情報認識
「核密度推定法」

- **担当教員：　杉山　将（計算工学専攻）**
- **居室：**　W8E-505
- **電子メール**:　　sugi@cs.titech.ac.jp

これまでの復習

- **最大事後確率則**: $x \in \omega_k, \quad k = \arg\max_i p(\omega_i \mid x)$

- ベイズの定理より $p(\omega_i \mid x) \propto \underbrace{p(x \mid \omega_i)}_{\text{条件付き確率}} \underbrace{p(\omega_i)}_{\text{事前確率}}$

- 事前確率は各カテゴリの標本の割合で推定

$$\hat{p}(\omega_i) = n_i / n$$

- **本講義の主題**:条件付き確率をうまく推定したい
- 簡単のため，条件付きでない確率密度関数 $p(x)$ を $\{x_i\}_{i=1}^n$ から推定する問題を考える．

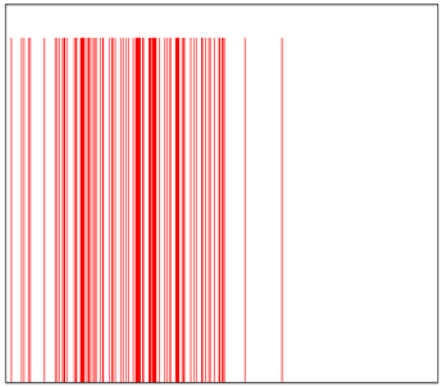
確率密度関数の推定

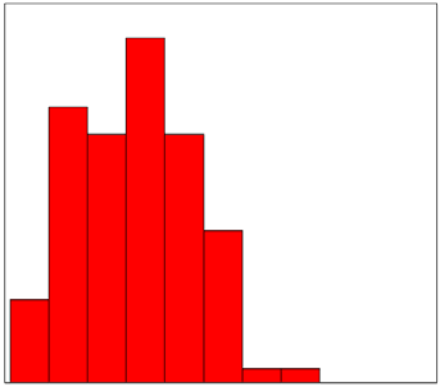
- **パラメトリック法**：モデルのパラメータを推定
  - 最尤推定法
  - ベイズ推定法，最大事後確率法
- **ノンパラメトリック法**(non-parametric method)：
  モデルを使わず直接確率密度関数を推定
  - 核密度推定法
  - 最近傍密度推定法

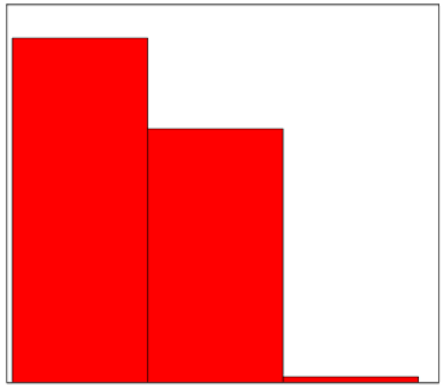
導入：ヒストグラム法

- **ヒストグラム法**(histogram method):**単純にヒストグラムを用いて確率密度関数を推定する方法**
  - **パターン空間を適当に分割する**
    （必ずしも同じ形に分割する必要はない）.
  - **各分割内に入る訓練標本を数える.**
  - **積分が1になるように正規化する.**
- **非常に単純な方法なので便利であるが・・・**

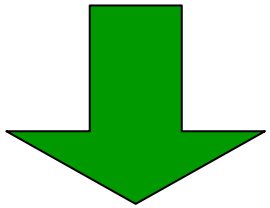
ヒストグラム法の問題点







- 領域間で不連続
- 領域の分割の仕方を決めるのが難しい



もう少し工夫した方法が必要

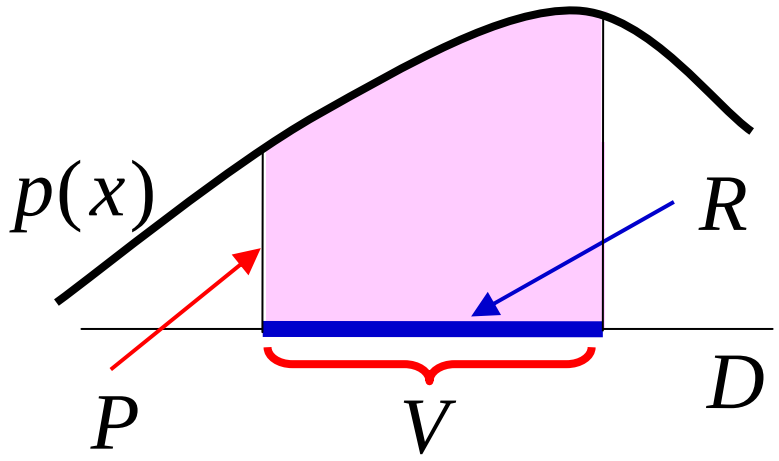
ノンパラメトリック法の表記

- R ：**パターン空間 D 内のある領域**(region)
- V ： R **の体積**(volume)

$$V = \int_R dx$$

- P ：**あるパターン x が R に入る確率**

$$P = \int_R p(x)dx$$



ノンパラメトリック法の基礎

- 推定したい確率密度関数 $p(x)$ が R 内でほぼ一定値を取るとき，確率 P は領域 R 内のある点 x を用いて

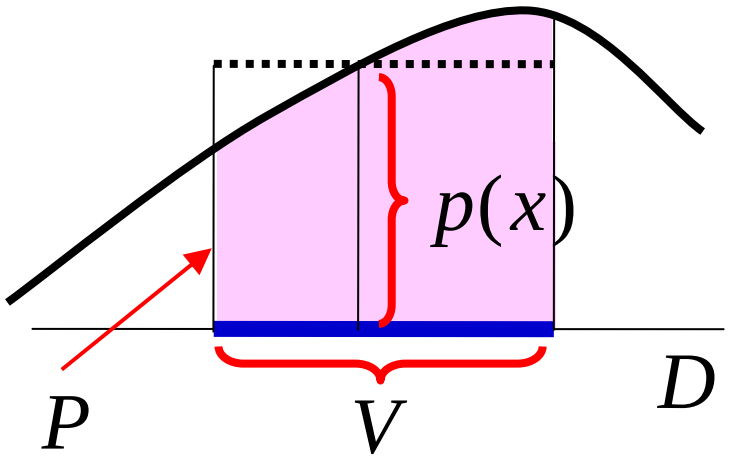
$$P \approx Vp(x)$$

- k ：n個の訓練標本のうち R に入っている個数

$$P \approx k/n$$

$$\Rightarrow \quad p(x) \approx \frac{k}{nV}$$

積分の長方形近似



領域の決め方

$$p(x) \approx \frac{k}{nV}$$

- 近似のよさは領域 R の決め方 (k,V) に依存.
- $p(x)$ が R 内でほぼ一定値をとる

  ⇒ R をできるだけを小さくする
- しかし R を小さくしすぎると， k が0か1しか取らなくなってしまい，$P \approx k/n$ の近似精度が悪い.

⇓

程よい大きさに R を決める必要がある

領域の決め方 (続き)

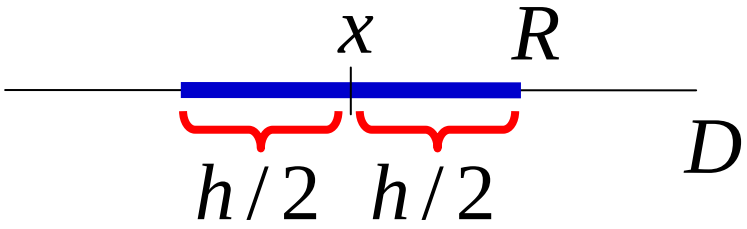
$$p(x) \approx \frac{k}{nV}$$

- 訓練標本を用いて領域 R を決める.
  - **パーゼン窓法, 核密度推定法**:
    V を固定したもとで k を標本から決定
  - **最近傍密度推定法**:
    k を固定したもとで V を標本から決定

パーゼン窓関数

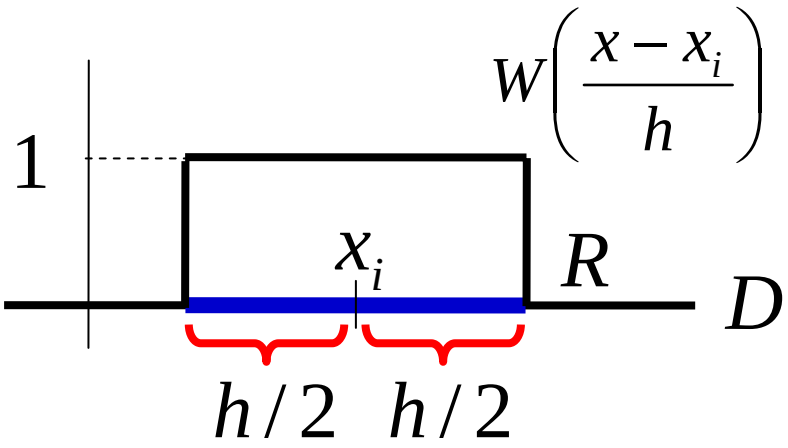
- 領域 R として，ある点 x を中心とする一辺の長さが h の**超立方体**(hypercube)を用いる．
  - 体積 $V = h^d$
  - R に入る標本数

$$k = \sum_{i=1}^{n} W\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$$



$$W(x) = \begin{cases} 1 & \max |x^{(i)}| < \frac{1}{2} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

パーゼン窓関数
(Parzen window function)



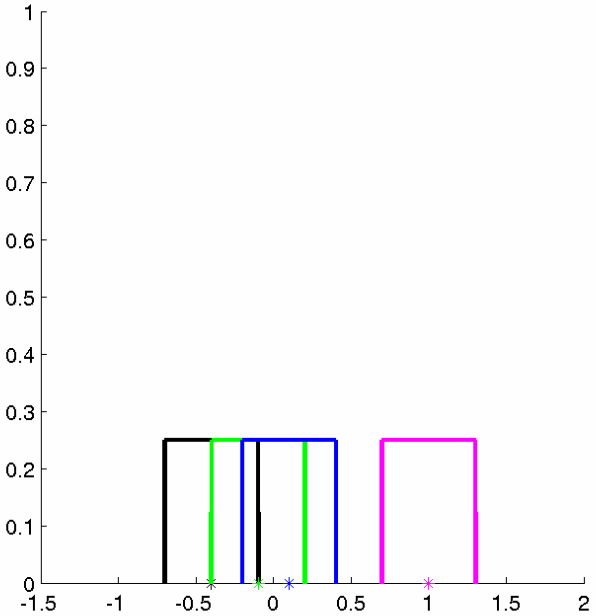
$$x = (x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots x^{(d)})^T$$

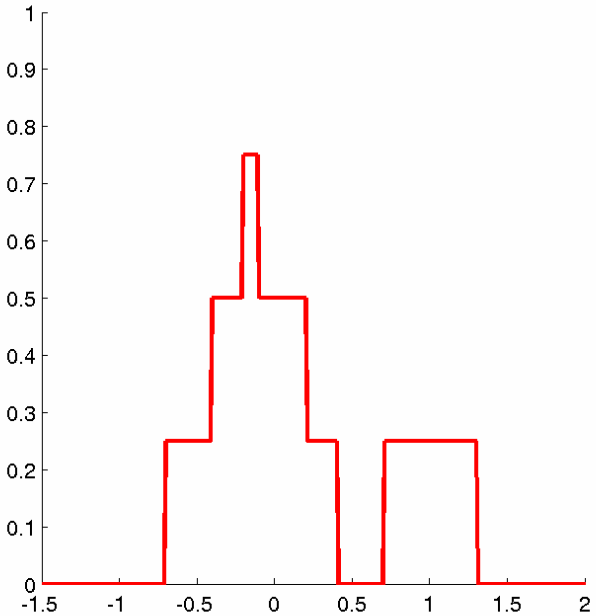
パーゼン窓法

- **パーゼン窓法**(Parzen window method):

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{nh^d} \sum_{i=1}^{n} W\left(\frac{x - x_i}{h} \right)$$

$$p(x) \approx \frac{k}{nV}$$





パーゼン窓法の特徴

- 与えられた標本からパターン領域の分割を適応的に決定できるため，ヒストグラム法のようにあらかじめ領域の分割の仕方を決定しておく必要が無い．
- 領域間での不連続性は未解決．
- 領域の分割の仕方を決める必要は無いが，パーゼン窓関数の幅 h を適切に決める必要がある．

核密度推定法

- パーゼン窓法の不連続性を解決したい
- **核関数**(kernel function) $K(x)$：

$$\int_D K(x)dx = 1 \qquad K(x) \geq 0 \text{ for all } x \in D$$

- **核密度推定法**(kernel density estimation method):

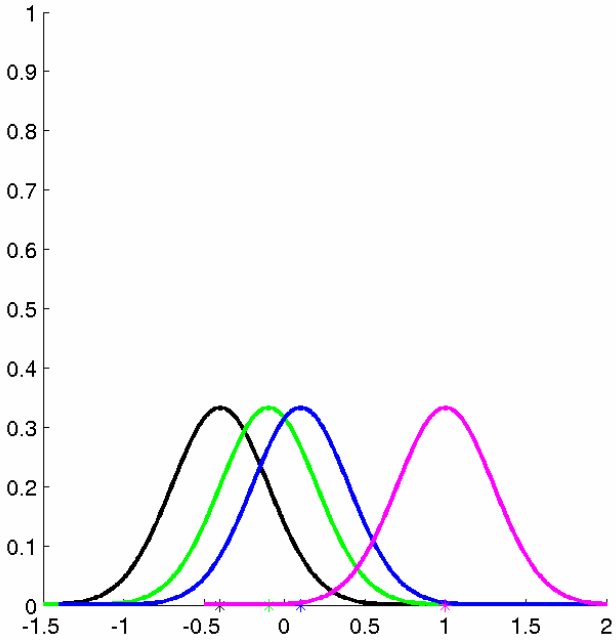
$$\hat{p}(x) = \frac{1}{nh^d} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - x_i}{h} \right)$$

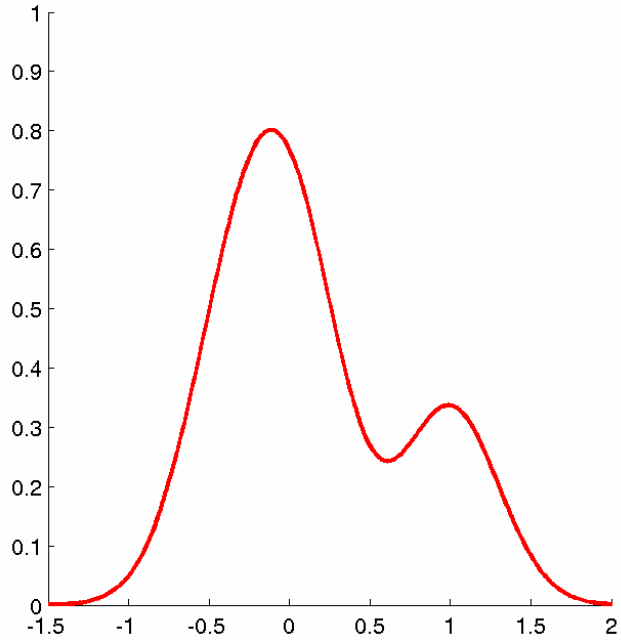
h :**幅**(bandwidth)

核密度推定法の例

- ガウス核関数：

$$K(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp(-\frac{1}{2} x^T x)$$





一般化

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{nh^d} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - x_i}{h} \right)$$

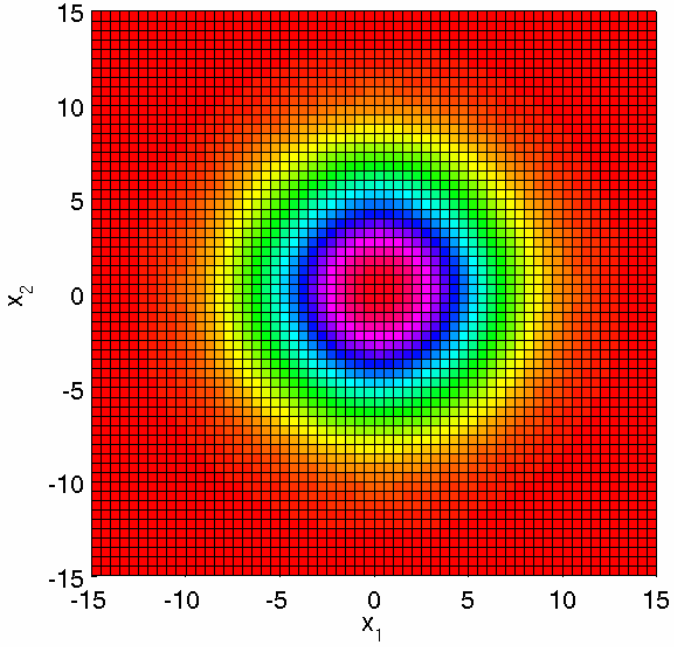
- 幅を一つのパラメータ h で制御すると自由度が小さい.

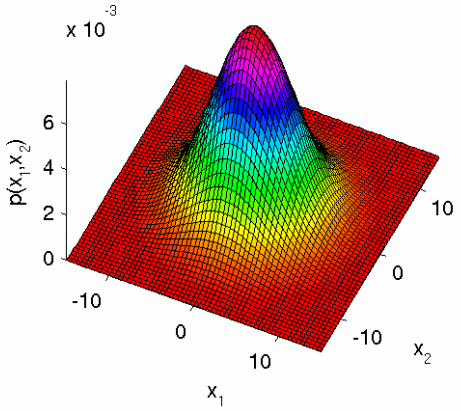
- 幅行列(bandwidth matrix) H：正値対称行列

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{n|H|} \sum_{i=1}^{n} K\left(H^{-1}(x - x_i) \right)$$

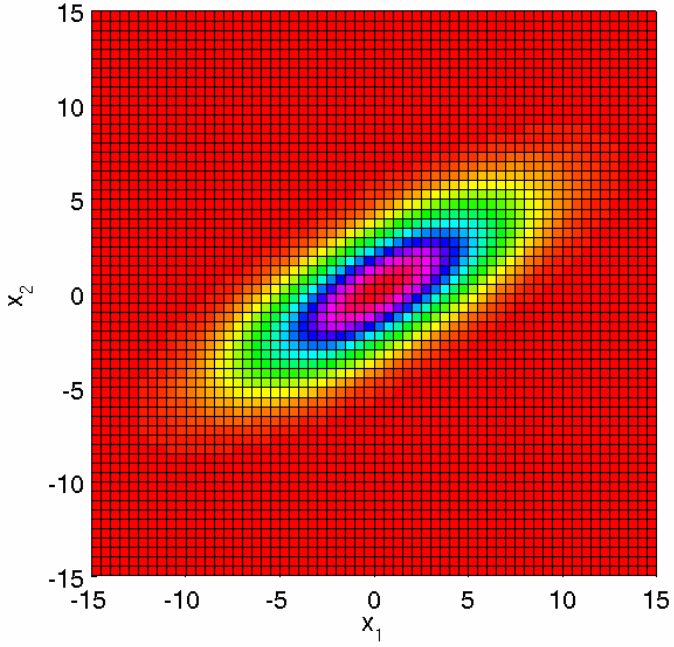
例

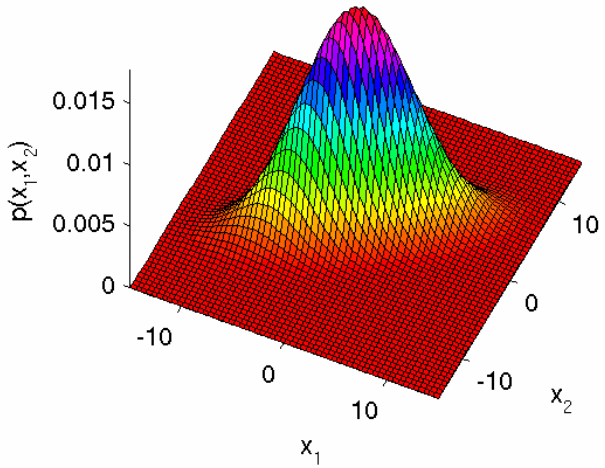
h


15
10
5
0
-5
-10
-15
x2
-15 -10 -5 0 5 10 15
x1


x 10^-3
6
4
2
0
p(x1,x2)
-10
0
10
x1
10
0
-10
x2

H


15
10
5
0
-5
-10
-15
x2
-15 -10 -5 0 5 10 15
x1


0.015
0.01
0.005
0
p(x1,x2)
-10
0
10
x1
10
0
-10
x2

まとめ

- **ノンパラメトリック法**：パラメトリックモデルを用いない確率密度関数の推定法
- ノンパラメトリック法では，領域の大きさを適当に決める必要がある．
- **パーゼン窓法**：体積を固定し，標本数をデータから決定する
- **核密度推定法**：パーゼン窓を滑らかな核関数に置き換えた方法

小レポート (第10回)

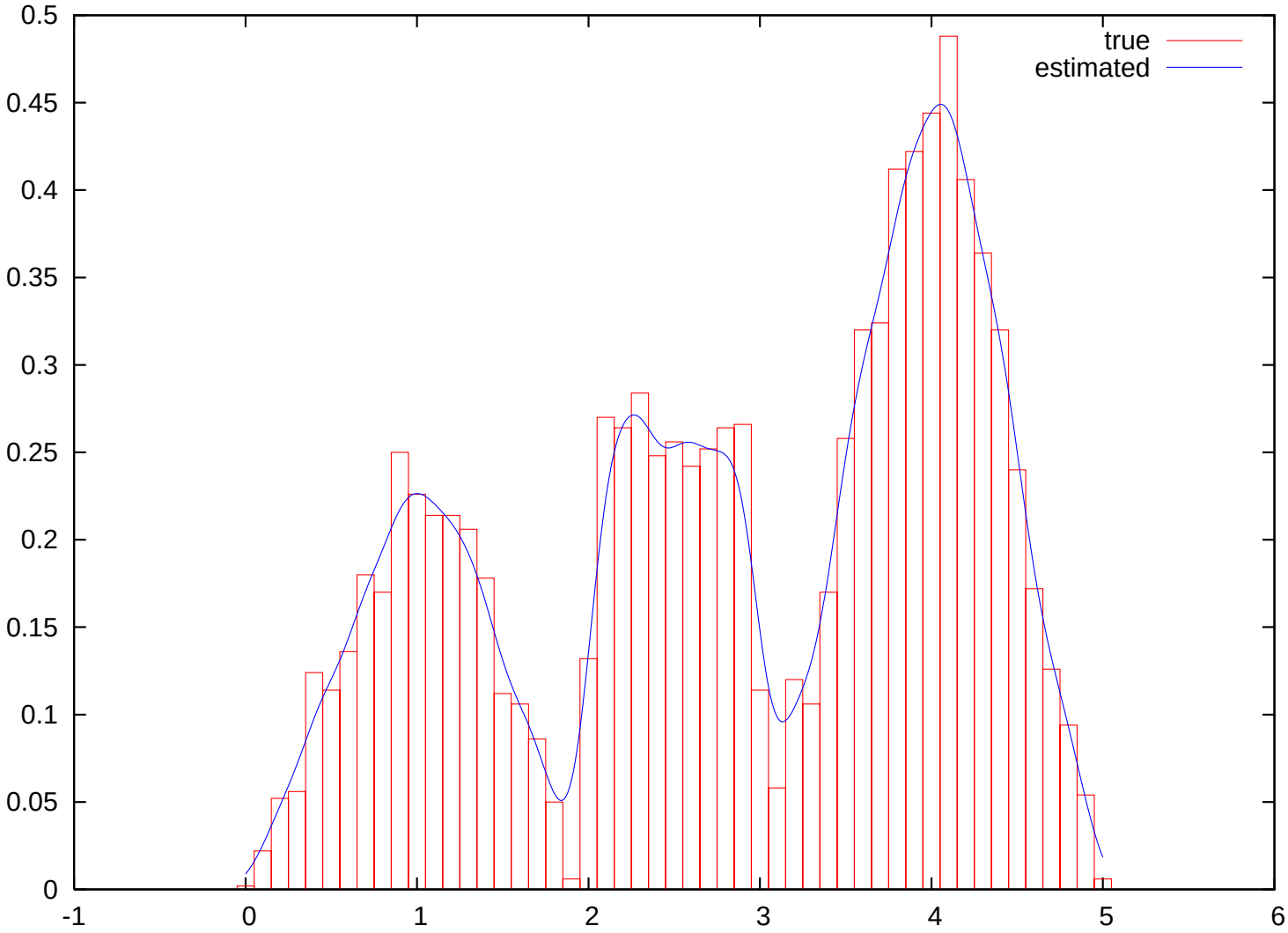
- 核密度推定法を実装し，適当なデータを用いて確率密度関数を推定せよ．
- データ標本数，真の確率分布，核関数，幅などの条件を変化させたとき，どのように推定結果が変わるかを考察せよ．

Octaveのサンプルプログラム

ex10.m

```
clear all
n=5000; x=myrand(n);
h=0.1;

xx=0:0.01:5;
pxh=zeros(size(xx));
for i=1:n
  pxh=pxh+normal_pdf(xx,x(i),h^2)/n;
end

figure(1); clf; hold on;
hist(x,0:0.1:5,10)
plot(xx,pxh,'b-')
legend('true','estimated')
print -depsc kde.eps
```

myrand.m

```
function x=myrand(d)

x=zeros(1,d);
u=rand(1,d);

flag=(0<=u & u<1/8);
x(flag)=sqrt(8*u(flag));
flag=(1/8<=u & u<1/4);
x(flag)=2-sqrt(2-8*u(flag));
flag=(1/4<=u & u<1/2);
x(flag)=1+4*u(flag);
flag=(1/2<=u & u<3/4);
x(flag)=3+sqrt(4*u(flag)-2);
flag=(3/4<=u & u<=1);
x(flag)=5-sqrt(4-4*u(flag));
```

実行例