

確率的分類(10章)と 系列データの分類(11章)

杉山将・本多淳也

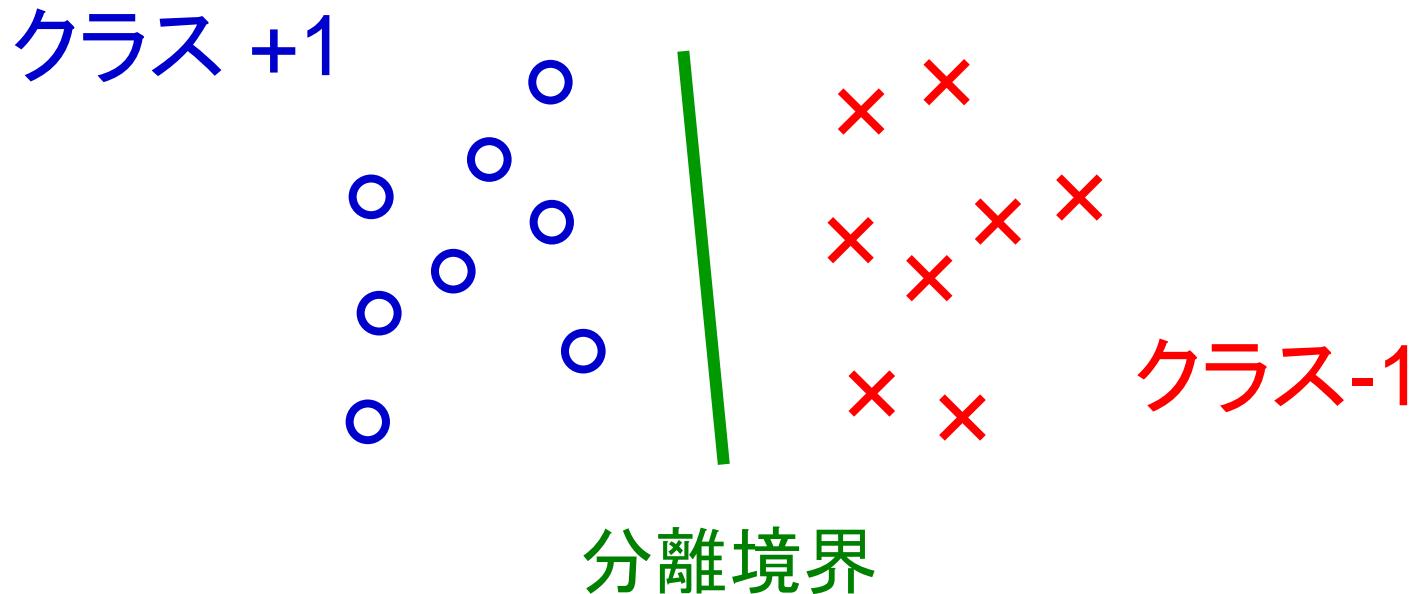
sugi@k.u-tokyo.ac.jp, jhonda@k.u-tokyo.ac.jp

<http://www.ms.k.u-tokyo.ac.jp>

2クラスの分類問題

■ ラベル付き訓練データ: $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$

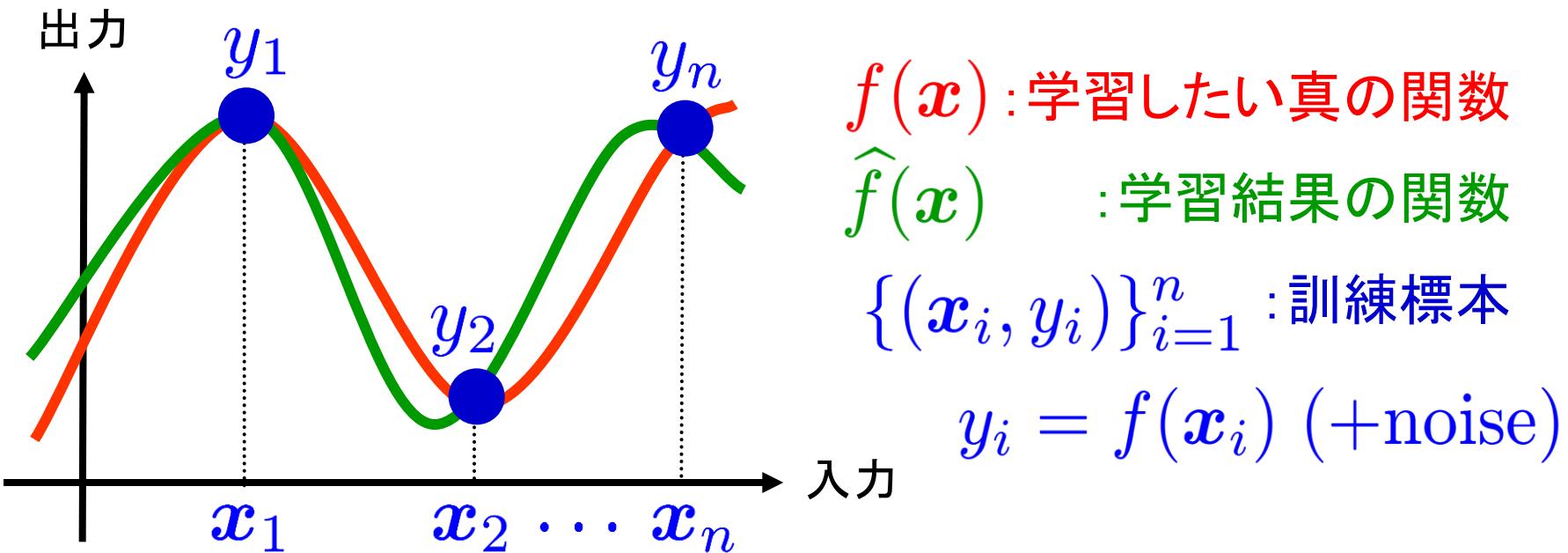
- 入力 x は d 次元の実ベクトル $x \in \mathbb{R}^d$
- 出力 y は 2 値のクラスラベル $y \in \{+1, -1\}$



■ クラス間の分離境界を求めたい

識別モデルによるパターン識別

3



関数 $\hat{f}(x)$ の「良さ」を何らかの規準で定量化し,
それを最適化するものを直接求める

パラメータに関する線形モデル

4

■ 線形モデル:

$$f_{\theta}(x) = \sum_{j=1}^b \theta_j \phi_j(x)$$

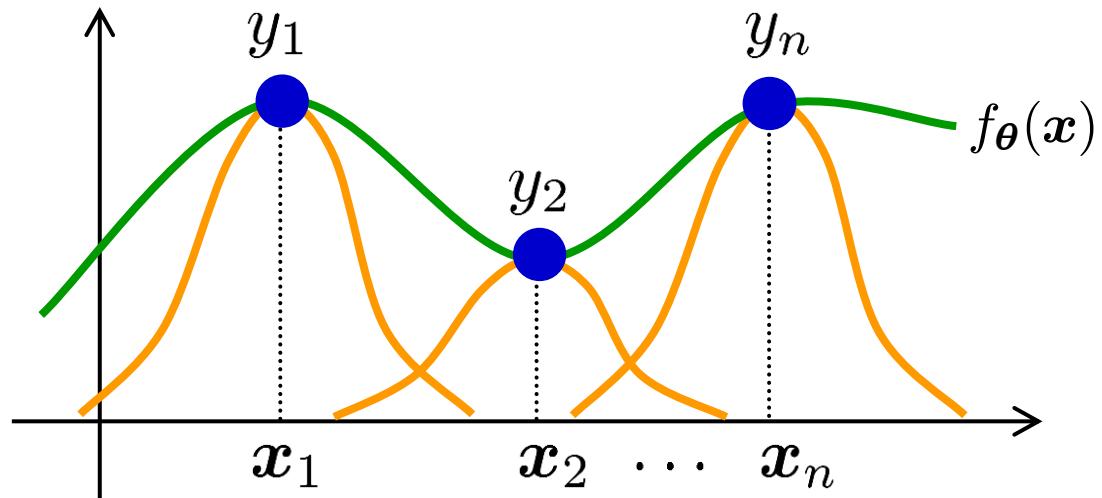
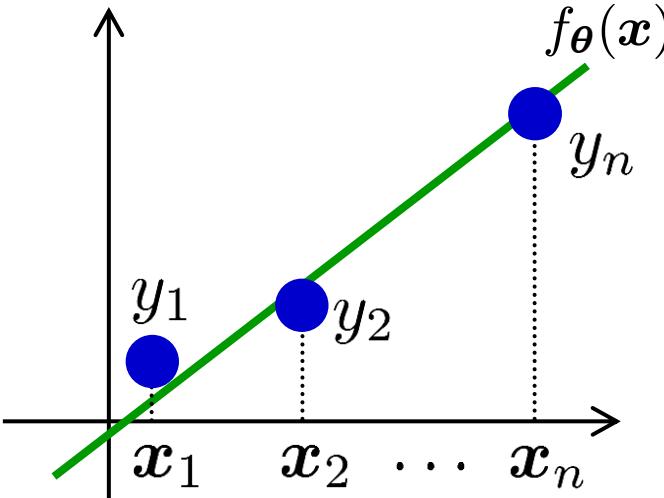
$\{\phi_j(x)\}_{j=1}^b$
: 基底関数

■ カーネルモデル:

ガウスカーネル

$$f_{\theta}(x) = \sum_{j=1}^n \theta_j K(x, x_j)$$

$$K(x, c) = \exp\left(-\frac{\|x - c\|^2}{2h^2}\right)$$



回帰学習による分類

■ パラメータを正則化最小二乗回帰で学習

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta} \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(f_{\theta}(x_i) - y_i \right)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\theta\|^2 \right]$$

$\lambda (\geq 0)$: 正則化パラメータ

■ テストパターンの分類:

$$\hat{y} = \operatorname{sign} (f_{\hat{\theta}}(x)) = \begin{cases} +1 & (f_{\hat{\theta}}(x) > 0) \\ 0 & (f_{\hat{\theta}}(x) = 0) \\ -1 & (f_{\hat{\theta}}(x) < 0) \end{cases}$$

0/1-損失関数とマージン

■ 分類問題では、学習した関数の符号だけが必要

$$\hat{y} = \text{sign}(f_{\hat{\theta}}(x))$$

■ ℓ_2 -損失でなく、0/1-損失の方が自然

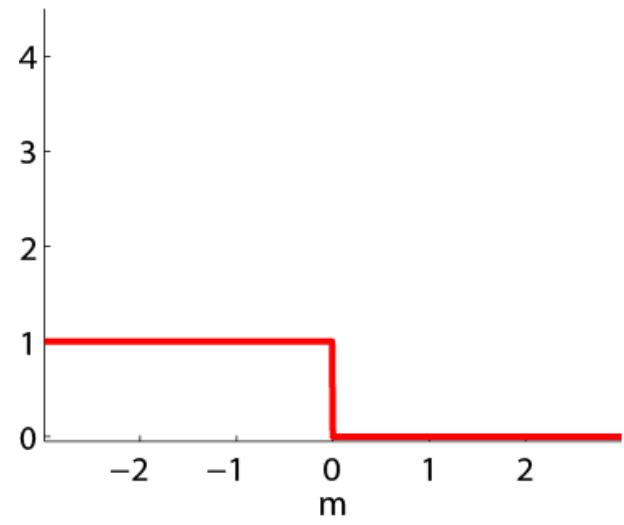
$$J_{0/1}(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (1 - \text{sign}(m_i))^2$$

$$m_i = f_{\theta}(x_i)y_i$$

マージン

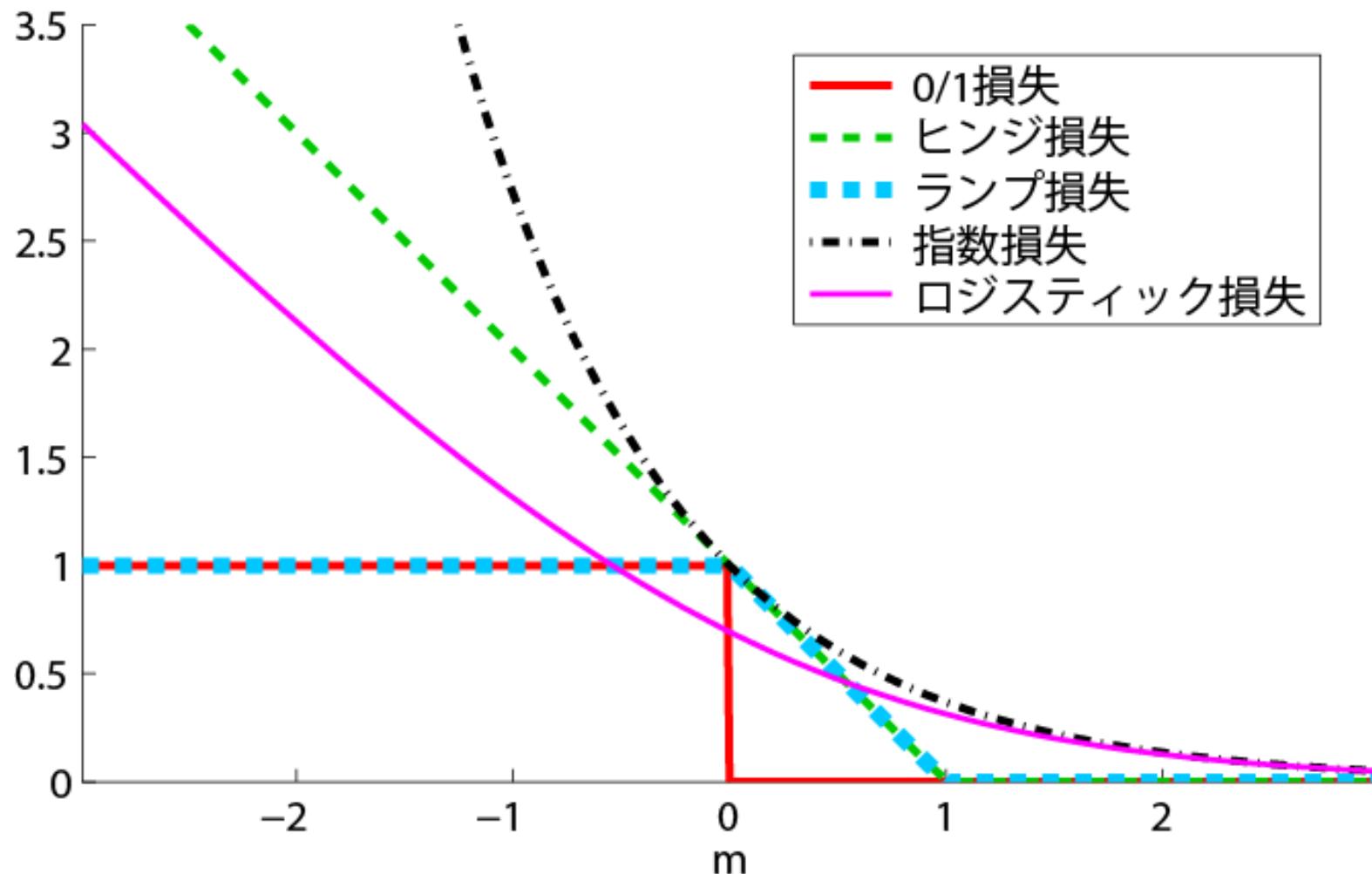
■ $J_{0/1}(\theta)$ は誤分類標本数に相当

- 分類の損失としては理想的
- しかし傾きを持たない非連続な関数
- 0/1-損失の最小化はNP困難



代理損失

■ 分類には様々な代理損失が用いられる



講義の流れ



1. 確率的分類(10章)

- A) ロジスティック回帰
- B) 確率的勾配法
- C) ロジスティック損失最小化
- D) 二乗誤差最小化

2. 系列データの分類(11章)

確率的分類

■これまで、学習した関数の符号

$$\hat{y} = \text{sign}(f_{\hat{\theta}}(x))$$

によって分類を行う手法を紹介してきた

■クラス事後確率 $p(y|x)$ の学習に基づく分類：

$$\hat{y} = \underset{y=1, \dots, c}{\operatorname{argmax}} p(y|x)$$

- クラス予測に対する**信頼度**が得られる
(信頼度が低い場合は自動分類をあきらめる等)
- **多クラス分類**が自然に行える
- モデルが正しくない場合の性能が保証しにくい

講義の流れ



1. 確率的分類(10章)

- A) ロジスティック回帰
- B) 確率的勾配法
- C) ロジスティック損失最小化
- D) 二乗誤差最小化

2. 系列データの分類(11章)

ロジスティックモデル

一般化線形モデルの一種

$$q(y|x; \theta) = \frac{\exp\left(\sum_{j=1}^b \theta_{y,j} \phi_j(x)\right)}{\sum_{y'=1}^c \exp\left(\sum_{j=1}^b \theta_{y',j} \phi_j(x)\right)}$$

$$= \frac{\exp\left(\boldsymbol{\theta}_y^\top \boldsymbol{\phi}(x)\right)}{\sum_{y'=1}^c \exp\left(\boldsymbol{\theta}_{y'}^\top \boldsymbol{\phi}(x)\right)}$$

$$\boldsymbol{\theta} = (\underbrace{\theta_{1,1}, \dots, \theta_{1,b}}_{\text{class 1}}, \dots, \underbrace{\theta_{c,1}, \dots, \theta_{c,b}}_{\text{class } c})^\top$$

$$= (\boldsymbol{\theta}_1^\top, \dots, \boldsymbol{\theta}_c^\top)^\top$$

■ $\boldsymbol{\theta}_y^\top \boldsymbol{\phi}(x)$ が大きい y ほど現れやすい

講義の流れ



1. 確率的分類(10章)

- A) ロジスティック回帰
- B) 確率的勾配法
- C) ロジスティック損失最小化
- D) 二乗誤差最小化

2. 系列データの分類(11章)

数学演習

■ ロジスティックモデルに対する対数尤度

$$J_i(\boldsymbol{\theta}) = \log q(y_i | \mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})$$

$$= \log \frac{\exp\left(\boldsymbol{\theta}_{y_i}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)\right)}{\sum_{y'=1}^c \exp\left(\boldsymbol{\theta}_{y'}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)\right)}$$

の $\boldsymbol{\theta}_y = (\theta_{y,1}, \dots, \theta_{y,b})^\top$ に関する勾配は
次式で与えられることを示せ

$$\nabla_y J_i(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{\exp\left(\boldsymbol{\theta}_y^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)\right) \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)}{\sum_{y'=1}^c \exp\left(\boldsymbol{\theta}_{y'}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)\right)} + \begin{cases} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i) & (y = y_i) \\ \mathbf{0} & (y \neq y_i) \end{cases}$$

解答例

$$J_i(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\theta}_{y_i}^\top \phi(\mathbf{x}_i) - \log \left(\sum_{y'=1}^c \exp \left(\boldsymbol{\theta}_{y'}^\top \phi(\mathbf{x}_i) \right) \right)$$

■ それぞれの項の微分を計算すると

- $\nabla_y \boldsymbol{\theta}_{y_i}^\top \phi(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} \phi(\mathbf{x}_i) & (y = y_i) \\ \mathbf{0} & (y \neq y_i) \end{cases}$

- $\nabla_y \log \left(\sum_{y'=1}^c \exp \left(\boldsymbol{\theta}_{y'}^\top \phi(\mathbf{x}_i) \right) \right)$

$$= \frac{\exp \left(\boldsymbol{\theta}_y^\top \phi(\mathbf{x}_i) \right) \phi(\mathbf{x}_i)}{\sum_{y'=1}^c \exp \left(\boldsymbol{\theta}_{y'}^\top \phi(\mathbf{x}_i) \right)}$$

確率的勾配法

1. パラメータ $\theta = (\theta_1^\top, \dots, \theta_c^\top)^\top$ を適当に初期化
2. 標本 (x_i, y_i) をランダムに選び、勾配を少し上昇

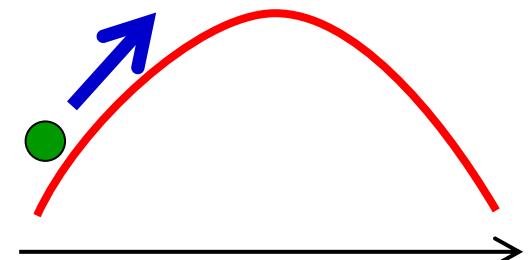
$$\theta_y \leftarrow \theta_y + \varepsilon \nabla_y J_i(\theta) \quad \text{for } y = 1, \dots, c$$

学習係数

$$\varepsilon > 0$$

$$\nabla_y J_i(\theta) = -\frac{\exp\left(\theta_y^\top \phi(x_i)\right) \phi(x_i)}{\sum_{y'=1}^c \exp\left(\theta_{y'}^\top \phi(x_i)\right)} + \begin{cases} \phi(x_i) & (y = y_i) \\ 0 & (y \neq y_i) \end{cases}$$

3. 収束するまで 2. を繰り返す



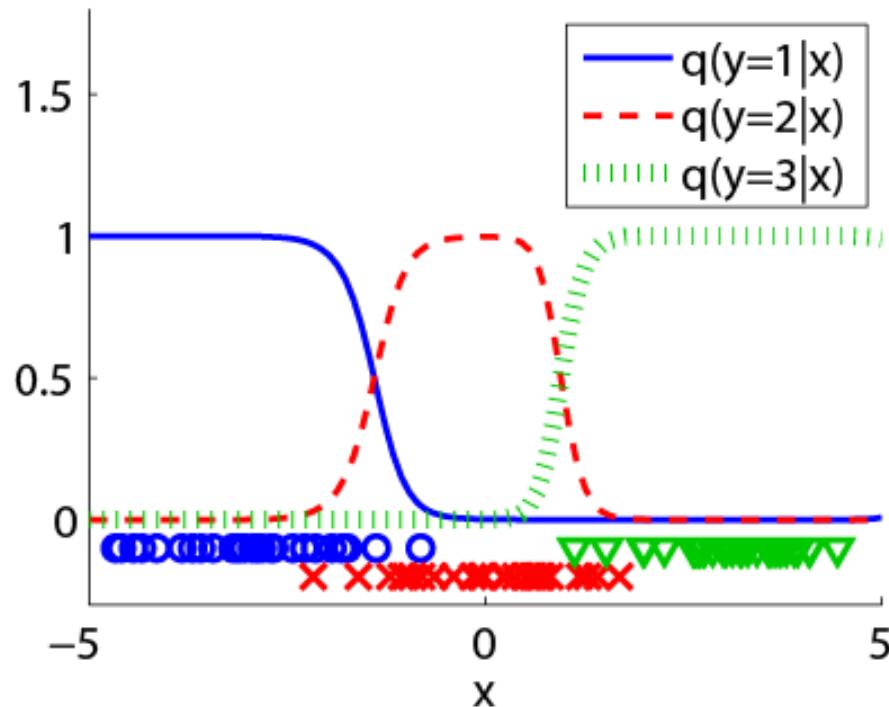
実行例

■ 対数ガウスカーネルモデル

$$q(y|\mathbf{x}; \theta) \propto \exp \left(\sum_{j=1}^n \theta_j K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) \right)$$

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{c}) = \exp \left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2}{2h^2} \right)$$

に対するロジスティック回帰の実行例



実行例(続き)

```
clear all; rand('state',3); randn('state',3);

n=90; c=3; y=ones(n/c,1)*[1:c]; y=y(:);
x=randn(n/c,c)+repmat(linspace(-3,3,c),n/c,1);
x=x(:);

hh=2*1^2; t0=randn(n,c); e=0.1;
for o=1:n*1000
    i=ceil(rand*n); yi=y(i);
    ki=exp(-(x-x(i)).^2/hh);
    ci=exp(ki'*t0); t=t0-e*(ki*ci)/sum(ci);
    t(:,yi)=t(:,yi)+e*ki;
    if norm(t-t0)<0.000001, break, end
    t0=t;
end
```

次のページに続く

実行例(続き)

```
N=100; X=linspace(-5,5,N)';
K=exp(-(repmat(X.^2,1,n)+repmat(x.^2',N,1)-
2*X*x')/hh);

figure(1); clf; hold on; axis([-5 5 -0.3 1.8]);
C=exp(K*t); C=C./repmat(sum(C,2),1,c);
plot(X,C(:,1),'b-'); plot(X,C(:,2),'r--');
plot(X,C(:,3),'g:');
plot(x(y==1),-0.1*ones(n/c,1),'bo');
plot(x(y==2),-0.2*ones(n/c,1),'rx');
plot(x(y==3),-0.1*ones(n/c,1),'gv');
legend('q(y=1|x)','q(y=2|x)','q(y=3|x)')
```

講義の流れ



1. 確率的分類(10章)

- A) ロジスティック回帰
- B) 確率的勾配法
- C) ロジスティック損失最小化
- D) 二乗誤差最小化

2. 系列データの分類(11章)

数学演習

■ 2クラス問題 $y \in \{+1, -1\}$ に対して,
ロジスティックモデル

$$\begin{aligned} q(y|\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\alpha}) &= \frac{\exp\left(\sum_{j=1}^b \alpha_{y,j} \phi_j(\boldsymbol{x})\right)}{\sum_{y'=\pm 1} \exp\left(\sum_{j=1}^b \alpha_{y',j} \phi_j(\boldsymbol{x})\right)} \\ &= \frac{\exp\left(\boldsymbol{\alpha}_y^\top \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})\right)}{\sum_{y'=\pm 1} \exp\left(\boldsymbol{\alpha}_{y'}^\top \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})\right)} \end{aligned}$$

は以下の形で表現できることを示せ

$$q(y|\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{1 + \exp(-y f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}))}$$

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) &= \sum_{j=1}^b \theta_j \phi_j(\boldsymbol{x}) \\ &= \boldsymbol{\theta}^\top \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$

解答例

$$q(y|x; \alpha) = \frac{\exp(\alpha_y^\top \phi(x))}{\exp(\alpha_{+1}^\top \phi(x)) + \exp(\alpha_{-1}^\top \phi(x))} \text{ より}$$

- $q(y = -1|x; \alpha) = \frac{1}{1 + \exp((\alpha_{+1} - \alpha_{-1})^\top \phi(x))}$
- $q(y = +1|x; \alpha) = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha_{+1} - \alpha_{-1})^\top \phi(x))}$

これらをまとめて $\alpha_{+1} - \alpha_{-1} = \theta$ とおけば

$$q(y|x; \theta) = \frac{1}{1 + \exp(-y\theta^\top \phi(x))}$$

ロジスティック損失最小化学習

22

$$q(y|x; \theta) = \frac{1}{1 + \exp(-y f_{\theta}(x))}$$

$$f_{\theta}(x) = \sum_{j=1}^b \theta_j \phi_j(x)$$

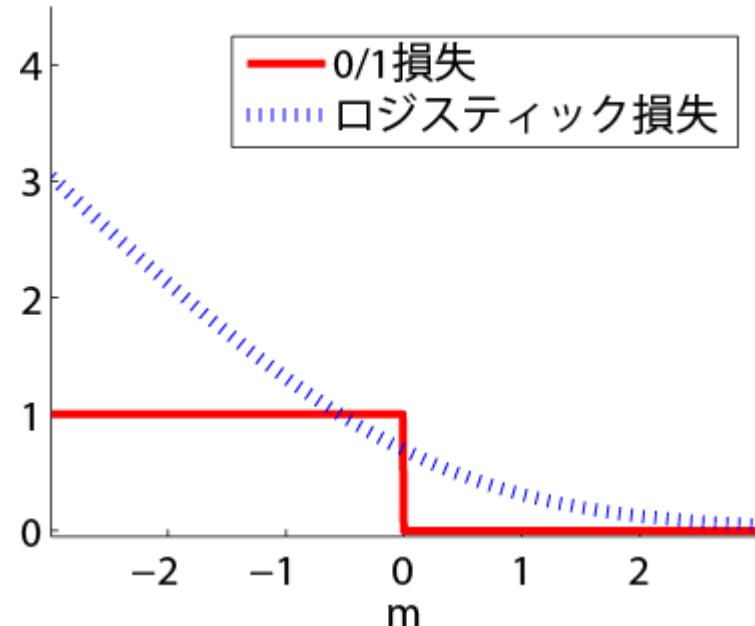
■ このロジスティック回帰に対する最尤推定

$$\max_{\theta} \sum_{i=1}^n \log q(y_i | x_i; \theta)$$

はロジスティック損失
最小化学習と等価

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^n \log \left(1 + \exp(-m_i) \right)$$

$$m_i = f_{\theta}(x_i) y_i$$



講義の流れ



1. 確率的分類(10章)

- A) ロジスティック回帰
- B) 確率的勾配法
- C) ロジスティック損失最小化
- D) 二乗誤差最小化

2. 系列データの分類(11章)

最小二乗確率的分類

■ クラス y の事後確率に対する線形モデル:

$$q(y|x; \theta_y) = \sum_{j=1}^b \theta_{y,j} \phi_j(x) = \theta_y^\top \phi(x)$$

- 一般に“確率”にはならないがとりあえず気にしない

■ 二乗誤差最小化:

$$J_y(\theta_y) = \frac{1}{2} \int \left(q(y|x; \theta_y) - p(y|x) \right)^2 p(x) dx$$

- 尤度最大化の場合は、モデルの正規化が必要
- 二乗誤差最小化の場合は、正規化しなくてもよい！

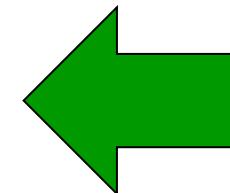
二乗誤差の分解

$$J_y(\theta_y) = \frac{1}{2} \int \left(q(y|\mathbf{x}; \theta_y) - p(y|\mathbf{x}) \right)^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$= \frac{1}{2} \int q(y|\mathbf{x}; \theta_y)^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$- \int q(y|\mathbf{x}; \theta_y) p(y|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$$+ \frac{1}{2} \int p(y|\mathbf{x})^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$



定数なので
無視できる

二乗誤差の標本近似

■ 二乗誤差の標本近似:

- $\int q(y|\mathbf{x}; \theta_y)^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \rightarrow \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(y|\mathbf{x}_i; \theta_y)^2$

- $\int q(y|\mathbf{x}; \theta_y) p(y|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$

$$= \int q(y|\mathbf{x}; \theta_y) p(y) p(\mathbf{x}|y) d\mathbf{x}$$

$$= p(y) \cdot \int q(y|\mathbf{x}; \theta_y) p(\mathbf{x}|y) d\mathbf{x}$$

$$\rightarrow \frac{n_y}{n} \cdot \frac{1}{n_y} \sum_{i:y_i=y} q(y|\mathbf{x}_i; \theta_y)$$

正則化学習規準

■ 2次正則化項を加えた学習規準：

$$\hat{J}_y(\boldsymbol{\theta}_y) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n q(y|x_i; \boldsymbol{\theta}_y)^2$$

$$-\frac{1}{n} \sum_{i:y_i=y} q(y|x_i; \boldsymbol{\theta}_y) + \frac{\lambda}{2n} \|\boldsymbol{\theta}_y\|^2$$

$$= \frac{1}{2n} \boldsymbol{\theta}_y^\top \Phi^\top \Phi \boldsymbol{\theta}_y - \frac{1}{n} \boldsymbol{\theta}_y^\top \Phi^\top \boldsymbol{\pi}_y + \frac{\lambda}{2n} \|\boldsymbol{\theta}_y\|^2$$

最小解は解析的に求まる：

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_y = (\Phi^\top \Phi + \lambda I)^{-1} \Phi^\top \boldsymbol{\pi}_y$$

$$\Phi_{i,j} = \phi_j(x_i)$$

$$\boldsymbol{\pi}_{y,i} = \begin{cases} 1 & (y_i = y) \\ 0 & (y_i \neq y) \end{cases}$$

解の補正

$$\hat{\theta}_y = \left(\Phi^\top \Phi + \lambda I \right)^{-1} \Phi^\top \pi_y$$

- $q(y|x; \hat{\theta}_y) = \hat{\theta}_y^\top \phi(x)$ は一般に確率にならない:
確率は非負で和が1
- 大小関係だけでなく確率そのものに興味がある場合は解を事後補正する

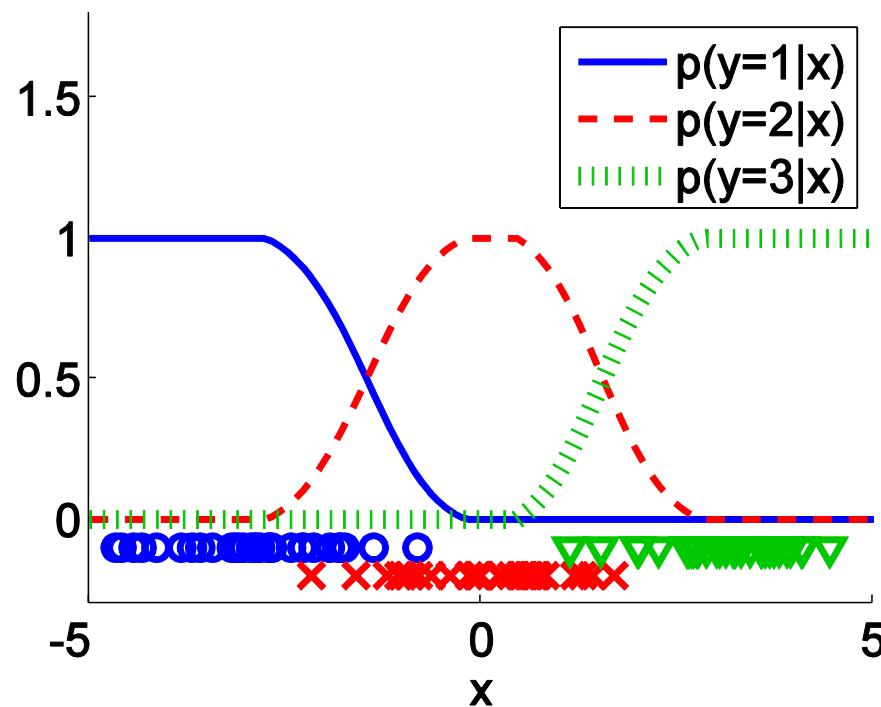
$$\hat{p}(y|x) = \frac{\max(0, \hat{\theta}_y^\top \phi(x))}{\sum_{y'=1}^c \max(0, \hat{\theta}_{y'}^\top \phi(x))}$$

実行例

■ ガウスカーネルモデル

$$q(y|x; \theta_y) = \sum_{j:y_j=y} \theta_{y,j}^\top \exp\left(-\frac{\|x - x_j\|^2}{2h^2}\right)$$

に対する実行例



確率的分類:まとめ

■ クラス事後確率 $p(y = \hat{y}|x)$ の学習に基づく分類:

$$\hat{y} = \operatorname{argmax}_{y=1,\dots,c} p(y|x)$$

- クラス予測に対する**信頼度**が得られる
(信頼度が低い場合は自動分類をあきらめる等)
- **多クラス分類**が自然に行える

■ ロジスティック回帰:

- 名前は回帰だが、分類学習法

■ 最小二乗確率的分類:

- 計算が簡単

講義の流れ



1. 確率的分類(10章)
2. 系列データの分類(11章)
 - A) 条件付き確率場モデル
 - B) 条件付き確率場モデルの学習
 - C) 条件付き確率場モデルによるラベル予測

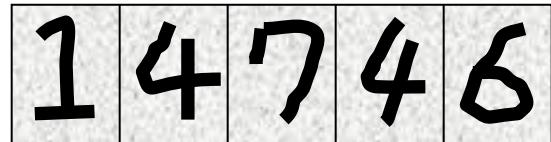
系列データの認識

$$\bar{x}_i = (x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(m)})$$

$$\bar{y}_i = (y_i^{(1)}, \dots, y_i^{(m)})$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

■ 例：手書き数字列の認識



■ 例：品詞の分解

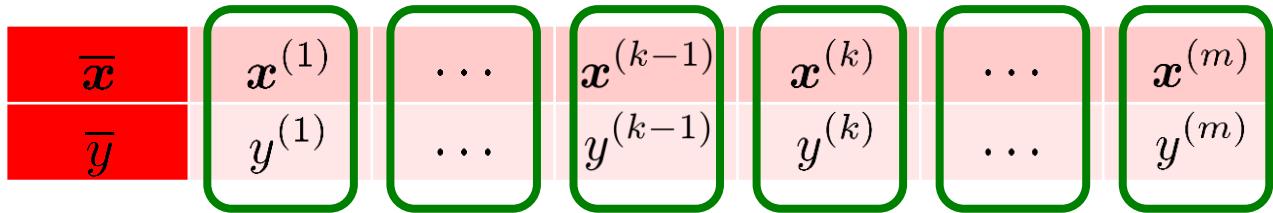


講義の流れ



1. 確率的分類(10章)
2. 系列データの分類(11章)
 - A) 条件付き確率場モデル
 - B) 条件付き確率場モデルの学習
 - C) 条件付き確率場モデルによるラベル予測

系列データの認識



■ 各データを1つずつ独立に学習・認識：

- ロジスティック回帰をそのまま使えばよい？

$$q(y|x; \theta) = \frac{\exp(\theta_y^\top \phi(x))}{\sum_{y'=1}^c \exp(\theta_{y'}^\top \phi(x))}$$

$$\theta = (\theta_1^\top, \dots, \theta_c^\top)^\top \in \mathbb{R}^{bc} : \text{パラメータ}$$

- 系列データの特性を生かせない

系列データの学習

\bar{x}	$x^{(1)}$	\dots	$x^{(k-1)}$	$x^{(k)}$	\dots	$x^{(m)}$
\bar{y}	$y^{(1)}$	\dots	$y^{(k-1)}$	$y^{(k)}$	\dots	$y^{(m)}$

■全系列データを同時に認識：

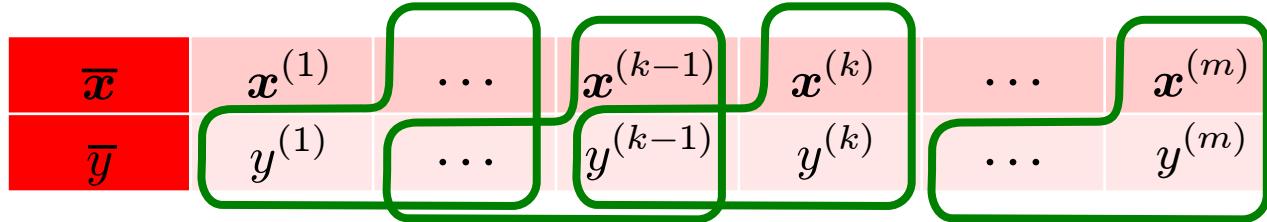
- 系列データの特性を完全に生かせる
- 学習が困難(クラス数が c^m)

$$q(\bar{y}|\bar{x}; \bar{\theta}) = \frac{\exp\left(\bar{\theta}_{\bar{y}}^\top \bar{\phi}(\bar{x})\right)}{\sum_{\bar{y}'=1}^{c^m} \exp\left(\bar{\theta}_{\bar{y}'}^\top \bar{\phi}(\bar{x})\right)}$$

$\bar{\phi}(\bar{x}) = (\phi(x^{(1)})^\top, \dots, \phi(x^{(m)})^\top)^\top \in \mathbb{R}^{bm}$: 基底ベクトル

$\bar{\theta}_{\bar{y}} = (\theta_{\bar{y}}^{(1)\top}, \dots, \theta_{\bar{y}}^{(m)\top})^\top \in \mathbb{R}^{bm}$: パラメータ

依存関係のモデル化



各時刻のラベルの分布がその時刻のパターンと
その一つ前のラベルによって定まるモデル：

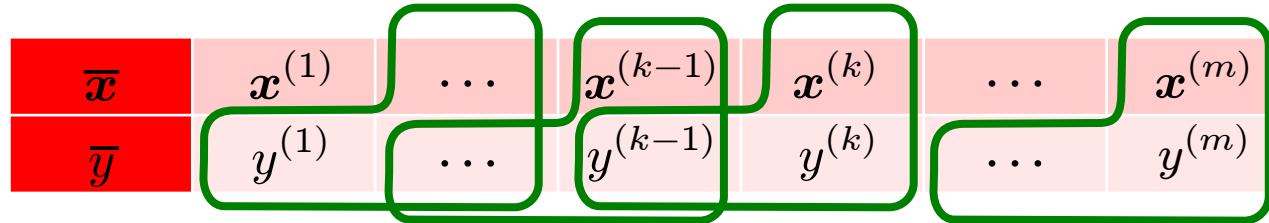
$$q(\bar{y}|\bar{x}; \zeta) = \prod_{k=1}^m q(y^{(k)}|x^{(k)}, y^{(k-1)}; \zeta) \quad y^{(0)} = y^{(1)}$$

$$\propto \prod_{k=1}^m \exp(\zeta^\top \varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)}))$$

$$= \exp \left(\zeta^\top \sum_{k=1}^m \varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

より一般には**条件付き確率場**によりモデル化

ロジスティックモデルの拡張



■ 1つ前のラベル $y^{(k-1)}$ を基底関数に含むモデル：

$$q(\bar{y}|\bar{x}; \zeta) = \prod_{k=1}^m q(y^{(k)}|\mathbf{x}^{(k)}, y^{(k-1)}; \zeta)$$

$$\propto \prod_{k=1}^m \exp \left(\zeta_{y^{(k)}}^\top \phi(\mathbf{x}^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

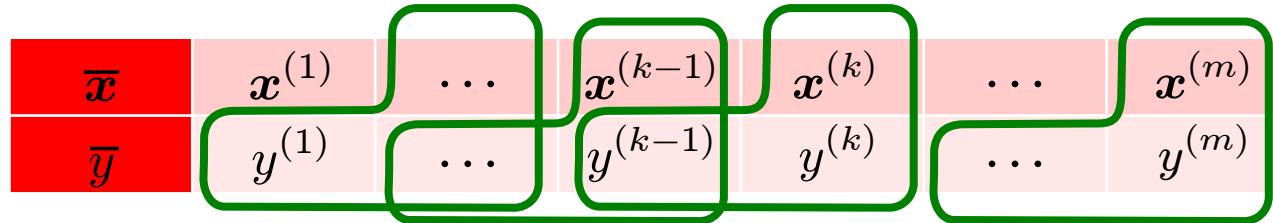
■ 基底関数の例：

$$\zeta = (\zeta_1^\top, \dots, \zeta_c^\top)^\top$$

$$\phi(\mathbf{x}^{(k)}, y^{(k-1)}) = (\phi(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{e}_{y^{(k-1)}}) \in \mathbb{R}^{b+c}$$

$$\mathbf{e}_y = (\underbrace{0, \dots, 0}_{y-1}, 1, \underbrace{0, \dots, 0}_{c-y})^\top \in \mathbb{R}^c$$

ロジスティックモデルの拡張



■ 1つ前のラベル $y^{(k-1)}$ を基底関数に含むモデル:

$$q(\bar{y}|\bar{x}; \zeta) \propto \prod_{k=1}^m \exp \left(\zeta_{y^{(k)}}^\top \phi(x^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

$$\zeta = (\zeta_1^\top, \dots, \zeta_c^\top)^\top$$

■ $\varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)})$ を以下のようにとると冒頭の形に

$$\varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)}) = (\underbrace{\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}}_{y^{(k)} - 1}, \phi(x^{(k)}, y^{(k-1)}), \underbrace{\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}}_{c - y^{(k)}})^\top$$

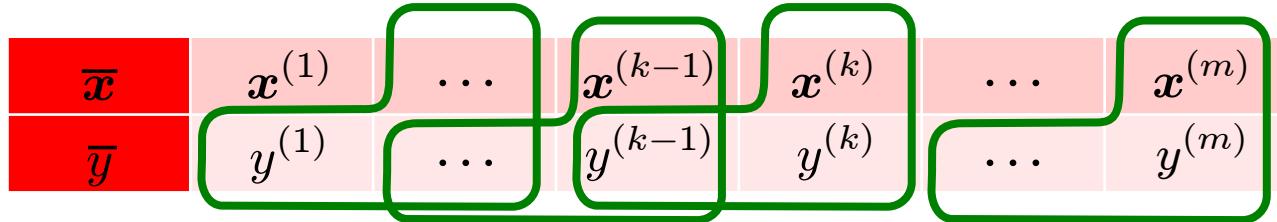
$$q(\bar{y}|\bar{x}; \zeta) \propto \prod_{k=1}^m \exp \left(\zeta^\top \varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

講義の流れ



1. 確率的分類(10章)
2. 系列データの分類(11章)
 - A) 条件付き確率場モデル
 - B) 条件付き確率場モデルの学習
 - C) 条件付き確率場モデルによるラベル予測

ロジスティックモデルの拡張



■ 1つ前のラベル $y^{(k-1)}$ を基底関数に含むモデル:

$$q(\bar{y}|\bar{x}; \zeta) \propto \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

■ 以下 $\varphi(x^{(k)}, y^{(k)}, y^{(k-1)}) = \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)})$ のように表記して規格化すると

$$q(\bar{y}|\bar{x}; \zeta) = \frac{\exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)}{\sum_{y'^{(1)}, \dots, y'^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi^{(k)}(y'^{(k)}, y'^{(k-1)}) \right)}$$

条件付き確率場モデルの学習 41

■ それぞれが長さ m の系列データ n 個

$$\left\{ (\bar{x}_i, \bar{y}_i) \mid \bar{x}_i = (\mathbf{x}_i^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_i^{(m)}), \bar{y}_i = (y_i^{(1)}, \dots, y_i^{(m)}) \right\}_{i=1}^n$$

からパラメータを**最尤推定**により学習したい：

$$\max_{\zeta} \sum_{i=1}^n \log \frac{\exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y_i^{(k)}, y_i^{(k-1)}) \right)}{\sum_{y'^{(1)}, \dots, y'^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y'^{(k)}, y'^{(k-1)}) \right)}$$

■ ランダムに系列 (\bar{x}_i, \bar{y}_i) をとり確率的勾配法で
パラメータを最適化：

$$\zeta \leftarrow \zeta + \varepsilon \nabla_{\zeta} \log \frac{\exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y_i^{(k)}, y_i^{(k-1)}) \right)}{\sum_{y'^{(1)}, \dots, y'^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y'^{(k)}, y'^{(k-1)}) \right)}$$

条件付き確率場モデルの学習

$$\zeta \leftarrow \zeta + \varepsilon \nabla_{\zeta} \log \frac{\exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y_i^{(k)}, y_i^{(k-1)}) \right)}{\sum_{y'^{(1)}, \dots, y'^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y'^{(k)}, y'^{(k-1)}) \right)}$$

$$= \zeta + \varepsilon \left(\sum_{k=1}^m \varphi_i^{(k)}(y_i^{(k)}, y_i^{(k-1)}) - \frac{Z}{A} \right)$$

■ 分子 : $Z = \sum_{y'^{(1)}, \dots, y'^{(m)}=1}^c \left(\exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y'^{(k)}, y'^{(k-1)}) \right) \times \sum_{k'=1}^m \varphi_i^{(k')}(y'^{(k')}, y'^{(k'-1)}) \right)$

■ 分母 : $A = \sum_{y'^{(1)}, \dots, y'^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y'^{(k)}, y'^{(k-1)}) \right)$

- $\mathcal{O}(c^m)$ 個の和の計算 → 動的計画法を用いる

動的計画法による分母の計算

$$A = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

■ $y^{(1)}, \dots, y^{(m-1)}$ と $y^{(m)}$ に分解：

$$A_\tau(y) = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^{\tau-1} \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right)$$

とすると

$$A_m(y^{(m)}) = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(m-1)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

より $A = \sum_{y^{(m)}=1}^c A_m(y^{(m)})$

数学演習

$$A_\tau(y) = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^{\tau-1} \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right)$$

■ 以下の再帰表現を求めよ

$$A_\tau(y) = \sum_{y^{(\tau-1)}=1}^c A_{\tau-1}(y^{(\tau-1)}) \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y, y^{(\tau-1)}) \right)$$



$A_\tau(y)$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	\cdots	$\tau = m$
$y = 1$				
\vdots				
$y = c$				

解答例

$$A_\tau(y) = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^{\tau-1} \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right)$$

■ $A_\tau(y)$ の定義より

$$A_{\tau-1}(y^{(\tau-1)}) = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-2)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^{\tau-1} \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

と表されるから

$$\begin{aligned} A_\tau(y) &= \sum_{y^{(\tau-1)}=1}^c \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-2)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^{\tau-1} \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right) \\ &\quad \times \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right) \\ &= \sum_{y^{(\tau-1)}=1}^c A_{\tau-1}(y^{(\tau-1)}) \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right) \end{aligned}$$

動的計画法による分子の計算

$$Z = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right) \sum_{k'=1}^m \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)})$$

■ $y^{(1)}, \dots, y^{(k'-2)}$ と $y^{(k'-1)}, y^{(k')}$ と $y^{(k'+1)}, \dots, y^{(m_i)}$ に分解：

$$Z = \sum_{k'=1}^m \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(k'-2)}=1}^c \sum_{y^{(k'-1)}, y^{(k')}=1}^c \sum_{y^{(k'+1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right) \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)})$$

- $k < k' - 1$ に関する項と $k > k'$ に関する項は \exp の中でのみ現れるのでそれを $A_{k'-1}$ と $B_{k'}$ で表現

動的計画法による分子の計算

$$Z = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right) \sum_{k'=1}^m \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)})$$

■ $y^{(1)}, \dots, y^{(k'-2)}$ と $y^{(k'-1)}, y^{(k')}$ と $y^{(k'+1)}, \dots, y^{(m_i)}$ に分解：

$$Z = \sum_{k'=1}^m \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(k'-2)}=1}^c \sum_{y^{(k'-1)}, y^{(k')}=1}^c \sum_{y^{(k'+1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right) \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)})$$

$$= \sum_{k'=1}^m \sum_{y^{(k'-1)}, y^{(k')}=1}^c A_{k'-1}(y^{(k'-1)}) B_{k'}(y^{(k')}) \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)}) \right) \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)})$$

$$A_\tau(y) = \sum_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=1}^{\tau-1} \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right)$$

$$B_\tau(y) = \sum_{y^{(\tau+1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=\tau+2}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau+1)}(y^{(\tau+1)}, y) \right)$$

動的計画法による分子の計算 (続き)

$$B_\tau(y) = \sum_{y^{(\tau+1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=\tau+2}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau+1)}(y^{(\tau+1)}, y) \right)$$

■ $B_\tau(y)$ は以下のように再帰表現できる 証明は宿題

$$B_\tau(y) = \sum_{y^{(\tau+1)}=1}^c B_{\tau+1}(y^{(\tau+1)}) \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(\tau+1)}(y^{(\tau+1)}, y) \right)$$



$B_\tau(y)$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	\cdots	$\tau = m$
$y = 1$				
\vdots				
$y = c$				

動的計画法による勾配の計算

- $A_1(y^{(1)}), \dots, A_m(y^{(m)})$ の順に計算
- $B_m(y^{(m)}), \dots, B_1(y^{(1)})$ の順に計算
- 勾配 $\sum_{k=1}^m \varphi_i^{(k)}(y_i^{(k)}, y_i^{(k-1)}) - \frac{Z}{A}$ を計算:

• 分母: $A = \sum_{\substack{y^{(m)}=1}}^c A_m(y^{(m)})$

計算量 $\mathcal{O}(c^m) \rightarrow \mathcal{O}(c^2 m)$

“前向き後向きアルゴリズム”

• 分子: $Z = \sum_{k'=1}^m \sum_{\substack{y^{(k'-1)}, y^{(k')}=1}}^c \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)})$

$$\times \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(k')}(y^{(k')}, y^{(k'-1)}) \right) A_{k'-1}(y^{(k'-1)}) B_{k'}(y^{(k')})$$

講義の流れ



1. 確率的分類(10章)
2. 系列データの分類(11章)
 - A) 条件付き確率場モデル
 - B) 条件付き確率場モデルの学習
 - C) 条件付き確率場モデルによるラベル予測

条件付き確率場による予測

■ 事後確率が最大のラベル系列を求める

$$(\hat{y}^{(1)}, \dots, \hat{y}^{(m)}) = \operatorname{argmax}_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} q(\bar{y} | \bar{x}; \hat{\zeta})$$

$$= \operatorname{argmax}_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)})$$

$$q(\bar{y} | \bar{x}; \zeta) \propto \exp \left(\sum_{k=1}^m \zeta^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right)$$

■ $\operatorname{argmax}_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}}$ の計算に $\mathcal{O}(c^m)$ 時間かかる
 → こちらも動的計画法で計算できる

動的計画法による最大化の計算⁵²

$$(\hat{y}^{(1)}, \dots, \hat{y}^{(m)}) = \operatorname{argmax}_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)})$$

■ $y^{(1)}, \dots, y^{(m-1)}$ と $y^{(m)}$ に分解：

$$\max_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) = \max_{y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} P_m(y^{(m)})$$

$$P_\tau(y) = \max_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)} \in \{1, \dots, c\}} \left[\sum_{k=1}^{\tau-1} \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \hat{\zeta}^\top \varphi^{(\tau)}(y, y^{(\tau-1)}) \right]$$

■ $A_\tau(y)$ と全く同様に再帰表現可能：

$$P_\tau(y^{(\tau)}) = \max_{y^{(\tau-1)} \in \{1, \dots, c\}} \left[P_{\tau-1}(y^{(\tau-1)}) + \hat{\zeta}^\top \varphi^{(\tau)}(y^{(\tau)}, y^{(\tau-1)}) \right]$$

動的計画法による最大化の計算

53

$$(\hat{y}^{(1)}, \dots, \hat{y}^{(m)}) = \operatorname{argmax}_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)})$$

■ $P_1(y), \dots, P_m(y)$ を計算しておく

■ 最大化の対象が

$$\max_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) = \max_{y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} P_m(y^{(m)})$$

と表されることから、まず $\hat{y}^{(m)}$ が求まる：

$$\hat{y}^{(m)} = \max_{y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} P_m(y^{(m)})$$

動的計画法による最大化の計算⁵⁴

$$(\hat{y}^{(1)}, \dots, \hat{y}^{(m)}) = \operatorname{argmax}_{y^{(1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)})$$

■ $(\hat{y}^{(\tau+1)}, \dots, \hat{y}^{(m)})$ が求まっているとき

$$\hat{y}^{(\tau)} = \operatorname{argmax}_{y^{(\tau)}} \left\{ \max_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)}, y^{(\tau+1)}, \dots, y^{(m)} \in \{1, \dots, c\}} \sum_{k=1}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right\}$$

$$\begin{aligned} &= \operatorname{argmax}_{y^{(\tau)}} \left\{ \max_{y^{(1)}, \dots, y^{(\tau-1)} \in \{1, \dots, c\}} \left(\sum_{k=1}^{\tau} \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \hat{\zeta}^\top \varphi^{(\tau)}(\hat{y}^{(\tau+1)}, y^{(\tau)}) + \left[\sum_{k=\tau+2}^m \hat{\zeta}^\top \varphi^{(k)}(\hat{y}^{(k)}, \hat{y}^{(k-1)}) \right] \right) \right\} \end{aligned}$$

$$= \operatorname{argmax}_{y^{(\tau)}} \left\{ P_\tau(y^{(\tau)}) + \hat{\zeta}^\top \varphi^{(\tau)}(\hat{y}^{(\tau+1)}, y^{(\tau)}) \right\} \quad \text{定数}$$

● 再帰的に $\hat{y}^{(\tau)}$ が求まる

“Viterbiアルゴリズム”

系列データの分類:まとめ

■ 系列データの分類:

- 個別に分類すると系列としての性質を生かせない
- ナイーブに計算すると系列の長さの指數時間かかる

■ 条件付き確率場:

- 隣り合ったデータのみの関連を考慮
- 動的計画法により効率良く計算できる
- 系列データ以外にも拡張できる



講義の流れ



1. 確率的分類(10章)
2. 系列データの分類(11章)

まとめ

■ 確率的分類

- クラス事後確率 $p(y|x)$ の学習に基づく分類

$$\hat{y} = \operatorname{argmax}_{y=1,\dots,c} p(y|x)$$

- クラス予測に対する**信頼度**が得られる

■ 系列データの分類

- **動的計画法**を用いることにより、学習・予測を高速化
- 一般のグラフ構造に拡張できる

次回の予告

■ オンライン学習(15章)

■ 来週6/4は授業をやります

- 情報理工は規定上は午前授業なしですが、新領域は授業日のため後者に合わせます

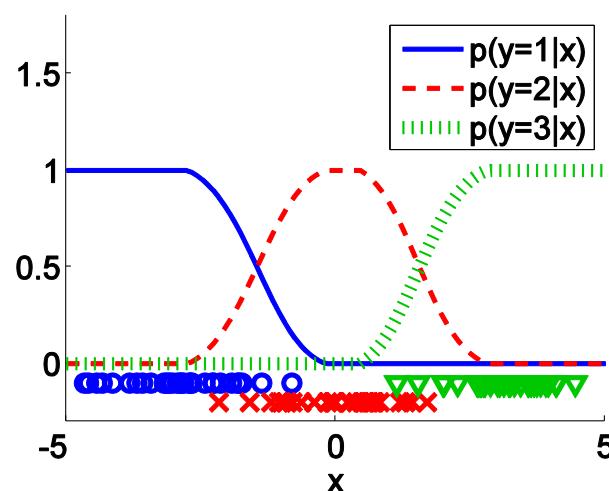
宿題1

■ ガウスカーネルモデル

$$q(y|x; \theta^{(y)}) = \sum_{j:y_j=y} \theta_j^{(y)} \exp\left(-\frac{\|x - x_j\|^2}{2h^2}\right)$$

に対して、最小二乗確率的分類を実装せよ

```
n=90; c=3; y=ones(n/c,1)*[1:c]; y=y(:);
x=randn(n/c,c)+repmat(linspace(-3,3,c),n/c,1); x=x(:);
```



宿題2

$$B_\tau(y) = \sum_{y^{(\tau+1)}, \dots, y^{(m)}=1}^c \exp \left(\sum_{k=\tau+2}^m \zeta^\top \varphi_i^{(k)}(y^{(k)}, y^{(k-1)}) + \zeta^\top \varphi_i^{(\tau+1)}(y^{(\tau+1)}, y) \right)$$

■ $B_\tau(y)$ は以下のように再帰表現できることを示せ

$$B_\tau(y) = \sum_{y^{(\tau+1)}=1}^c B_{\tau+1}(y^{(\tau+1)}) \exp \left(\zeta^\top \varphi_i^{(\tau+1)}(y^{(\tau+1)}, y) \right)$$



$B_\tau(y)$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	\cdots	$\tau = m$
$y = 1$				
\vdots				
$y = c$				