情報認識
「ガウス最尤推定によるパターン認識器の構成（第４章）」

■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

「情報認識」の全体構成

- 識別関数のよさを測る規準
- 条件付き確率の推定
  - パラメトリック法
    - 最尤推定法, EMアルゴリズム
    - ベイズ推定法, 最大事後確率推定法
  - ノンパラメトリック法
    - カーネル密度推定法
    - 最近傍密度推定法
- 手書き文字認識の計算機実習

最大事後確率則

- 入力パターンが与えられてそれがどのカテゴリに属するかを決めるとき，それが属する可能性が最も高いカテゴリを選ぶ．
- これは，事後確率が最大のカテゴリに分類することに対応．

$$\arg\max_{y} p(y \mid x)$$

カテゴリの対数事後確率

- 対数をとっても大小関係は変わらないため，事後確率の対数をとったものを用いる.
- ベイズの定理より

$$p(y|x) = \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)}$$

- 従って,

$$\log p(y|x) = \log p(x|y) + \log p(y) + C$$

$C = -\log\ p(x)$ ：定数

推定方法

- $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$:訓練標本 $(x_i, y_i) \overset{i.i.d.}{\sim} p(x, y)$

  $x_i \in D\left(\subset \Re^d\right)$ $y_i \in \{1,2,\ldots,c\}$

- n_y :カテゴリ y に属する訓練標本数
- 事前確率 $p(y)$:カテゴリ y に含まれる標本の割合で推定

$$\hat{p}(y) = \frac{n_y}{n}$$

- 条件付き確率 $p(x \mid y)$:ガウスモデルに対する最尤推定

$$\hat{p}(x \mid y) = q(x; \hat{\mu}_y, \hat{\Sigma}_y)$$

ガウスモデル(正規分布)

- d次元の確率ベクトル: $x = (x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(d)})^T$
- 2つのパラメータ:
  - カテゴリ y の平均ベクトル μ_y
  - カテゴリ y の分散共分散行列 Σ_y

$$q(x; \mu_y, \Sigma_y) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \det(\Sigma_y)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_y)^T \Sigma_y^{-1} (x - \mu_y) \right)$$

$\det(\Sigma)$: Σの行列式

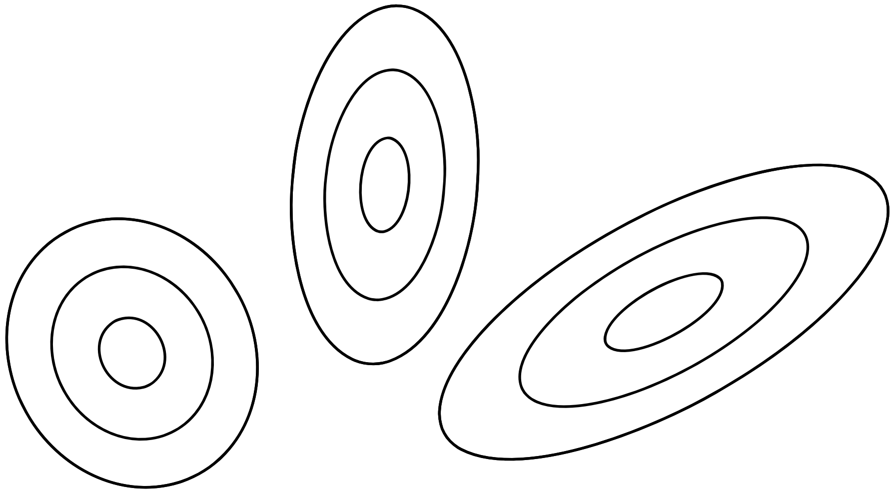
ガウスモデルにおける最尤推定

■ガウスモデルの最尤推定量

$$\hat{\mu}_y = \frac{1}{n_y} \sum_{i:y_i=y} x_i \qquad \hat{\Sigma}_y = \frac{1}{n_y} \sum_{i:y_i=y} (x_i - \hat{\mu}_y)(x_i - \hat{\mu}_y)^T$$

$\sum_{i:y_i=y}$ ： $y_i = y$ を満たす i に関する和

■各カテゴリにガウスモデルを仮定する



カテゴリの対数事後確率の計算

- 分類したい入力パターンを x とすれば,

$$\log \hat{p}(y|x)$$

$$= -\frac{d}{2}\log 2\pi - \frac{1}{2}\log \det(\hat{\Sigma}_y) - \frac{1}{2}(x-\hat{\mu}_y)^T \hat{\Sigma}_y^{-1}(x-\hat{\mu}_y) + \log\frac{n_y}{n} + C$$

$$= -\frac{1}{2}\underbrace{(x-\hat{\mu}_y)^T \hat{\Sigma}_y^{-1}(x-\hat{\mu}_y)}_{\text{マハラノビス距離 (Mahalanobis distance)}} - \frac{1}{2}\log \det(\hat{\Sigma}_y) + \log n_y + C'$$

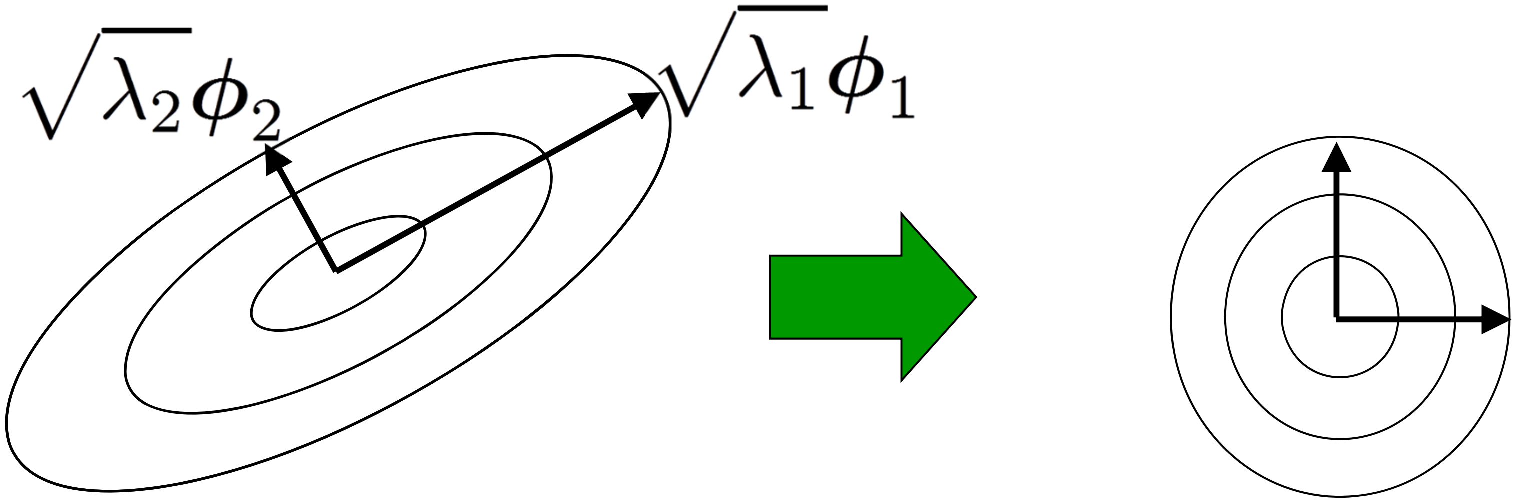
$$C' = -\frac{d}{2}\log 2\pi - \log n + C$$

- カテゴリの対数事後確率は x の二次形式

マハラノビス距離

■ "楕円を正円に変換した距離"

$$(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu) = \left\|\Sigma^{-1/2}(x-\mu)\right\|^2$$



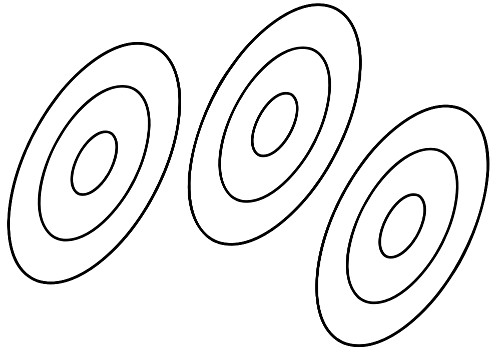
$$\boldsymbol{\Sigma} = \lambda_1 \phi_1 \phi_1^\top + \lambda_2 \phi_2 \phi_2^\top$$

■ $\Sigma^{-1/2}(x-\mu)$ の変換のことを球状化(sphering), あるいは, 白色化(whitening)という.

共分散行列が共通のとき

- 各カテゴリの分散共分散行列が等しいという前提知識があるときを考える:

$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \cdots = \Sigma_c = \Sigma$$



- 共通の分散共分散行列 Σ の最尤推定量は

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{y=1}^{c}\sum_{i:y_i=y}(x_i - \hat{\mu}_y)^T(x_i - \hat{\mu}_y)$$

$$= \sum_{y=1}^{c}\frac{n_y}{n}\hat{\Sigma}_y$$

各カテゴリの分散共分散行列の重み付き平均

共分散行列が共通のとき(続き)

- 各カテゴリの分散共分散行列が等しい時,

$$\log \hat{p}(y \mid x)$$

$$= -\frac{1}{2} x^T \hat{\Sigma}^{-1} x + \hat{\mu}_y^T \hat{\Sigma}^{-1} x - \frac{1}{2} \hat{\mu}_y^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y - \frac{1}{2} \log \det(\hat{\Sigma}) + \log n_y + C'$$

$$= \hat{\mu}_y^T \hat{\Sigma}^{-1} x - \frac{1}{2} \hat{\mu}_y^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}_y + \log n_y + C''$$

$$C'' = -\frac{1}{2} x^T \hat{\Sigma}^{-1} x - \frac{1}{2} \log \det(\hat{\Sigma}) + C'$$

- カテゴリの対数事後確率は x の一次形式

決定境界の計算

- カテゴリ数が2のとき，決定境界は

$$\hat{p}(y=1|x)=\hat{p}(y=2|x)$$

- ガウスモデルと最尤推定を用いたとき，決定境界は二次形式．
- 更に分散共分散行列が共通のとき，決定境界は一次形式，即ち，超平面(hyper-plane)．

$$a^T x + b = 0$$

$$a = \hat{\Sigma}^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)$$

$$b = -\tfrac{1}{2}(\hat{\mu}_1^T \hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2^T \hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_2) + \log(n_1/n_2)$$

- この場合を特に，フィッシャーの線形判別分析(Fisher’s linear discriminant analysis)という．

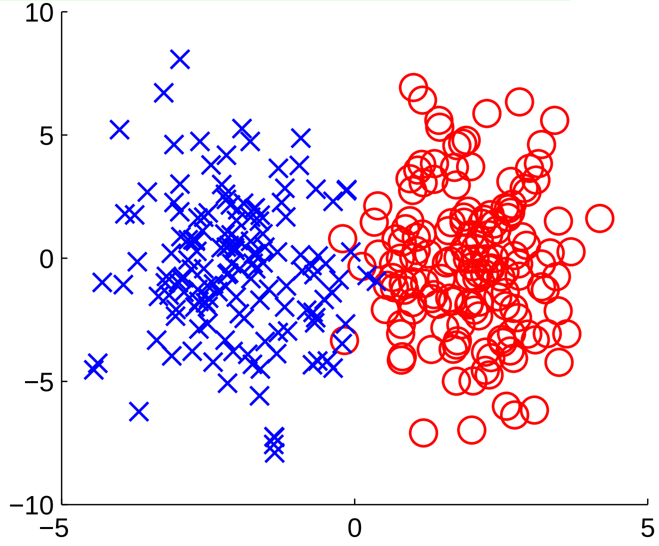
演習

$$\frac{p(y=1)}{p(y=2)} \approx \frac{n_1}{n_2}$$

- 入力次元 $d=2$ ，カテゴリ数 $c=2$
- 各カテゴリの事前確率: $p(y=1)=p(y=2)=1/2$
- 各カテゴリの条件付き確率 $p(x|y)$ は正規分布．期待値と分散共分散行列はそれぞれ

$$\mu_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mu_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}$$

1. 上記の設定のもと，最大事後確率則に基づいた決定境界を求めよ



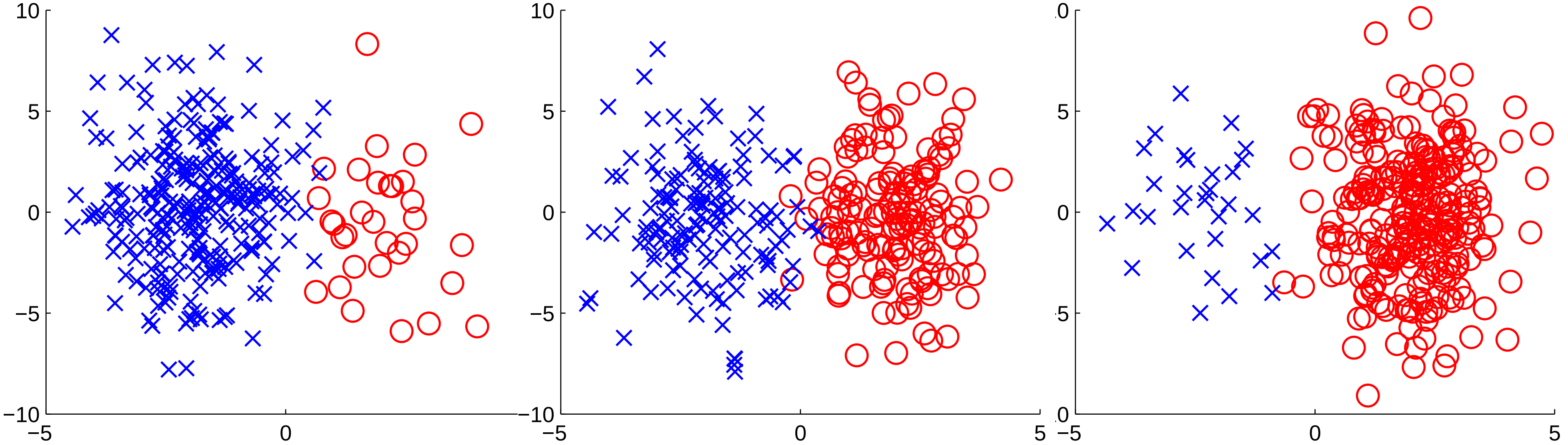
演習(続き)

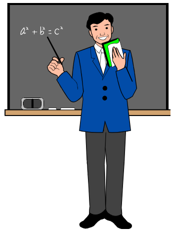
2. 演習1の問題で事前確率を次のように設定する.

$$p(y=1)=\alpha \qquad p(y=2)=1-\alpha$$

- α を $0<\alpha<1$ の間で変化させると決定境界はどのように変化するか？

$\alpha=1/10$ $\qquad$ $\alpha=1/2$ $\qquad$ $\alpha=9/10$





まとめ

- 各カテゴリの標本が正規分布に従うとき,
  - 対数事後確率は二次形式
  - 2カテゴリのとき, 決定境界は二次形式
- 更に各カテゴリの共分散行列が共通のとき
  - 対数事後確率の主要項は一次形式
  - 2カテゴリのとき, 決定境界は一次形式(超平面)

小レポート(第4回)

1. 演習1の問題で共分散行列を次のように設定する

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 9-8\cos^2\beta & 8\sin\beta\cos\beta \\ 8\sin\beta\cos\beta & 9-8\sin^2\beta \end{pmatrix}$$

これは，各カテゴリのデータを β だけ回転させたものに対応している(次ページの図参照)

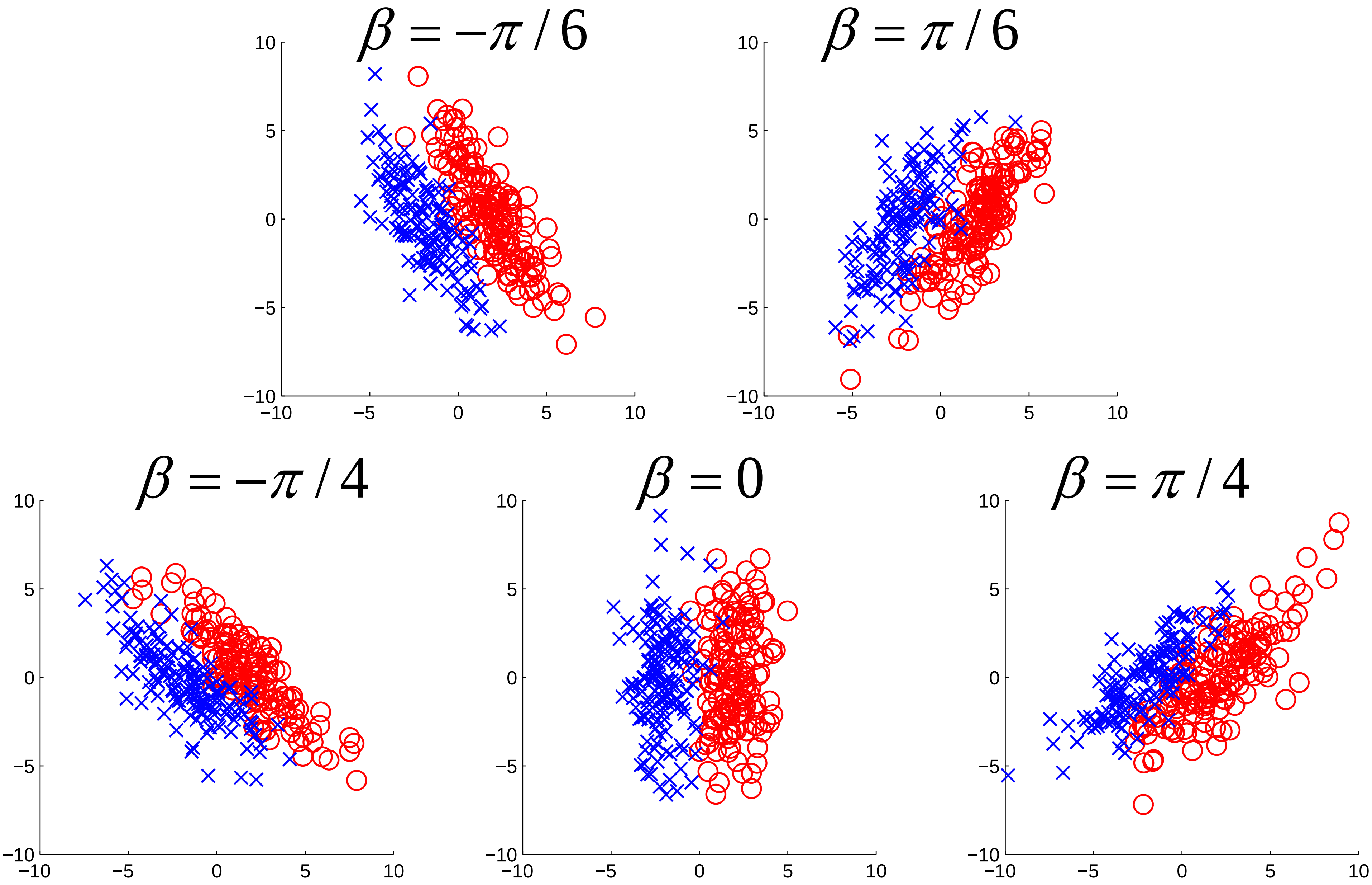
- $\beta = -\frac{1}{4}\pi, -\frac{1}{6}\pi, 0, \frac{1}{6}\pi, \frac{1}{4}\pi$ に対する決定境界を求めよ.
- β を $-\pi/4 \le \beta \le \pi/4$ の間で変化させると，決定境界はどのように変化するか？

■ヒント：

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 1-\frac{8}{9}\sin^2\beta & -\frac{8}{9}\sin\beta\cos\beta \\ -\frac{8}{9}\sin\beta\cos\beta & 1-\frac{8}{9}\cos^2\beta \end{pmatrix}$$

$$\sin\tfrac{1}{4}\pi = 1/\sqrt{2}$$
$$\sin\tfrac{1}{6}\pi = 1/2$$

小レポート(続き)



連絡

- 11月11日(月)は計算機実習を行う.
- 場所は情報工学科計算機室:
  - http://www.csc.titech.ac.jp/
- 課題資料は事前にウェブで公開する
- 当日に出席は取らないので, 自分でできる学生は好きな時間に各自で演習を行っても良い.
- 情報工学科計算機室のアカウントを持っていない学生は, 相談に来ること.
- 11月18日(月)は通常の講義
  - 最尤推定法におけるモデル選択(第7章)