計算できる。**ラグランジュの未定乗数法**を使った。

$$\hat{w}_T = \log\left(\frac{1-E_T}{E_T}\right) + \log(K-1),\ \ \text{where}\ \ E_T = q_T(\boldsymbol{x},y)\mathbb{I}(\hat{f}_T(\boldsymbol{x}) \neq y). \tag{4.17}$$

以上の手法は、*AdaBoost* と呼ばれる。他にも、弱学習器の誤差を別の弱学習器で補う、**勾配ブースティング**が存在する。

4.5 汎化性能の最適化

第 4.3 節の議論を踏まえ、*AdaBoost* を実装しよう。基本的には、弱学習器を逐次的に作成し、追加する操作を繰り返す。

```
case class AdaBoost[T](x: Seq[(Seq[Int], T)], m: Int) extends Node[T] {
  val k = x.map(_._2).toSet
  val t = Seq(AdaStage(x, Seq.fill(x.size)(1.0 / x.size), m)).toBuffer
  def apply(x: Seq[Int]) = k.maxBy(y => t.map(_.score(x, y)).sum)
  while(t.last.best.error < 0.5) t += AdaStage(x, t.last.next, m)
}
```

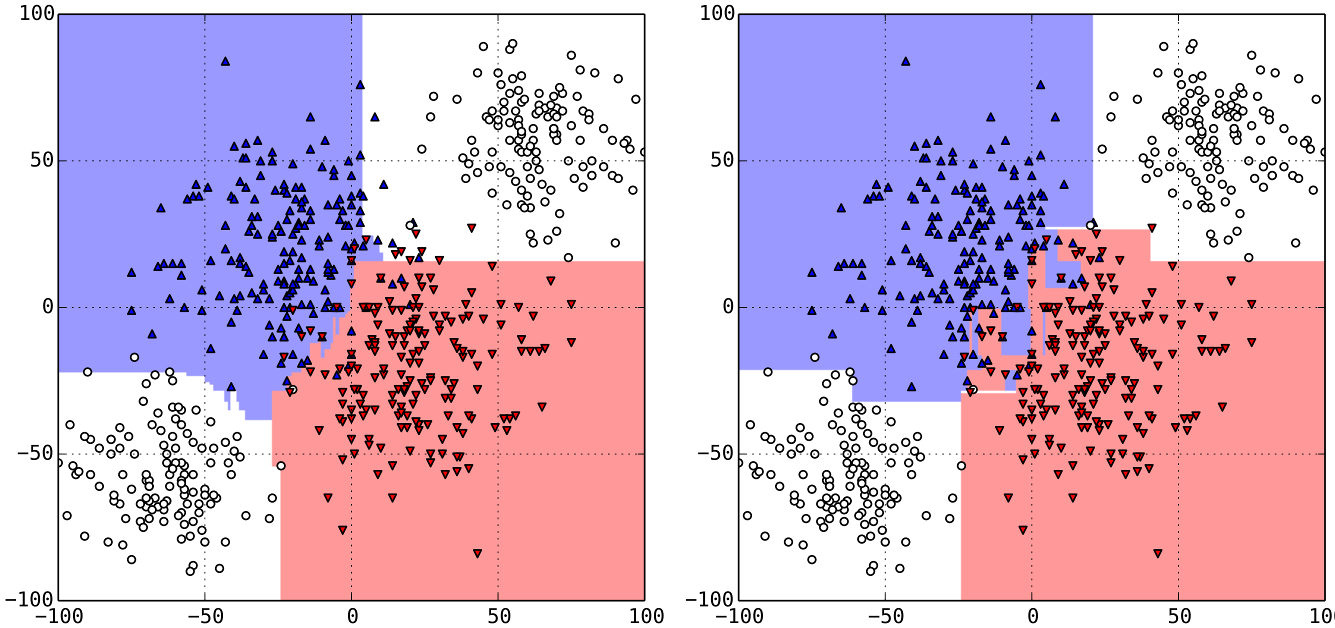
弱学習器 f_t は、M 個の候補 $\hat{f}_{tm}$ を作成し、最も高精度な候補を f_t とする。この操作を E_t が 0.5 を超えるまで繰り返す。

```
case class AdaStage[T](x: Seq[(Seq[Int], T)], p: Seq[Double], m: Int) extends Node[T] {
  val best = List.fill(m)(Resample(x, p.map(_ / p.sum))).minBy(_.error)
  val gain = math.log((1 / best.error - 1) * (x.map(_._2).toSet.size - 1))
  val next = x.map(score).map(gain - _).map(math.exp).zip(p).map(_ * _)
  def score(x: Seq[Int], y: T) = if(this(x) == y) gain else 0
  def apply(x: Seq[Int]) = best(x)
}
```

弱学習器の候補 $\hat{f}_{tm}$ は、確率分布 q_t に従う部分集合 $\mathbb{T}_t$ を学習する。集合 $\mathbb{T}_t$ は**ノイマンの棄却法**で擬似的に抽出できる。

```
case class Resample[T](x: Seq[(Seq[Int], T)], p: Seq[Double]) extends Node[T] {
  val data = Seq[(Seq[Int], T)]().toBuffer
  def reject(i: Int) = if(util.Random.nextDouble * p.max < p(i)) x(i) else null
  while(data.size < p.size) data += reject(util.Random.nextInt(p.size)) -= null
  def error = x.map((x, y) => this(x) != y).zip(p).filter(_._1).map(_._2).sum
  def apply(x: Seq[Int]) = quest(x)
  val quest = Question(data.toList)
}
```

Fig. 4.2 は、各々が正規分布に従う 3 クラスの事例を学習した結果である。比較のため、Fig. 4.1 と同じ事例を使用した。



(a) `Bagging` class. (b) `AdaBoost` class.

Fig. 4.2: region segmentation by ensemble learning.

決定木は、表現能力が過剰なので、学習不足を補うブースティングより、過学習を抑えるバギングの方が効果的である。

4.6 圧縮アルゴリズム

第 4.1 節で学んだ情報源符号化は、機械学習よりも、可逆圧縮の理論として知られる。その代表例が**ハフマン符号**である。決定木に似た**ハフマン木**を作り、その分岐に 2 進数の符号語を割り当て、再帰的に圧縮と復元を行う。以下に実装を示す。

```
abstract class Node(val s: String, val w: Int) {
  def decode(bits: String, root: Node = this): String
  def encode(text: String, root: Node = this): String
}
```

引数は、この頂点が表す文字と、文字が現れる頻度である。また、文字列を受け取り、圧縮と復元を行う機能を実装する。以下に、末端の頂点を実装する。復元の際は、頂点に対応する文字を出力し、圧縮の際は、何もせず最上位の頂点に戻る。

```
case class Atom(ch: String, freq: Int) extends Node(ch, freq) {
  def decode(bits: String, root: Node) = if(bits.isEmpty) ch else ch ++ root.decode(bits, root)
  def encode(text: String, root: Node) = if(text.size < 2) "" else root.encode(text.tail, root)
}
```

次に、符号語を表す頂点を実装する。厳密には、頂点と符号語の 1 桁を紐付けた頂点で、圧縮の際に、その桁を出力する。

```
case class Code(node: Node, bit: String) extends Node(node.s, node.w) {
  def decode(bits: String, root: Node) = node.decode(bits.tail, root)
  def encode(text: String, root: Node) = bit++node.encode(text, root)
}
```

分岐も実装する。復元の際は、符号語の $0, 1$ に対応する頂点を、圧縮の際は、圧縮する文字を含む頂点を選び、巡回する。

```
case class Fork(nodes: Seq[Code]) extends Node(nodes.map(_.s).mkString, nodes.map(_.w).sum) {
  def decode(bits: String, root: Node) = nodes.find(_.bit.head == bits.head).get.decode(bits, root)
  def encode(text: String, root: Node) = nodes.find(_.s.contains(text.head)).get.encode(text, root)
}
```

次に、再帰的に木構造を構築する手順を実装する。まず、頻度が最低の部分木の組を選び、その親となる分岐を構築する。また、部分木の頻度を合計し、新たな部分木の頻度とする。この操作を逐次的に繰り返し、完全なハフマン木を構築する。

```
implicit class Huffman(nodes: Seq[Node]) {
  def fork: Seq[Code] = nodes.zipWithIndex.map(_->_.toString).map(Code(_,_))
  def join: Seq[Node] = Seq(Fork(nodes.take(2).fork)).union(nodes.tail.tail)
  def tree: Seq[Node] = if(nodes.size <= 1) nodes else join.sortBy(_.w).tree
}
```

最後に、暗黙の型変換を利用して、文字列からハフマン木を生成する機能も実装した。この文字列が、圧縮の対象となる。

```
implicit class Symbols(source: String) {
  def countFreq = source.split("").groupBy(identity).mapValues(_.size)
  def toHuffman = countFreq.toSeq.map(Atom(_,_)).sortBy(_.w).tree.head
}
```

以上で、可逆圧縮が完成した。以下に、使用例を示す。なお、未知の文字を圧縮すると、例外が発生する点に、注意する。

```
val encoded = "Lorem ipsum dolor sit amet consectetur adipiscing elit".toHuffman.encode("lorem")
val decoded = "Lorem ipsum dolor sit amet consectetur adipiscing elit".toHuffman.decode(encoded)
println(encoded)
println(decoded)
```

以下に、出力を示す。文字が出現する頻度の偏りに起因して、平均情報量が抑制されたため、半分の圧縮率を達成できた。

```
110011110010100011111
lorem
```

第5章　潜在的ディリクレ配分法

自然言語の機械学習には、特有の困難がある。特定の形態素が出現する確率は低く、その確率も話題に応じて変化する。話題も曖昧で多岐に渡り、教師あり学習が困難なので、単語 w の背後にある話題 z を、教師なし学習する方法を考える。

5.1　確率的潜在意味解析

話題 z は観測できず、潜在的な情報である。また、話題 z の分布は、記事の主題に応じて変化する。その点を考慮しよう。具体的には、単語 w の出現が、試行 1 回の**多項分布**に従うと考える。また、単語 w と話題 z が従う確率分布を仮定する。

$$P\left(w, z, \phi, \theta\right) = P\left(w \,|\, \phi\right) P\left(\phi\right) P\left(z \,|\, \theta\right) P\left(\theta\right) = \left(\prod_{v=1}^{V} \phi_{zv}^{N_v}\right) \mathrm{Dir}\left(\phi \,|\, \nu\right) \left(\prod_{k=1}^{K} \theta_k^{N_k}\right) \mathrm{Dir}\left(\theta \,|\, \alpha\right). \tag{5.1}$$

変数 N_v, N_k は、単語 v と話題 k の出現の数で、総和は 1 である。変数 ϕ_v, θ_k は、単語 v と話題 k が出現する確率である。式 (5.2) の多項分布は、話題 k が確率 θ_k で現れる記事から N 語を取得して、話題 k の単語が N_k 個となる確率を与える。

$$P\left(z \,|\, \theta\right) = N! \prod_{k=1}^{K} \frac{\theta_k^{N_k}}{N_k!}, \quad \text{where} \quad \sum_{k=1}^{K} N_k = N. \tag{5.2}$$

式 (5.3) の**ディリクレ分布**は、話題 k の単語が $N_k - 1$ 個だった場合に、実際に話題 k が確率 θ_k で出現する確率を与える。これは、変数 N を連続量に拡張した多項分布である。式 (5.3) に従う話題 z の推定を、**潜在的ディリクレ配分法**と呼ぶ。

$$P\left(\theta\right) = \mathrm{Dir}\left(\theta \,|\, N\right) = \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} N_k\right) \prod_{k=1}^{K} \frac{\theta_k^{N_k - 1}}{\Gamma\left(N_k\right)} = \frac{1}{\mathrm{B}\left(N\right)} \prod_{k=1}^{K} \theta_k^{N_k - 1}. \tag{5.3}$$

式 (5.3) で、関数 Γ は**ガンマ関数**で、自然数の階乗 $(n-1)!$ を複素数の階乗に拡張した関数である。式 (5.4) に定義する。

$$\Gamma\left(n\right) = \int_0^\infty x^{n-1} e^{-x} dx. \tag{5.4}$$

関数 B は**ベータ関数**を多変量に拡張した複素関数で、式 (5.2) に現れる多項係数の逆数に相当する。式 (5.5) が成立する。

$$\mathrm{B}\left(N\right) = \int \prod_{k=1}^{K} x_k^{N_k+1} d\boldsymbol{x} = \int \cdots \int \prod_{k=1}^{K} x_k^{N_k+1} dx_1 dx_2 \cdots dx_K, \quad \text{where} \quad \sum_{k=1}^{K} x_k = 1. \tag{5.5}$$

式 (5.5) から、式 (5.6) が簡単に導ける。式 (5.6) の性質は、確率 θ を実際の記事から推定する際に、重要な役割を果たす。

$$P\left(z\right) = \int P\left(z \,|\, \theta\right) P\left(\theta\right) d\boldsymbol{\theta} = N! \frac{\mathrm{B}\left(\hat{\alpha}\right)}{\mathrm{B}\left(\alpha\right)} \prod_{k=1}^{K} \frac{1}{N_k!}, \quad \text{where} \quad \hat{\alpha}_k = \alpha_k + N_k. \tag{5.6}$$

記事を学習すると、確率 θ_k の最適値は式 (5.7) に従う。これを事後確率と呼ぶ。また、式 (5.2) を確率 θ_k の尤度と呼ぶ。学習前では、どの話題の出現も均等と仮定し、式 (5.3) に従って、確率 θ_k に初期値を設定できる。これを事前確率と呼ぶ。

$$\theta_k \sim P\left(\theta \,|\, z\right) = \frac{P\left(z \,|\, \theta\right) P\left(\theta\right)}{P\left(z\right)} = \frac{1}{\mathrm{B}\left(\hat{\alpha}\right)} \prod_{k=1}^{K} \theta_k^{\hat{\alpha}_k - 1}. \tag{5.7}$$

式 (5.7) は、観測を重視して、尤度を最適化する最尤推定と対照的で、観測の偏りを重視する。これを**ベイズ推定**と呼ぶ。最尤推定では、観測の偏りに起因した過学習が発生するが、その点が解消される。さて、式 (5.5) から式 (5.8) が導ける。

$$\mathbf{E}[\,\theta_k\,]\,\mathbf{E}[\,\phi_{kv}\,] = \frac{\hat{\alpha}_k}{\|\hat{\alpha}\|_1} \frac{\hat{\nu}_{kv}}{\|\hat{\nu}_k\|_1}, \quad \text{where} \quad \|\hat{\alpha}\|_1 = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k, \ \|\hat{\nu}_k\|_1 = \sum_{v=1}^{V} \nu_{kv}. \tag{5.8}$$

式 (5.8) に従う乱数により、変数 z を何度も選び直すと、最終的に真の分布 θ に収束する。これを**モンテカルロ法**と呼ぶ。第 6 章で学ぶ変分ベイズ法と比較して、収束に時間を要するが、複雑な確率分布にも適用でき、並列処理も容易である。

5.2 潜在的な話題の学習

第 5.1 節の潜在的ディリクレ配分法を実装する。まず、単語と話題の組 (w,z) を実装する。話題 z は無作為に初期化する。

```
case class Word[W](v: W, k: Int) {
  var z = util.Random.nextInt(k)
}
```

潜在的ディリクレ配分法の本体を実装する。引数は、記事と単語の集合に、話題の総数と、母数 α,ν の初期値を与える。

```
class LDA[D,W](texts: Map[D,Seq[W]], val k: Int, a: Double = 0.1, n: Double = 0.01) {
  val words = texts.map(_ -> _.map(Word(_,k)))
  val vocab = words.flatMap(_._2).groupBy(_.v)
  val nd = words.map((d,s) => d -> Array.tabulate(k)(k => s.count(_.z == k) + a)).toMap
  val nv = vocab.map((v,s) => v -> Array.tabulate(k)(k => s.count(_.z == k) + n)).toMap
  val nk = Array.tabulate(k)(k => nv.map(_._2(k)).sum)
  def apply(k: Int) = vocab.keys.toList.filter(v => nv(v).max == nv(v)(k))
  def probs(v: W, d: D) = 0.until(k).map(k => nv(v)(k) * nd(d)(k) / nk(k))
}
```

以上の実装を継承して、モンテカルロ法を実装する。まず、適当な組 (w,z) を選び、その分を変数 α_z,ν_z から除去する。次に、式 (5.8) に従う乱数を**ノイマンの棄却法**で生成し、話題 z を選び直し、母数 α_z,ν_z に加える。この手順を繰り返す。

```
class Gibbs[D,W](texts: Map[D,Seq[W]], k: Int, epochs: Int = 500) extends LDA(texts, k) {
  for(epoch <- 1 to epochs; (document,words) <- util.Random.shuffle(words); w <- words) {
    nk(w.z) -= 1
    nv(w.v)(w.z) -= 1
    nd(document)(w.z) -= 1
    val uni = util.Random.between(0, probs(w.v,document).sum.toDouble)
    w.z = probs(w.v,document).scan(0.0)(_+_).tail.indexWhere(_ >= uni)
    nd(document)(w.z) += 1
    nv(w.v)(w.z) += 1
    nk(w.z) += 1
  }
}
```

以上で完成した。使用例を示す。これは、素数 k を話題と、その倍数を単語と見做し、無作為に生成した数列を学習する。単語 v の共起と、記事毎に異なる話題の分布を再現した。学習が進むと、同じ約数を持つ整数が、同じ話題に分配される。

```
val bases = Seq(2,3,5,7,11)
def sample(n: Int, m: Int, k: Int) = Seq.fill(n)(k * util.Random.nextInt(m / k + 1))
val texts = Seq.fill(1000)(bases.map(sample(util.Random.nextInt(100),50,_)).flatten)
val gibbs = new Gibbs(texts.indices.zip(texts).toMap, bases.size)
```

5.3 単語の類似度の推定

確率 ϕ を単語の意味を表す変数と考え、その距離に従って、単語を分類しよう。第 6 章で実装する *k-means* を利用する。

```
val kmeans = new Kmeans(gibbs.nv.values.map(_.toList).toSeq, gibbs.k)
val topics = texts.flatten.distinct.topicBy(v => kmeans(gibbs.nv(v)))
for(topic <- topics.values) println(topic.toSeq.sorted.mkString(","))
```

以下に、出力を示す。共通の約数を持つ自然数が綺麗に分離できた。共起に基づく確率的な話題推定の有効性が窺える。

```
0,7,14,21,28,35,42,49,56,63,70,77
5,10,15,20,25,30,40,45,50,55,60,65,75,80
3,6,9,12,18,24,27,33,36,39,48,51,54,57,66,69,72,78
2,4,8,16,22,26,32,34,38,44,46,52,58,62,64,68,74,76
```

第6章　混合正規分布と最尤推定

適当な観測量 $\boldsymbol{x}$ から、それが従う確率分布 p を推定する手法が最尤推定である。具体的には、分布 p の母数を推定する。

$$\forall \boldsymbol{x}\colon \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{pmatrix} \sim p\left(\boldsymbol{x}\right). \tag{6.1}$$

例えば、正規分布 $\mathcal{N}$ を仮定する場合は、平均 $\boldsymbol{\mu}$ と分散 S が母数に該当する。ただし、分散 S とは分散共分散行列を指す。

$$\mathcal{N}\left(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{\mu}, S\right) = \frac{1}{\tilde{\mathcal{N}}\left(S\right)} \exp\left\{-\frac{1}{2}{}^t(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})S^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}, \quad \text{where} \ \ \tilde{\mathcal{N}}\left(S\right) = \sqrt{(2\pi)^D\left|S\right|}. \tag{6.2}$$

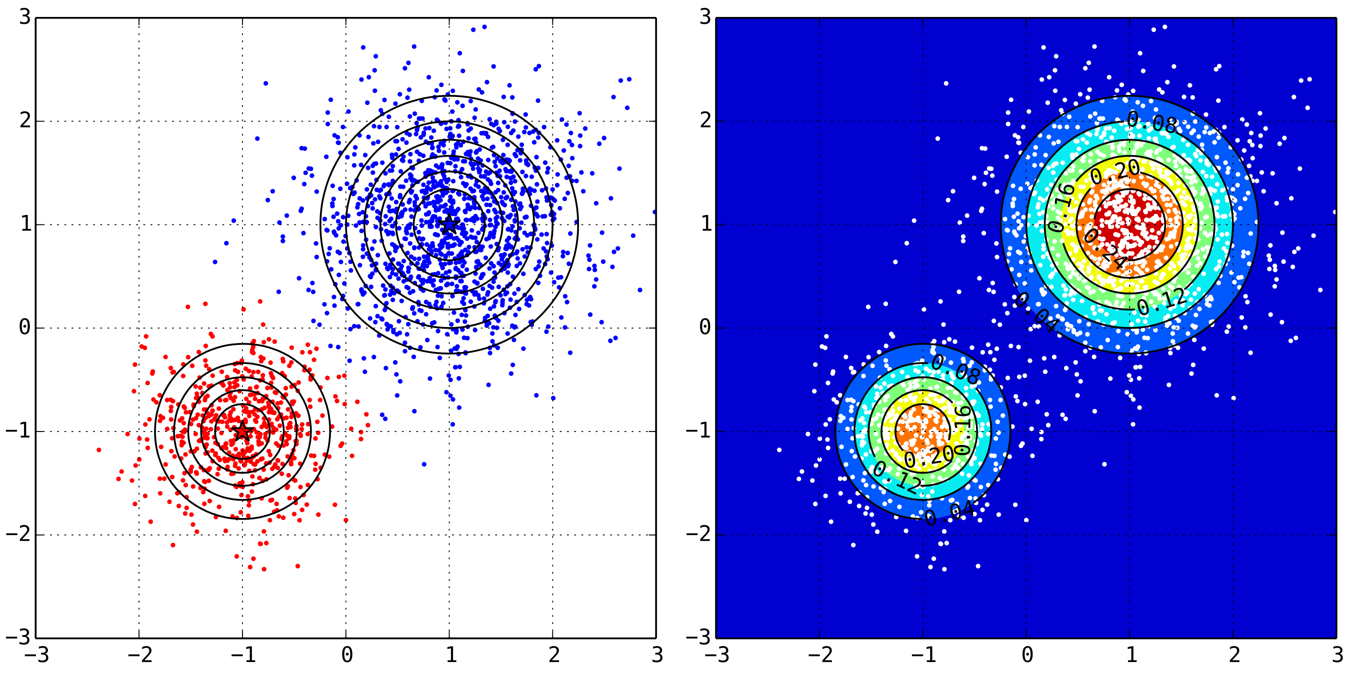
正規分布では簡単なので、複数の正規分布の線型和を考えよう。式 (6.3) を**混合正規分布**と呼ぶ。定数 w_k は加重である。

$$\boldsymbol{x} \sim p\left(\boldsymbol{x}\right) = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right), \quad \text{where} \ \ \sum_{k=1}^{K} w_k = 1. \tag{6.3}$$

正規分布を点 $\boldsymbol{x}$ の集団または**クラスタ**と見做せば、混合正規分布の最尤推定は、点 $\boldsymbol{x}$ が属す集団 C_k の推定と同義である。

$$P\left(\boldsymbol{x} \in C_k\right) = \frac{P\left(C_k\right) P\left(\boldsymbol{x} \,|\, C_k\right)}{P\left(\boldsymbol{x}\right)} = \frac{w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right)}{p\left(\boldsymbol{x}\right)}. \tag{6.4}$$

点 $\boldsymbol{x}$ がどの集団 C_k に属すかは観測できず、潜在的な情報である。この情報を変数 z で表すと、変数 z は潜在変数となる。Fig. 6.1 は、混合正規分布の例である。式 (6.3) の母数を推定し、点 $\boldsymbol{x}$ で支配的な集団を求めれば、点 $\boldsymbol{x}$ の帰属がわかる。



(a) cluster map.　(b) density map.

Fig. 6.1: Ground-truth data of a Gaussian mixture model.

Fig. 6.1(a) の分類問題を、**クラスタリング**と呼ぶ。推定対象の値が潜在変数な点を指して、教師なし学習とも呼ばれる。

6.1 クラスタリングの実装

第 6.1 節では、混合正規分布や最尤推定の議論は忘れて、集合を最適なクラスタに分割する、素朴な方法を検討しよう。理想的な集合 C_k では、その要素 $\boldsymbol{x}$ と、集合 C_k の重心 $\boldsymbol{\mu}_k$ の距離が最短となる。この命題を定式化して、式 (6.5) を得る。

$$\min \mathcal{D} = \min \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} \left\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k\right\|^2, \quad \text{where} \;\; \hat{z}_{nk} = \begin{cases} 1, & \text{if } \boldsymbol{x}_n \in C_k, \\ 0, & \text{if } \boldsymbol{x}_n \notin C_k. \end{cases} \tag{6.5}$$

式 (6.5) の最適化は、逐次的に行う。まず、重心 $\boldsymbol{\mu}_k$ を乱数で初期化する。次に、式 (6.6) に従って、変数 z_{nk} を修正する。

$$\hat{z}_{nk} = \begin{cases} 1, & \text{if } k = \arg\min_j \left\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_j\right\|^2, \\ 0, & \text{if } k \neq \arg\min_j \left\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_j\right\|^2. \end{cases} \tag{6.6}$$

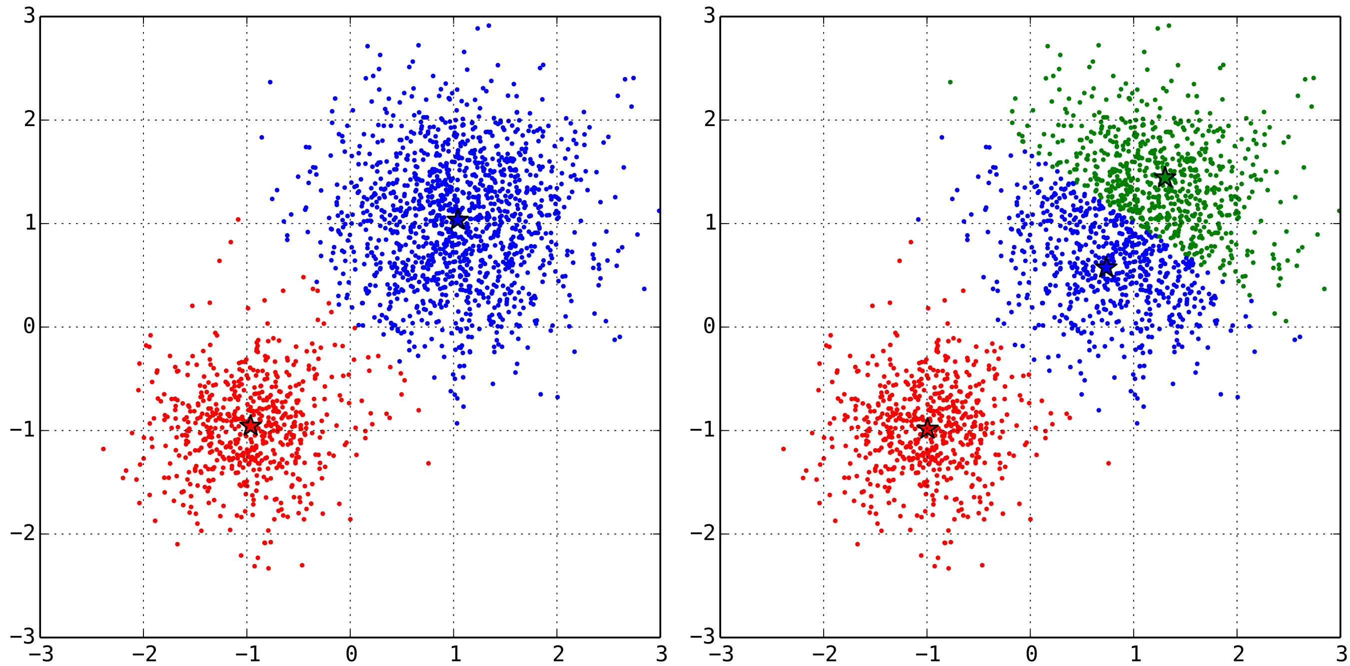
最後に、式 (6.7) により、重心 $\boldsymbol{\mu}_k$ を修正する。式 (6.7) は、変数 z_{nk} を固定して、式 (6.5) を重心 $\boldsymbol{\mu}_k$ で微分すると導ける。

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} z_{nk} \boldsymbol{x}_n, \quad \text{where} \;\; N_k = \sum_{n=1}^{N} z_{nk}, \Leftarrow \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} = 0. \tag{6.7}$$

以上の手順を繰り返し、最適解を得る。この手法を *k-means* と呼ぶ。混合正規分布を仮定した考察は、第 6.2 節で行う。以下に実装する。引数は、分割を行う点 $\boldsymbol{x}$ の集合と、分割後に得られる集団 C_k の個数と、操作を繰り返す回数である。

```
class Kmeans(x: Seq[Seq[Double]], k: Int, epochs: Int = 100) {
  val mu = Array.fill(k, x.map(_.size).min)(math.random)
  def apply(x: Seq[Double]) = mu.map(quads(x)(_).sum).zipWithIndex.minBy(_._1)._2
  def quads(a: Seq[Double])(b: Seq[Double]) = a.zip(b).map(_-_).map(d=> d * d)
  def estep = x.groupBy(apply).values.map(c=> c.transpose.map(_.sum / c.size))
  for(epoch <- 1 to epochs) estep.zip(mu).foreach(_.toArray.copyToArray(_))
}
```

Fig. 6.2 は、2 個の正規分布の混合分布に従う Fig. 6.1 の散布図を K 個の集団に分割した様子で、星型の点は重心を表す。



(a) $K = 2$. (b) $K = 3$.

Fig. 6.2: k-means clustering on Gaussian mixture model.

なお、正規分布の分散を考慮せず、同じ広がりを持つ集団を想定した点が、課題である。その様子は Fig. 6.2 にも窺える。

6.2 期待値最大化法の理論

第 6.2 節では、潜在変数 z を、その値が確率的に決まる**確率変数**と考え、分散を含む、混合正規分布の母数を推定しよう。観測変数 $\boldsymbol{x}$ に対し、潜在変数 z の確率は、式 (6.8) で求まる。観測に基づき推定した確率なので、これを事後確率と呼ぶ。

$$P\left(z_{nk} \,|\, \boldsymbol{x}_n, \theta\right) = \frac{w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right)}{p\left(\boldsymbol{x}_n\right)} = \gamma_{nk}. \tag{6.8}$$

次に、混合正規分布の尤度を定義する。尤度 $\mathcal{L}\left(\theta\right)$ は母数 θ の妥当性を表し、尤度の最大値を探す操作が最尤推定である。

$$\mathcal{L}\left(\theta\right) = P\left(\boldsymbol{x} \,|\, \theta\right) = \prod_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right). \tag{6.9}$$

微分計算の都合により、尤度を対数化して、対数尤度を最大化する母数を計算しよう。重心 $\boldsymbol{\mu}_k$ による偏微分の例を示す。

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} \log \mathcal{L}\left(\theta\right) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} \sum_{n=1}^{N} \log \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right) = \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} S_k^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k). \tag{6.10}$$

加重と重心と分散の推定値 $\hat{w}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}_k, \hat{S}_k$ は式 (6.11) となる。加重のみ、式 (6.3) より、**ラグランジュの未定乗数法**で求めた。

$$\hat{w}_k = \frac{N_k}{N}, \quad \left\{ \begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\mu}}_k &= \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} \boldsymbol{x}_n, \\ \hat{S}_k &= \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} (\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k)^t (\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k), \end{aligned} \right\} \quad \text{where} \;\; N_k = \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk}. \tag{6.11}$$

式 (6.11) より、事後確率 γ が求まれば、母数も求まるが、式 (6.8) より、事後確率 γ の計算には、母数の値が必要である。従って、解析的な求解は困難である。ここで、凸関数 f と、正の実数 γ_n は、式 (6.12) の**イェンゼンの不等式**を満たす。

$$\sum_{n=1}^{N} \gamma_n f(x_n) \geq f\left(\sum_{n=1}^{N} \gamma_n x_n \right), \quad \text{where} \quad \sum_{n=1}^{N} \gamma_n = 1. \tag{6.12}$$

対数が凹関数である点に注意して、式 (6.12) に式 (6.9) を代入して、式 (6.13) の関数 Q を得る。これを**補助関数**と呼ぶ。

$$\log \mathcal{L}\left(\theta\right) = \max_{\gamma} Q(\gamma, \theta) \geq \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \gamma_{nk} \log \frac{w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right)}{\gamma_{nk}} = Q(\gamma, \theta). \tag{6.13}$$

補助関数 Q は、式 (6.14) に示す、変数 γ, θ の修正を交互に繰り返すと単調増加し、最終的に、有限な実数値に収束する。

$$\left\{ \begin{aligned} \hat{\gamma}^{t+1} &= \arg\max_{\gamma} Q(\gamma, \theta^t), \\ \hat{\theta}^{t+1} &= \arg\max_{\theta} Q(\gamma^t, \theta). \end{aligned} \right. \tag{6.14}$$

式 (6.14) で、変数 γ^t, θ^t の最適値を求めると、式 (6.8) と式 (6.11) を得る。両者を交互に修正すると、尤度が最大化する。式 (6.8) で変数 γ を修正する操作は、式 (6.15) に示す、対数尤度の期待値を計算する操作である。これを *E-step* と呼ぶ。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{z}[\,\log P\left(\boldsymbol{x}, z \,|\, \theta\right)] = \int_z P\left(z \,|\, \boldsymbol{x}, \theta\right) \log P\left(\boldsymbol{x}, z \,|\, \theta\right) dz = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \gamma_{nk} \log \left\{ w_k \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, S_k\right) \right\}. \tag{6.15}$$

式 (6.11) で変数 θ を修正する操作は、尤度を最大化する。これを *M-step* と呼び、両者を合わせて**期待値最大化法**と呼ぶ。なお、単位行列 E と実数値 λ を使って、分散を λE と置くと、極限 $\lambda \to 0$ で式 (6.16) が成立し、変数 γ_{nk} も z_{nk} になる。

$$\lim_{\lambda \to 0} \lambda \log \left\{ w \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{\mu}, \lambda E\right) \right\} = \lim_{\lambda \to 0} \left\{ \lambda \log w - \lambda \frac{D}{2} \log(2\pi\lambda) - \frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu} \right\|^2 \right\} = -\frac{1}{2} \left\| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu} \right\|^2. \tag{6.16}$$

即ち、式 (6.17) が成立し、その最大化は式 (6.5) の最小化に帰結する。*k-means* は、期待値最大化法の特殊な例と言える。

$$\lim_{\lambda \to 0} \lambda \mathop{\mathbf{E}}_{\boldsymbol{z}}[\,\log P\left(\boldsymbol{x}, z \,|\, \theta\right)] = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} \left\| \boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k \right\|^2. \tag{6.17}$$

また、期待値最大化法も、第 6.4 節で学ぶ変分ベイズ法の特殊な場合であり、第 6.2 節と酷似した式が、何度か登場する。

6.3 期待値最大化法の実装

第 6.2 節の議論に基づき、期待値最大化法を実装する。まず、K 個の D 変量正規分布からなる混合正規分布を実装する。

```
class GMM(val d: Int, val k: Int) {
  val w = Array.fill(k)(1.0 / k)
  val m -> s = (Array.fill(k, d)(math.random), Array.fill(k, d)(math.random))
  def apply(x: Seq[Double]) = w.lazyZip(m).lazyZip(s).map(Normal(x)(_,_,_).p)
}
```

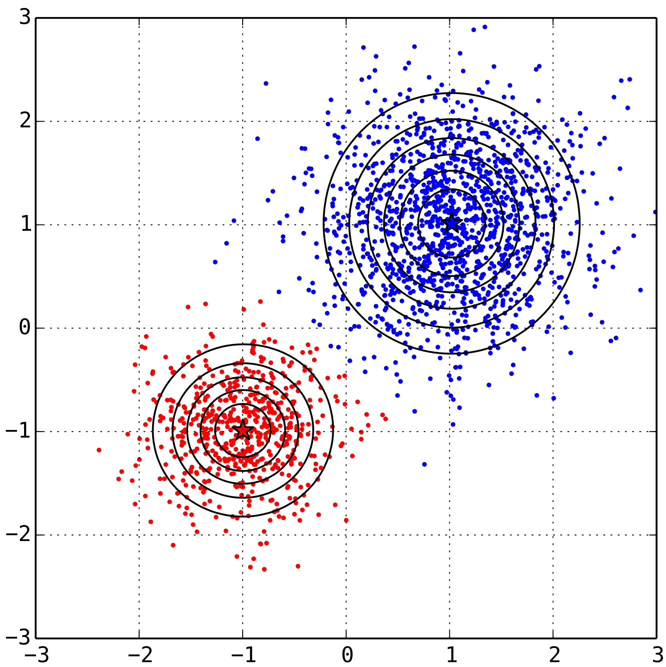
正規分布も実装する。引数は、加重と平均と分散である。なお、分散共分散行列を対角行列と仮定し、実装を単純化した。

```
case class Normal(x: Seq[Double])(w: Double, m: Seq[Double], s: Seq[Double]) {
  def n = math.exp(-0.5 * x.zip(m).map(_-_).map(d=>d*d).zip(s).map(_/_).sum)
  def p = w * n / math.pow(2 * math.Pi, 0.5 * x.size) / math.sqrt(s.product)
}
```

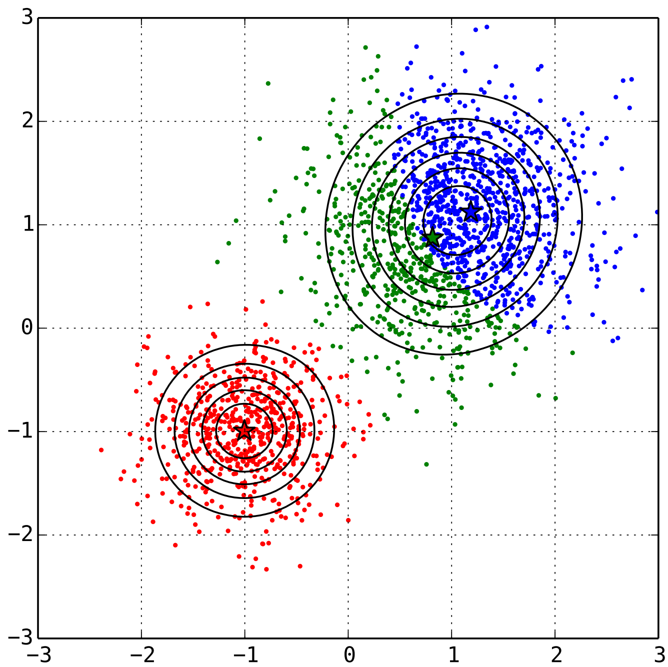
次に、最適化の手順を実装する。期待値最大化法の *E-step* と *M-step* を繰り返す。また、点 $\boldsymbol{x}$ が属す集団 C_k を推定する。

```
class EM(val x: Seq[Seq[Double]], val mm: GMM, epochs: Int = 100) {
  def mstep(P: Seq[Seq[Double]]) = {
    P.map(_.sum / x.size).copyToArray(mm.w)
    val m = P.map(_.zip(x).map((p,x) => x.map(x => p * x)).transpose.map(_.sum))
    val s = P.map(_.zip(x).map((p,x) => x.map(x => p*x*x)).transpose.map(_.sum))
    m.zip(P).map((m,p) => m.map(_ / p.sum)).zip(mm.m).foreach(_.copyToArray(_))
    s.zip(P).map((s,p) => s.map(_ / p.sum)).zip(mm.s).foreach(_.copyToArray(_))
    for((s,m) <- mm.s.zip(mm.m); d <- 0 until mm.d) s(d) -= m(d) * m(d)
  }
  for(epoch <- 1 to epochs) mstep(x.map(mm(_)).map(p=>p.map(_/p.sum)).transpose)
}
```

Fig. 6.3 は、Fig. 6.1 と同じ散布図を、期待値最大化法で学習した結果で、Fig. 6.1 と同様に、確率密度関数を可視化した。



(a) $K = 2$.



(b) $K = 3$.

Fig. 6.3: expectation maximization on a Gaussian mixture model.

期待値最大化法では、Fig. 6.2 の *k-means* と比較して、正規分布の密度の強弱を、境界付近の色分けに正しく反映できる。

6.4 変分ベイズ推定の理論

第 6.2 節の最尤推定では、母数の最適値を推定した。第 6.4 節で議論するベイズ推定では、母数の確率分布を推定できる。特に、最適解が複数ある場合にも対応でき、過学習の抑制効果も期待できる。議論を始めるに当たり、尤度を定義しよう。

$$\mathcal{L}(\theta) = p(\boldsymbol{x} \mid \theta) = \int p(\boldsymbol{x}, z)\, dz = \int p(\boldsymbol{x} \mid z)\, p(z \mid \theta)\, dz. \tag{6.18}$$

第 6.4 節では、潜在変数 z に加え、母数 θ も確率変数に含める。母数 θ の確率分布に母数 ϕ を設定し、尤度を定義し直す。

$$\mathcal{L}(\phi) = p(\boldsymbol{x} \mid \phi) = \iint p(\boldsymbol{x}, z, \theta \mid \phi)\, dz d\theta = \iint p(\boldsymbol{x} \mid z)\, p(z \mid \theta)\, p(\theta \mid \phi)\, dz d\theta. \tag{6.19}$$

式 (6.18) に対し、式 (6.19) を**周辺尤度**と呼ぶ。第 6.2 節と同様に、補助関数 F を定義する。関数 $\hat{p}$ は、適当な分布である。

$$\log \mathcal{L}(\phi) = \log \iint \hat{p}(z, \theta)\, \frac{p(\boldsymbol{x}, z, \theta)}{\hat{p}(z, \theta)} dz d\theta \geq \iint \hat{p}(z, \theta) \log \frac{p(\boldsymbol{x}, z, \theta)}{\hat{p}(z, \theta)} dz d\theta = F(\hat{p}). \tag{6.20}$$

補助関数 F を最大化すると、尤度 $\mathcal{L}$ に収束する。その差は、式 (6.21) に示す**カルバック・ライブラー情報量**の形になる。式 (6.21) は、変数 z, θ が従う分布 $\hat{p}$ を仮定した場合の、分布 $\hat{p}, p$ の平均情報量の差である。両者が同じ場合に 0 となる。

$$\log \mathcal{L}(\boldsymbol{x}) - F(\hat{p}) = \iint \hat{p}(z, \theta) \log p(\boldsymbol{x})\, dz d\theta - F(\hat{p}) = \iint \hat{p}(z, \theta) \log \frac{\hat{p}(z, \theta)}{p(z, \theta \mid \boldsymbol{x})} dz d\theta = D(\hat{p} \| p) \geq 0. \tag{6.21}$$

関数 $\hat{p}$ を引数に取る関数 F を、**汎関数**と呼ぶ。汎関数 F の極値を与える引数 $\hat{p}$ を探索する問題は、**変分問題**と呼ばれる。残念ながら、複数の引数を取る関数 $\hat{p}$ の探索は難しく、式 (6.22) に示す**平均場近似**により、変数間の独立性を仮定する。

$$\hat{p}(z, \theta) = f(z) g(\theta), \quad \text{where} \quad \begin{cases} \displaystyle\int f(z) dz = 1, \\ \displaystyle\int g(\theta) d\theta = 1. \end{cases} \tag{6.22}$$

関数 f, g に対する汎関数 F の変分問題を解く。ここで、式 (6.23) に示す**オイラー・ラグランジュ方程式**の特殊形を使う。

$$\frac{\partial}{\partial f} \frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial f} \int f(z) g(\theta) \log \frac{p(\boldsymbol{x}, z, \theta)}{f(z) g(\theta)} d\theta = 0. \tag{6.23}$$

関数 f の値を固定し、単に変数と考えて偏微分すると、式 (6.24) を得る。関数 g に対し、式 (6.22) の制約条件を使った。

$$\frac{\partial}{\partial f} \int f(z) g(\theta) \log \frac{p(\boldsymbol{x}, z, \theta)}{f(z) g(\theta)} d\theta = \int g(\theta) \log \frac{p(\boldsymbol{x}, z, \theta)}{f(z) g(\theta)} d\theta - 1 = 0. \tag{6.24}$$

式 (6.24) から、関数 f の最適値を求める。式 (6.22) の近似で仮定した、変数 z, θ 間の独立性より、式 (6.25) が成立する。

$$\log f(z) = \log f(z) \int g(\theta) d\theta = \int g(\theta) \log f(z) d\theta. \tag{6.25}$$

関数 f, g の最適値 $\hat{f}, \hat{g}$ は、式 (6.26) となる。関数 f, g を交互に修正すると、補助関数 F が増加し、周辺尤度に収束する。式 (6.26) は、式 (6.14) の *E-step* と *M-step* に対応し、第 6.2 節で学んだ期待値最大化法に対し、**変分ベイズ法**と呼ばれる。

$$\begin{cases} \hat{f}(z) \propto \exp \displaystyle\int g(\theta) \log p(\boldsymbol{x}, z, \theta)\, d\theta = \exp \mathop{\mathbf{E}}_{g}[\log p(\boldsymbol{x}, z, \theta)], \\ \hat{g}(\theta) \propto \exp \displaystyle\int f(z) \log p(\boldsymbol{x}, z, \theta)\, dz = \exp \mathop{\mathbf{E}}_{f}[\log p(\boldsymbol{x}, z, \theta)]. \end{cases} \tag{6.26}$$

なお、母数 θ に対し、適当な事前分布を設定すると、分布 $\hat{g}$ と事前分布 p の乖離を抑制し、過学習を防ぐ効果が生じる。

$$F(\hat{p}) = \iint f(z) g(\theta) \log \frac{p(\boldsymbol{x}, z \mid \theta)}{f(z)} \frac{p(\theta)}{g(\theta)} dz d\theta = \mathop{\mathbf{E}}_{f,g}\left[\log \frac{p(\boldsymbol{x}, z \mid \theta)}{f(z)}\right] - D(g(\theta) \| p(\theta)). \tag{6.27}$$

無限の個数の点 $\boldsymbol{x}_n$ を学習した場合の尤度は、**ラプラス近似**で式 (6.28) と近似でき、**ベイズ情報量基準**の形が出現する。

$$F(\hat{p}) \simeq \mathop{\mathbf{E}}_{f,g}\left[\log \frac{p(\boldsymbol{x}, z \mid \theta)}{f(z)}\right] - \frac{|\hat{\theta}|}{2} \log N + \log p\left(\hat{\theta}\right). \tag{6.28}$$

式 (6.28) には、疎な基底を学習し、母数の個数 $|\theta|$ を実質的に削減する**正則化**の効果があり、過学習の抑制が期待できる。

6.5 母数の事前分布の設定

潜在変数 z や母数 θ の事前分布を注意深く設定すると、事前分布と事後分布が同じ形の分布になり、計算が容易になる。これを**共役分布**と呼ぶ。混合正規分布の母数にも、共役分布が存在する。まず、潜在変数 z が多項分布に従うと仮定する。

$$p(z \,|\, w) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} w_k^{z_{nk}}, \ \text{where} \ \forall n\colon \sum_{k=1}^{K} z_{nk} = 1. \tag{6.29}$$

式 (6.29) は、潜在変数 z に対する加重 w の尤度でもある。加重 w の事前分布を、式 (6.30) のディリクレ分布で定義する。これは、K 個の排反事象の反復試行で、事象 k の出現が $\alpha_k - 1$ 回だった場合に、事象 k の確率が w_k である確率を表す。

$$p(w) = \mathrm{Dir}(w \,|\, \alpha) = \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right) \prod_{k=1}^{K} \frac{w_k^{\alpha_k - 1}}{\Gamma(\alpha_k)} = \frac{1}{\mathrm{B}(\alpha)} \prod_{k=1}^{K} w_k^{\alpha_k - 1}. \tag{6.30}$$

関数 Γ はガンマ関数で、階乗を拡張した複素関数である。関数 B はベータ関数で、多項係数を拡張した複素関数である。平均 $\boldsymbol{\mu}$ の事前分布には、式 (6.31) の正規分布を仮定する。母数 σ には、式 (6.31) の分散を徐々に減少させる効果がある。

$$p(\boldsymbol{\mu} \,|\, S) = \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\mu}_k \,\middle|\, \boldsymbol{m}_k, \sigma_k^{-1} S_k\right). \tag{6.31}$$

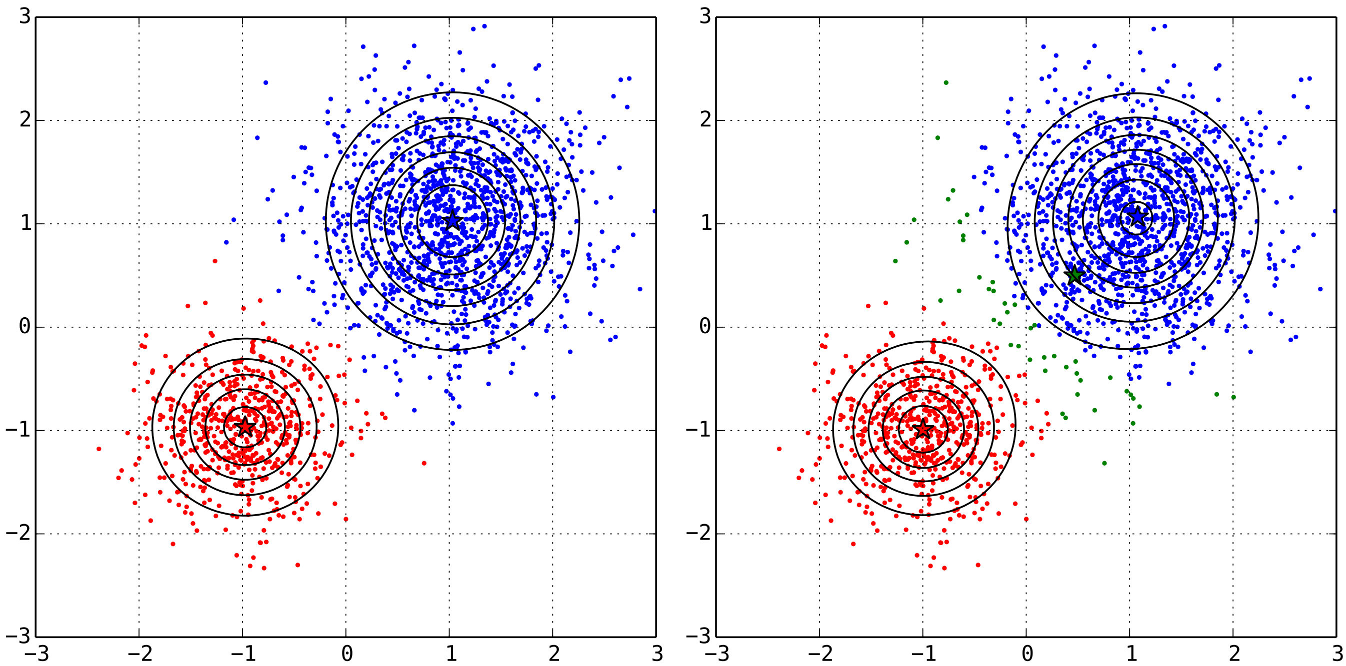
式 (6.31) は、平均 $\boldsymbol{\mu}$ に対する分散 S の尤度でもある。分散 S の事前分布は、式 (6.32) の**逆ウィシャート分布**を仮定する。

$$p(S) = \prod_{k=1}^{K} \mathcal{W}\left(S_k^{-1} \,\middle|\, W_k, \nu_k\right) = \prod_{k=1}^{K} \frac{1}{\tilde{\mathcal{W}}(W_k, \nu_k)} \left|S_k^{-1}\right|^{\frac{\nu_k - D - 1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \mathrm{tr}\left(W_k^{-1} S_k^{-1}\right)\right\}. \tag{6.32}$$

これは、分散 W の D 変量正規分布に従う ν 個の変数 $\boldsymbol{x}_n$ の直積 ${\boldsymbol{x}_n}^t \boldsymbol{x}_n$ の和の分布である。即ち、標本分散の分布である。

$$\tilde{\mathcal{W}}(W_k, \nu_k) = 2^{\frac{\nu_k D}{2}} \pi^{\frac{D(D-1)}{4}} \left|W_k\right|^{\frac{\nu_k}{2}} \prod_{d=0}^{D-1} \Gamma\left(\frac{\nu_k - d}{2}\right). \tag{6.33}$$

Fig. 6.4 は、Fig. 6.1 と同じ散布図を、変分ベイズ法で学習した結果で、Fig. 6.1 と同様に、確率密度関数を可視化した。



(a) $K = 2$. (b) $K = 3$.

Fig. 6.4: variational Bayesian inference on a Gaussian mixture model.

正則化の恩恵により、集団の個数を過剰に設定した場合でも、余剰の集団の加重が徐々に低下し、過学習が抑制される。

6.6 母数の事後分布の導出

変分ベイズ法の式 (6.26) に対し、第 6.5 節で設定した共役事前分布を代入する。まず、全ての変数の結合確率を求める。

$$p(\boldsymbol{x}, z, w, \boldsymbol{\mu}, S) = p(\boldsymbol{x}, z \mid w, \boldsymbol{\mu}, S)\, p(w, \boldsymbol{\mu}, S) = p(\boldsymbol{x} \mid z, \boldsymbol{\mu}, S)\, p(z \mid w)\, p(w) p(\boldsymbol{\mu} \mid S)\, p(S). \tag{6.34}$$

E-step を導く。母数 θ の事前分布を固定し、潜在変数 z の分布を最適化する操作なので、その間に式 (6.35) が成立する。

$$f(z) \propto \exp \mathop{\mathbf{E}}_{g}[\log p(\boldsymbol{x}, z \mid w, \boldsymbol{\mu}, S)] = \exp \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} \left\{ \mathop{\mathbf{E}}_{w}[\log w_k] + \mathop{\mathbf{E}}_{\boldsymbol{\mu},S}[\log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_k, S_k)] \right\} \propto \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \gamma_{nk}^{z_{nk}}. \tag{6.35}$$

式 (6.35) に現れる、加重 w の対数の期待値は、式 (6.36) となる。関数 ψ は**ディガンマ関数**で、関数 Γ の対数微分である。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{w}[\log w_k] = \frac{1}{\mathrm{B}(\alpha)} \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \int \prod_{j=1}^{K} w_j^{\alpha_j - 1} dw = \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \log \mathrm{B}(\alpha) = \psi(\alpha_k) - \psi\left(\sum_{j=1}^{K} \alpha_j\right). \tag{6.36}$$

式 (6.35) に現れる、正規分布の対数の期待値は、式 (6.2) の正規分布の確率密度関数より、式 (6.37) の形に分解できる。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{\boldsymbol{\mu},S}[\log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_k, S_k)] = -\frac{1}{2} \mathop{\mathbf{E}}_{\boldsymbol{\mu},S}\left[D \log 2\pi + \log |S_k| + {}^t(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) S_k^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) \right]. \tag{6.37}$$

式 (6.37) に現れる、行列式 $|S|$ の対数の期待値は、式 (6.32) の確率密度関数を母数 ν_k で偏微分すれば、式 (6.38) となる。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{S}[\log |S_k|] = 2 \int \frac{\partial \tilde{\mathcal{W}}}{\partial \nu_k} \frac{\mathcal{W}}{\tilde{\mathcal{W}}} dS - 2 \int \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \nu_k} dS = \frac{2}{\tilde{\mathcal{W}}} \frac{\partial \tilde{\mathcal{W}}}{\partial \nu_k} = -D \log 2 - \log |W_k| - \sum_{d=0}^{D-1} \psi\left(\frac{\nu_k - d}{2}\right). \tag{6.38}$$

式 (6.37) に現れる、行列積の期待値は、母数 $\boldsymbol{\mu}$ が、式 (6.31) の正規分布に従う事実と因数分解により、式 (6.39) となる。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{\boldsymbol{\mu},S}\left[{}^t(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) S_k^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) \right] = \nu_k {}^t(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{m}_k) W_k (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{m}_k) + \frac{D}{\sigma_k}. \tag{6.39}$$

M-step を導く。事後確率 γ を式 (6.40) に代入し、事前分布と事後分布の共役性に注意して、母数の事後分布を求めよう。

$$g(\theta) \propto \exp \left\{ \mathop{\mathbf{E}}_{z}[\log p(\boldsymbol{x}, z \mid w, \boldsymbol{\mu}, S)] + \log p(w) + \log p(\boldsymbol{\mu} \mid S) + \log p(S) \right\}. \tag{6.40}$$

式 (6.40) で、変数 $\boldsymbol{x}, z$ の結合確率の対数の期待値は、式 (6.2) の正規分布と式 (6.29) の多項分布より、式 (6.41) となる。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{z}[\log p(\boldsymbol{x}, z \mid w, \boldsymbol{\mu}, S)] = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} \left\{ D \log 2\pi + |S_k| + {}^t(\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) S_k^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k) - 2 \log w_k \right\}. \tag{6.41}$$

共役性より、母数 θ の事後分布は、事前分布の母数 ϕ を、推定値 $\hat{\phi}$ に置換した場合と等値であり、式 (6.42) が成立する。

$$\mathop{\mathbf{E}}_{z}[\log p(\theta \mid \boldsymbol{x}, z)] = \log p\left(\theta \,\middle|\, \hat{\phi}\right) = \mathop{\mathbf{E}}_{z}[\log p(\boldsymbol{x}, z \mid \theta)] + \log p(\theta \mid \phi) - \mathop{\mathbf{E}}_{z}[\log p(\boldsymbol{x}, z)]. \tag{6.42}$$

式 (6.42) より、母数 α, σ, ν の推定値に対して、式 (6.43) が成立する。変数 N_k は、集団 C_k の要素の個数の期待値を表す。

$$\hat{\alpha}_k - \alpha_k = \hat{\sigma}_k - \sigma_k = \hat{\nu}_k - \nu_k = N_k = \sum_{n=1}^{N} z_{nk}. \tag{6.43}$$

母数 $\boldsymbol{m}$ の場合は、式 (6.44) が成立する。期待値最大化法の式 (6.11) を考えれば、事前分布と標本平均の加重平均である。

$$\hat{\boldsymbol{m}}_k = \frac{1}{\hat{\sigma}_k} \left(\sigma_k \boldsymbol{m}_k + \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} \boldsymbol{x}_n \right). \tag{6.44}$$

母数 W の場合は、式 (6.45) が成立する。これも、式 (6.45) の右辺に着目すれば、事前分布と標本分散の加重平均である。

$$\hat{W}_k^{-1} = W_k^{-1} + \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} \boldsymbol{x}_n {}^t\boldsymbol{x}_n + \sigma_k \boldsymbol{m}_k {}^t\boldsymbol{m}_k - \hat{\sigma}_k \hat{\boldsymbol{m}}_k {}^t\hat{\boldsymbol{m}}_k. \tag{6.45}$$

式 (6.45) の導出では、分散 W の**コレスキー分解**により下三角行列 T が存在して、式 (6.46) が成立する性質を利用した。

$${}^t\boldsymbol{x} W \boldsymbol{x} = ({}^t\boldsymbol{x} T)({}^tT \boldsymbol{x}) = {}^t({}^tT \boldsymbol{x})({}^tT \boldsymbol{x}) = \mathrm{tr}\left(({}^tT \boldsymbol{x}){}^t({}^tT \boldsymbol{x})\right) = \mathrm{tr}\left({}^tT (\boldsymbol{x}{}^t\boldsymbol{x}) T\right) = \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{x}{}^t\boldsymbol{x}) W\right). \tag{6.46}$$

事前分布と最尤推定の最適値の加重平均が現れる点には、式 (6.27) で議論した、事前分布による正則化の効果が窺える。

6.7 変分ベイズ推定の実装

第 6.5 節の議論に基づき、変分ベイズ推定を実装する。まず、本体を実装する。引数は、期待値最大化法と同等である。式 (6.43) より、母数 α, σ, ν は、初期値を揃えると、以後の最適化を通じて常に同じ値になる。そこで、同じ変数にした。

```
class VB(val x: Seq[Seq[Double]], val mm: GMM, epochs: Int = 1000, W: Double = 1) {
  val n = Array.fill(mm.k)(1.0 / mm.k)
  val w -> m = (Array.fill(mm.k, mm.d)(W), Array.fill(mm.k, mm.d)(math.random))
  for(epoch <- 1 to epochs) new MstepGMM(this, mm, new EstepGMM(this, mm).post)
}
```

E-step を実装する。式 (6.35) に基づき、潜在変数 z の事後確率 γ を計算する。最後に、総和で事後確率 γ を規格化する。

```
class EstepGMM(vb: VB, mm: GMM) {
  val eq35 = vb.n.map(Digamma).map(_-Digamma(vb.n.sum))
  val eq3A = vb.n.map(n=>0.to(mm.d-1).map(d=>(n-d)/2).map(Digamma))
  val eq36 = eq3A.zip(vb.w).map(_.sum-_.map(math.log).sum).map(_/2)
  def wish = vb.x.toArray.map(_.toArray).map(vb.m-_).map(d=>d.mul(d).div(vb.w))
  def eq34 = wish.map(_.zip(vb.n).map(-_.sum/2*_))+eq35+eq36-vb.n.map(mm.d/_/2)
  def post = eq34.map(_.map(math.exp)).map(x=>x.map(_/x.sum)).toSeq.transpose
}
```

M-step を実装する。期待値最大化法の実装を流用して、母数の最尤推定値を計算し、事前分布との加重平均を計算する。

```
class MstepGMM(vb: VB, mm: GMM, post: Seq[Seq[Double]]) {
  new EM(vb.x, mm, 0).mstep(post)
  val eq11 = post.map(_.sum).toArray
  val eq38 = vb.n.zip(eq11).map(_+_)
  val eq39 = vb.m.mul(vb.n).div(eq38).add(mm.m.mul(eq11).div(eq38))
  val eq41 = vb.m.mul(vb.m).mul(vb.n).sub(eq39.mul(eq39).mul(eq38))
  val eq40 = mm.s.add(mm.m.mul(mm.m)).mul(eq11).add(vb.w.add(eq41))
  eq38.copyToArray(vb.n)
  eq39.zip(vb.m).foreach(_.copyToArray(_))
  eq40.zip(vb.w).foreach(_.copyToArray(_))
}
```

M-step では、平均や分散の配列の四則演算が頻繁に現れる。簡潔な実装を目指し、暗黙の型変換で四則演算を実現した。

```
implicit class Vector(x: Array[Array[Double]]) {
  def +(y: Array[Double]) = x.map(_.zip(y).map(_+_))
  def -(y: Array[Double]) = x.map(_.zip(y).map(_-_))
  def add(y: Array[Double]) = x.zip(y).map((x,y) => x.map(_+y))
  def sub(y: Array[Double]) = x.zip(y).map((x,y) => x.map(_-y))
  def mul(y: Array[Double]) = x.zip(y).map((x,y) => x.map(_*y))
  def div(y: Array[Double]) = x.zip(y).map((x,y) => x.map(_/y))
  def add(y: Array[Array[Double]]) = x.zip(y).map(_.zip(_).map(_+_))
  def sub(y: Array[Array[Double]]) = x.zip(y).map(_.zip(_).map(_-_))
  def mul(y: Array[Array[Double]]) = x.zip(y).map(_.zip(_).map(_*_))
  def div(y: Array[Array[Double]]) = x.zip(y).map(_.zip(_).map(_/_))
}
```

最後に、ディガンマ関数を実装する。詳細は省くが、**ワイエルシュトラスの無限乗積表示**を利用して、簡単に計算できる。

```
object Digamma extends Function[Double, Double] {
  def apply(x: Double): Double = {
    var index -> value = (x, 0.0)
    def d = 1.0 / (index * index)
    while(index < 49) (value -= 1 / index, index += 1)
    val s = d * (1.0 / 12 - d * (1.0 / 120 - d / 252))
    (value + math.log(index) - 0.5 / index - s)
  }
}
```