

教師なし学習

正田 備也

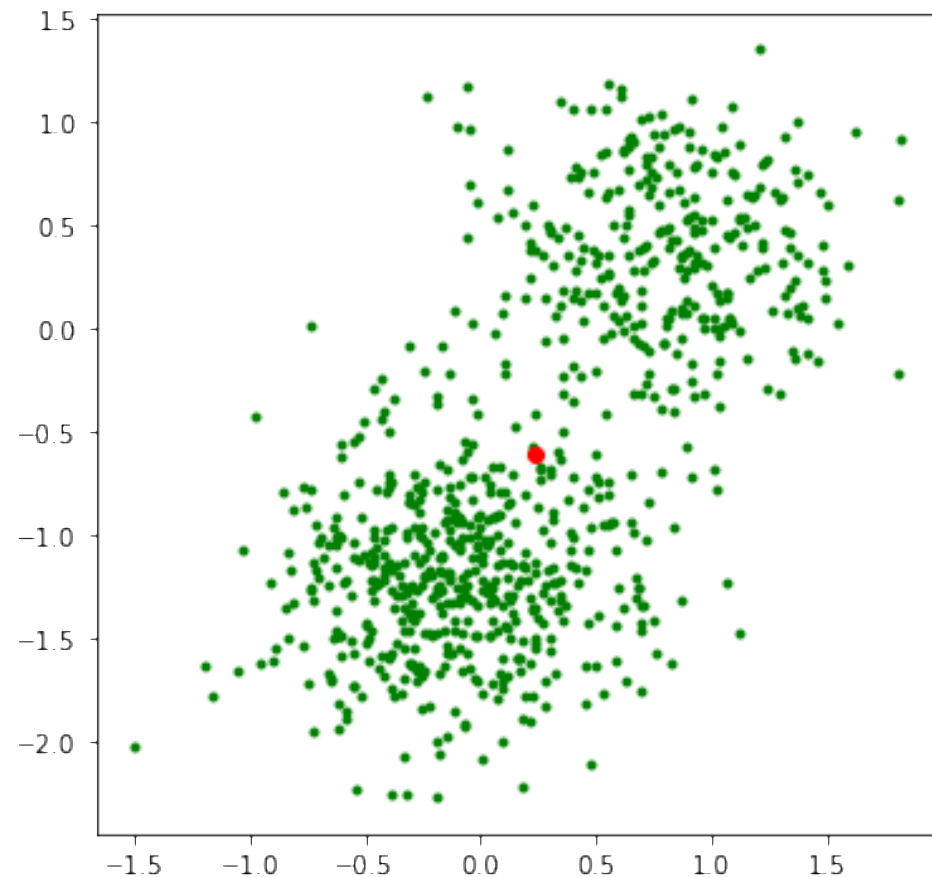
masada@rikkyo.ac.jp

追加：多値分類について

- 分類先が 3 つ以上あっても . . .
- `sklearn.linear_model.LogisticRegression` を使えばいいだけ
- SVC など他の分類手法も同様

データ集合を要約する

- 平均ベクトルで要約する
 - すべてのベクトルの和を求めて個数で割る



例) 右図のような2次元ベクトルの集まり

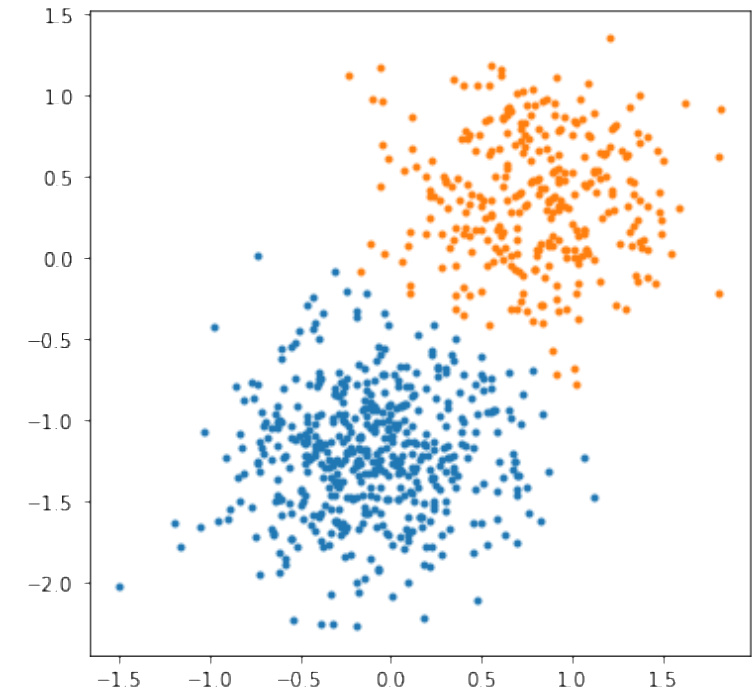
- 平均は、全体をうまく要約していると言えるか？
- データがひとつにまとまって分布していないように見える
- どうする？

教師なし学習 (unsupervised learning)

- 与えられているのは、入力ベクトルの集まりだけ

$$\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$$

- 正解となるクラスラベル y_i は対応づけられていない
- そうであっても . . .
- データの自然なまとまりを見つけたい
 - 右図はK-meansクラスタリングの実際の結果。
- そこで、教師なし学習の出番！
 - 次元圧縮も、もうひとつの重要な用途。



階層的クラスタリング

- 入力ベクトルがバラバラの状態から始める
 - つまり、どのクラスタも1つのデータ点だけを含む状態から始める。
- 一番距離が近いクラスタのペアをマージする
 - どのような基準でクラスタのペアを選ぶかで、クラスタリング結果が違ってくる。
- 「一番距離が近い」というところの近さの基準をどうするか？
 - これをlinkage criterionと呼ぶ

linkage criterion

どの2つのクラスタをマージするか？

1. Ward criterion (分散を利用した方法)

- クラスタの重心からの距離の2乗の和を、すべてのクラスタにわたって合算したものが、最小になるように、クラスタをマージする。

2. Complete linkage criterion (最大値を最小化する方法)

- 異なるクラスタに属するデータ点の距離の最大値が最小のクラスタをマージする

3. Average linkage criterion (平均値を最小化する方法)

- 異なるクラスタに属するデータ点の距離の平均値が最小のクラスタをマージする

4. Single linkage criterion (最小値を最小化する方法)

- 異なるクラスタに属するデータ点の距離の最小値が最小のクラスタをマージする

階層的クラスタリングの応用例

- 単語ベクトルをクラスタリング
 - Dan Jurafsky and James H. Martin. Speech and Language Processing (3rd ed. draft), Section 6.9.
 - 元々階層構造や派生構造をもつ対象に使うと、うまくいくことがある。
 - 意味や範疇が近い単語は階層構造の上でも近くに位置している（???)

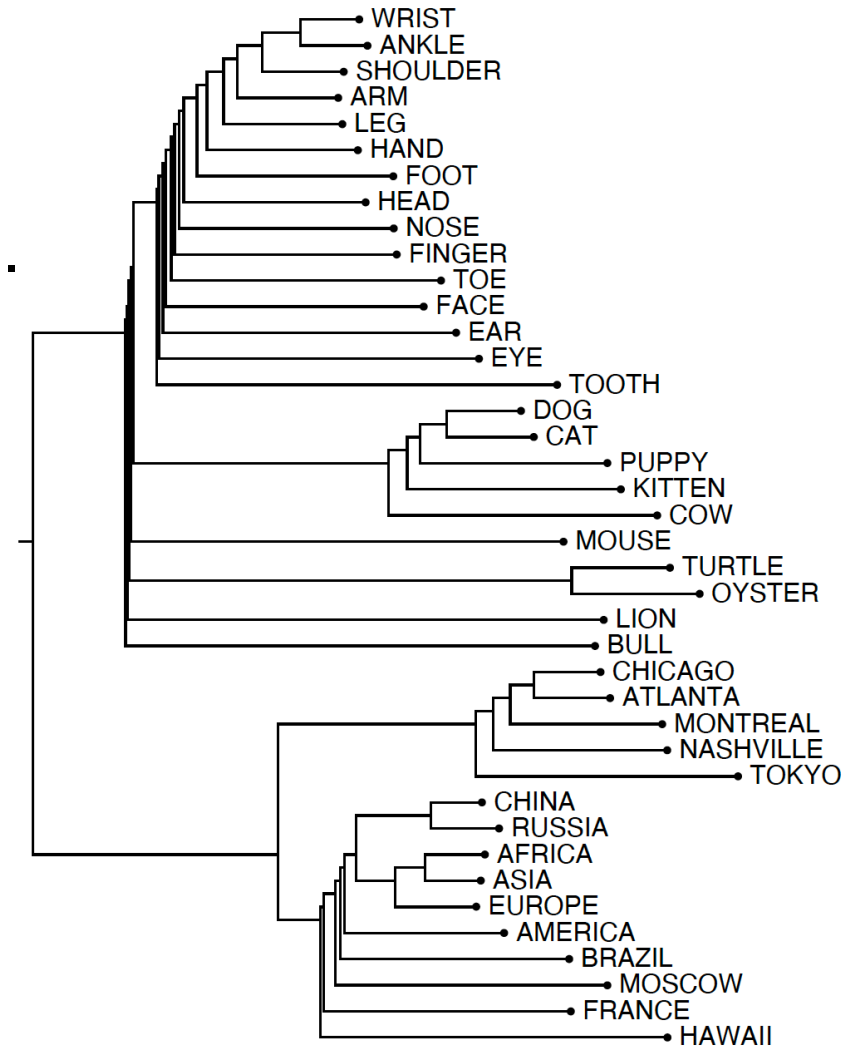


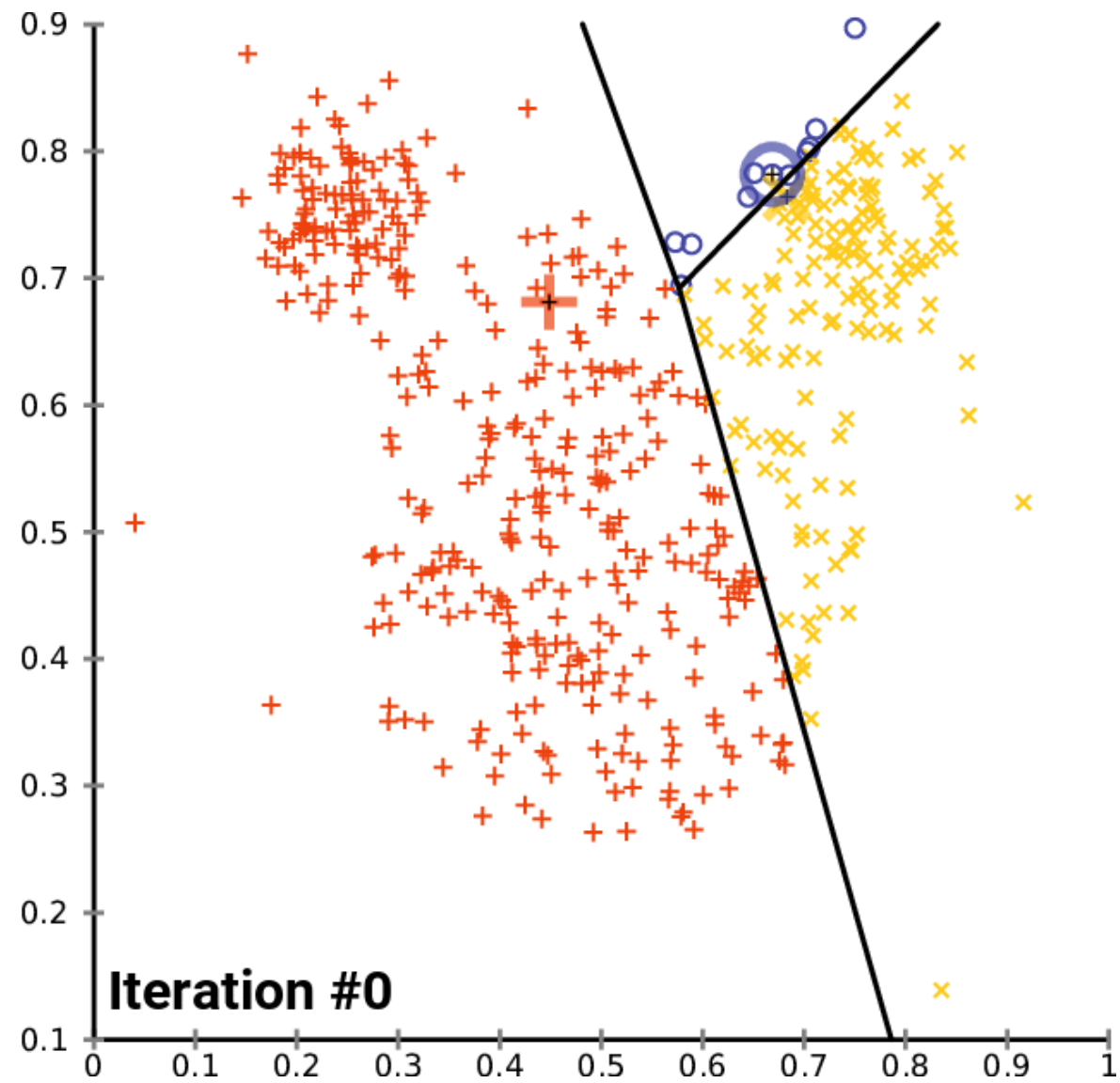
Figure 9: Hierarchical clustering for three noun classes using distances based on vector correlations.

階層的クラスタリングの特徴

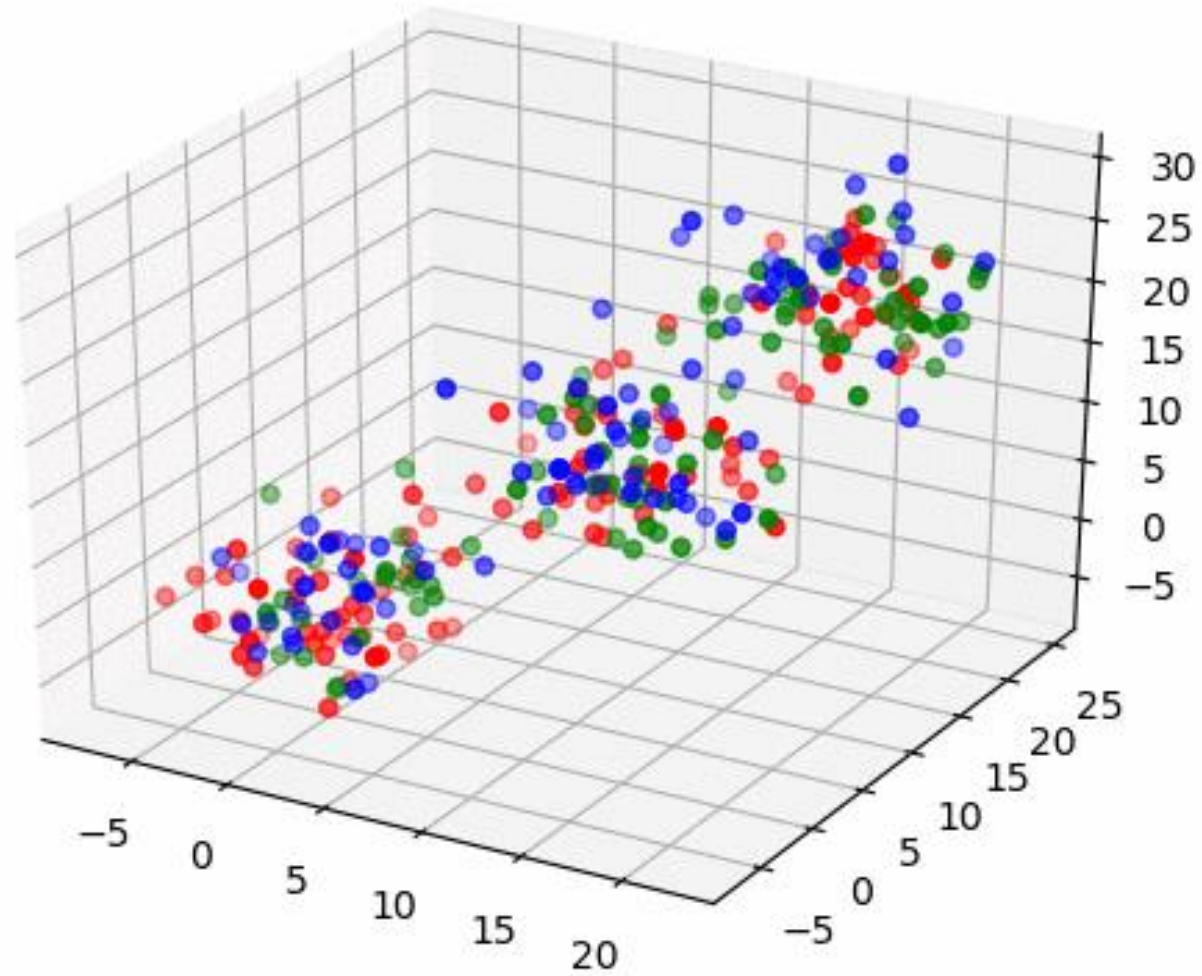
- 利点：可視化に向いている
 - デンドログラム（樹形図）は可視化の手法としては魅力的
- 欠点：計算量が大きい
 - all-to-allの距離計算が発生
 - そのため、比較的サイズが小さいデータセットに使われる。
 - デンドログラムも、データセットのサイズが大きいと、分かりにくくなる。
 - インスタンスの散らばり方の可視化には、t-SNEやUMAPがよく使われる。
 - t-SNEとUMAPについては、次々回、時間があれば触れる予定。

K-平均法 (K-Means)

- とても良く知られているクラスタリング手法
- 与えられたベクトル集合を K 個の排他的なクラスタに分ける
 1. K 個のクラスタの重心(centroid)を適切に初期化
 2. N 個のベクトルの各々を、最も近い重心に対応するクラスタへ属させる (K 個の重心までの距離を求め、最小値を探す)
 3. 構成されたクラスタの重心を求め直す
 4. クラスタの重心がまだ変動しているなら、2. へ戻る



https://commons.wikimedia.org/wiki/File:K-means_convergence.gif



クラスタリング手法の出力

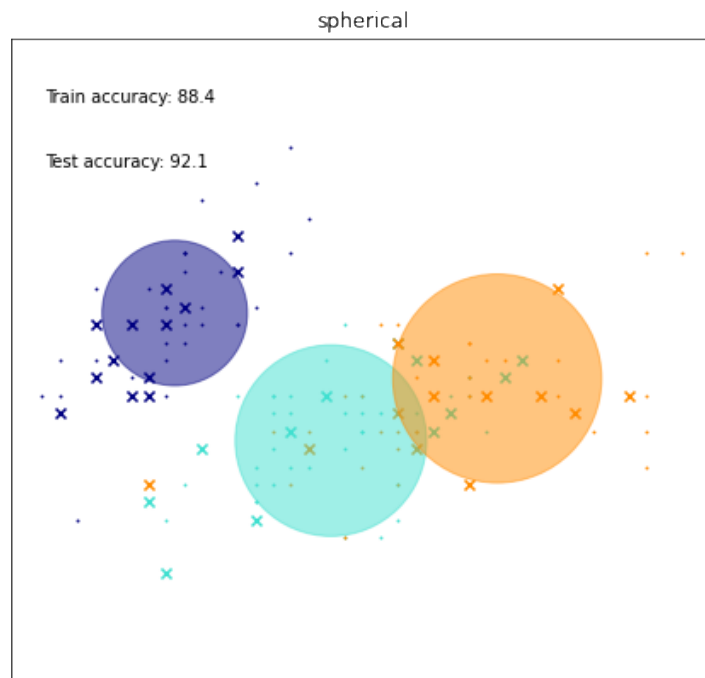
- model-basedなクラスタリングは2種類の情報を出力
 1. 各入力ベクトルのクラスタへの所属の情報
 2. クラスタの数理的な表現（例えば重心）
- K-平均法の場合
 1. 各入力ベクトルは、ちょうどひとつのクラスタに属する
 2. 各クラスタは、その重心で表現される

混合ガウス分布によるクラスタリング

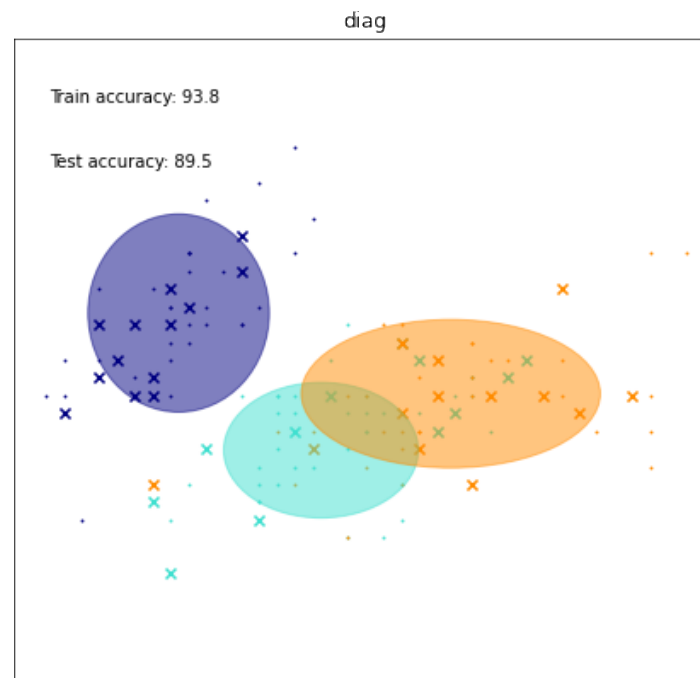
- K-平均法の仮定を緩めた手法
 - 詳細は秋学期の「統計モデリング1」で。
- 1. 入力ベクトルはちょうど一つのクラスタに属さなくてよい
 - 各クラスタへの所属確率（所属の度合い）が得られる
- 2. 各クラスタの分布は同心円状の広がりを持っていないくてよい
 - 横に広がった円でもいいし、傾いていてもいい
 - クラスタ形状の情報は多変量正規分布の共分散行列によって与えられる

cf. https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/mixture/plot_gmm_covariances.html

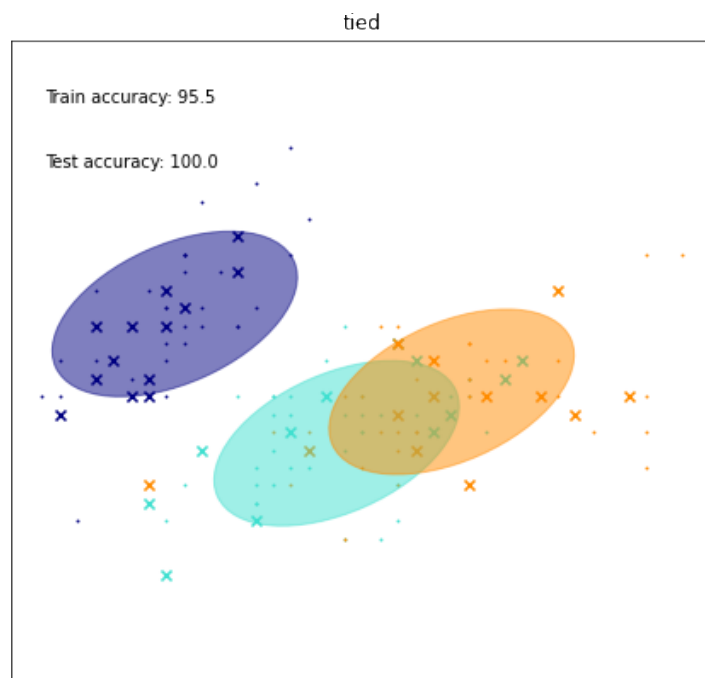
共分散行列が
すべての対角成分
が等しい対角行列



共分散行列が
対角成分が様々な
対角行列



共分散行列が
対角行列でないが
成分は共有



共分散行列が
対角行列でない
成分も共有しない

