情報意味論(10)

EMと事例ベースアプローチ

櫻井彰人
慶應義塾大学理工学部

目次

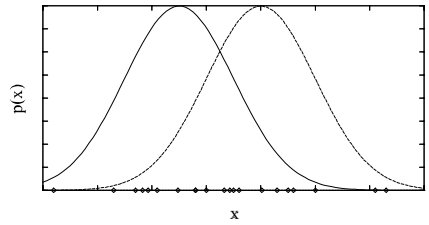
- EM-アルゴリズム
- 事例ベースアプローチ
  - k-最近傍法
  - Radial basis function network

EM: Expectation Maximization

- 使う時:
  - データに観測可能でないものがあるとき
  - 教師なしクラスタリング(目標値が観測不能)
  - 教師付きクラスタリング(属性に観測不能なものがある)
- 利用場所:
  - ベイジアンネットワークの学習
  - 教師なしクラスタリング(例:AUTOCLASS)
    - P.Cheeseman http://ic.arc.nasa.gov/ic/projects/bayes-group/people/cheeseman/
  - HMM(Hidden Markov Model)の学習

k個の正規分布の混合

- 事例xは次のように生成される
  - k個の正規分布から一個を一様ランダムに選択
  - その正規分布に従い一事例をランダムに生成



k個の平均を推定するEM

- 所与:
  - k正規混合分布Xからの事例
  - そのk個の正規分布の未知の平均 $\langle \mu_1, .., \mu_k \rangle$
  - どの事例x_iがどの正規分布から生成されたかは不明
- 決定すべき:
  - $\langle \mu_1, .., \mu_k \rangle$の最尤推定値
- 個々の事例の完全な記述を$y_i = \langle x_i, z_{i1}, z_{i2} \rangle$とする
  - z_{ij}はx_iがj番目の正規分布から生成されたとき1
  - x_iは観測可能
  - z_{ij}は観測不能

k個の平均を推定するEM

- EMアルゴリズム:ランダムな初期値$\langle \mu_1, \mu_2 \rangle$を選び、次を繰り返す
  - Eステップ:現在の仮説$h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$のもと、隠れ変数$z_{ij}$の期待値$E[z_{ij}]$を求める(実は分布$P(z_{ij}=1)$を求めている)

$$P(z_{ij}=1) = E[z_{ij}] = \frac{p(x=x_i \mid \mu=\mu_j)}{\sum_{n=1}^{2} p(x=x_i \mid \mu=\mu_n)} = \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu_j)^2}}{\sum_{n=1}^{2} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu_n)^2}}$$

  - Mステップ:隠れ変数z_{ij}の値は今求めた$E[z_{ij}]$に等しいと仮定して、新しい最尤推定値$h' = \langle \mu_1', \mu_2' \rangle$を求める(実は、$P(z_{ij}=1)$を用いて、$h'$の最尤推定をしている)。

$$\mu_j \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^{m} E[z_{ij}] x_i}{\sum_{i=1}^{m} E[z_{ij}]}$$

EMアルゴリズム

- 本アルゴリズムは局所的に最尤なhに収束し、隠れ変数z_{ij}の推定値を与える
- 事実、$E[\ln P(Y|h)]$の極大値を与える。但し
  - Yは完全なデータ（観測済みと未観測なデータの組合せ）
  - 期待値は、未観測データがとりうる全ての値の上で計算される

一般のEM問題

- 所与：
  - 観測データ $X=\{x_1,\ldots,x_m\}$
  - 観測しないデータ $Z=\{z_1,\ldots,z_m\}$
  - パラメータ化分布 $P(Y|h)$. 但し
    - $Y=\{y_1,\ldots,y_m\}$ は完全なデータ $y_i = x_i \cup z_i$
    - hはパラメータ集合
- 求めるもの：hの最尤推定量
  - 観測データの尤度の最大化によって得られる
  - $P(X|h)=\int P(Y|h)dZ$ を最大化するh

一般のEM法

- 完全データ$Y=X\cup Z$ の対数尤度の（Xとパラメータhに対する条件付）期待値$Q(h'|h)$を考える
  $Q(h'|h)= E[\log P(Y|h') \mid h, X] = \int \log P(Y|h')\, P(Z|X,h)\, dZ$
- EMアルゴリズム
  - Estimationステップ: 現在の仮説hと観測データXを用いて、Qを計算する
    - 計算は, 現在のhとXのもと $P(Z|X,h)$ を求めることに集約される
  - Maximizationステップ：Qを最大化するh'を求めそれをhとする
- このとき、$\log P(X|h)$ が単調に非減少である
  - $P(X|h)=\int P(Y|h)dZ$ の極大化が図られる

事例ベース学習

- キーアイデア：訓練データ$<x_i,f(x_i)>$を全て憶えていよう
- 最近傍法（Nearest neighbor）
- k-Nearest neighbor
- Locally weighted regression
- Radial basis functions
- Lazy 対 eager

最近傍法

- 最近傍法（Nearest neighbor）
  - 問合せx_q に対し、最近接のx_nを見つけ、$f(x_q)\leftarrow f(x_n)$ とする
- k-Nearest neighbor
  - k個の最近接データの間で、多数決
  - k個の最近接データの間で、平均値

最近傍法の特徴

- いつ使うか
  - 属性が R^n の点とみなせる
  - 大体20個以下の属性
  - 大量の訓練データ
- 長所
  - 学習が速い
  - 複雑な目標関数も可能
  - （訓練データがもつ）情報を失うことがない
- 短所
  - 問合せ時、遅い
  - 無関係な属性で、簡単にごまかされる

極限における振舞い

- $p(x)$: 事例xがラベル1（正）をもつ確率
- Nearest neighbor:
  - 事例数→∞のとき、Gibbsアルゴリズムに漸近
  - Gibbs: 確率$p(x)$で1を予測
- k-Nearest neighbor
  - 事例数→∞かつkが大きくなると、Bayes最適
  - Bayes最適：$p(x)>0.5$ なら1、それ以外0

注：Gibbs の期待誤差はBayesの倍以下

距離荷重つき k-NN

- 近い事例の判断を重視したい

$$\hat{f}(x_q) \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^{k} w_i f(x_i)}{\sum_{i=1}^{k} w_i}, \quad w_i \equiv \frac{1}{d(x_q, x_i)^2}$$

但し、$d(x_q,x_i)$は、x_qとx_iの間の距離

- これにより、k個のみならず全データを使うことに意味がでてくる⇒Shepardの方法

次元の呪い

- 20個の属性で記述されるが、その内、たった2属性のみが意味ある場合を考える
- 次元の呪い：
  - k-NNなら、他の18属性の値でどんな結論も出うる
- 解決方法
  - j番目の属性にz_jの荷重を。z_jは予測誤差最小となるように選択
  - cross-validationを用いて自動的にz_jを決定

Locally weighted regression

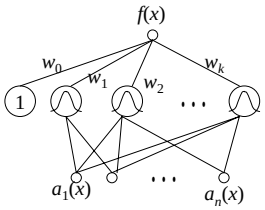
- k-NN は各問合せx_qでfの局所近似を構成していた
- x_qの周囲で$f(x)$の近似関数を明示的に構成したらどうだろうか？
  - k-NNに線型回帰したら？
  - 2次回帰では？
  - 区分回帰したら？
- 最小化すべき誤差にもいくつかの候補が

$$E_1(x_q) \equiv \frac{1}{2} \sum_{x \in x_q \text{のk-NN}} \left(f(x) - \hat{f}(x_q)\right)^2$$

$$E_2(x_q) \equiv \frac{1}{2} \sum_{x \in D} \left(f(x) - \hat{f}(x_q)\right)^2 K(d(x_q, x))$$

Radial Basis Function Network

- 局所近似の線型結合による大域近似
- 神経回路網の一種
- distance-weighted regression に類似
  - lazy ではなく eager であるが



$$f(x) = w_0 + \sum_{u=1}^{k} w_u K_u(d(x_u, x))$$

$K_u(d(x_u,x))$ の一例

$$K_u(d(x_u, x)) \equiv e^{-\frac{1}{2\sigma^2} d(x_u, x)^2}$$

RBFの学習

- $K_u(d(x_u,x))$ の x_u の定め方
  - 事例空間に一様にばら撒く
  - 事例を使用（事例の分布が反映）
- 荷重の学習（K_uは正規分布とする）
  - 各K_uの分散（と平均）を定める
    - 例えば、EMを使用
  - K_uを固定したまま、線型出力部分を学習
    - 線型回帰で高速に

Lazy 対 eager

- Lazy: 事例からの一般化をしないでいる。問合せがあったときに考える
  - k-Nearest Neighbor
- Eager: 問合せ前に予め一般化しておく
  - 「学習」アルゴリズム、ID3, 回帰, RBF,,,
- 違いはあるか？
  - Eager学習は全域的な近似を作成
  - Lazy学習は局所近似を大量に作成
  - 同じ仮説空間を使うなら、lazy の方が複雑な関数を作成
    - over-fitting の可能性
    - 柔軟（複雑なところと単純なところの組合せ）

まとめ

- 事例ベースアプローチ
  - 大域的な構造を仮定しない
    - どんな場合にも使える
  - 雑音に弱い（大域構造を用いた平滑化ができない）
  - 次元の呪い