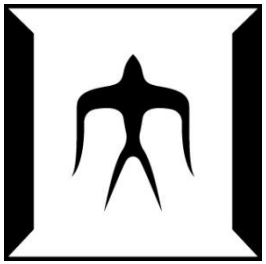
確率的パターン認識とクラスタリングの新手法



東京工業大学　計算工学専攻
杉山　将

概要

本講演では，講演者のグループで最近開発した確率的パターン認識とクラスタリングの新手法を紹介する．

確率的パターン認識は，パターンxがクラスyに属する確率p(y|x)を推定し，この確率を最大するクラスyにパターンxを割り当てるパターン認識法である．確率的パターン認識の代表的な手法は（カーネル）ロジスティック回帰であるが，非線形最適化問題を準ニュートン法などで解く必要があるため，大規模なデータに適用するのが困難であった．そこで我々は，最適解が解析的に求められる手法「最小二乗確率的分類器(LSPC)」を提案した[1]．LSPCは，カーネルロジスティック回帰と同等の認識精度を維持しつつ，数百～千倍高速に学習できることを実験的に示す．

クラスタリングの目的は，似たパターンに同じクラスラベルを，似ていないパターンに異なるクラスラベルを割り当てることである．これまでに，様々なクラスタリング手法が提案されてきたが，アルゴリズムの適切な初期化が困難であったり，カーネル幅や近傍数などのパラメータの決定が困難であるという問題があった．そこで我々は，初期値に依存せず解析的に解を求められるクラスタリング法「二乗損失相互情報量クラスタリング(SMIC)」を提案する共に，カーネル幅や近傍数などのパラメータを客観的に決定するための規準「最小二乗相互情報量(LSMI)」を提案した[2]．提案手法の有効性を計算機実験により示す．

[1] Sugiyama, M.
Superfast-trainable multi-class probabilistic classifier by least-squares posterior fitting.
IEICE Transactions on Information and Systems, vol.E93-D, no.10, pp.2690-2701, 2010.
http://sugiyama-www.cs.titech.ac.jp/~sugi/2010/LSPC.pdf

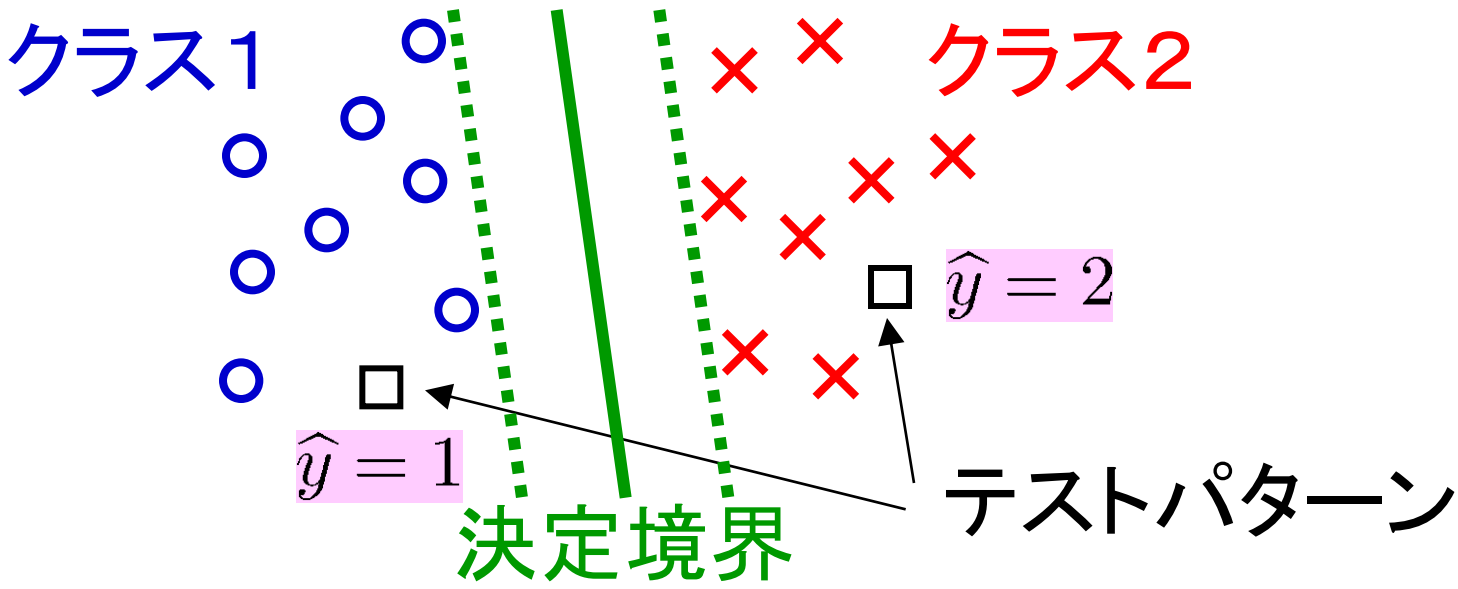
[2] Sugiyama, M., Yamada, M., Kimura, M., & Hachiya, H.
On information-maximization clustering: tuning parameter selection and analytic solution.
International Conference on Machine Learning (ICML2011), pp.65-72, 2011.
http://sugiyama-www.cs.titech.ac.jp/~sugi/2011/ICML2011a.pdf

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
   A) 条件付き確率推定
   B) 提案手法
   C) 高速化の理由
   D) 実験
2. クラスタリング

決定的パターン認識の標準手法：サポートベクトルマシン

- 訓練標本 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$ から，マージンを最大にする決定境界を求める



- テストパターン x の属するクラス y を予測

確率的パターン認識

- 応用場面によっては，予測したクラスの信頼度を知りたいことがある
- テストパターン x が属するクラス y を予測するだけでなく，その確率 $p(y|x)$ も求める
- 確率が最大のクラスにテストパターンを分類

$$\widehat{y} = \underset{y}{\operatorname{argmin}}\, p(y|\boldsymbol{x})$$

- 確率が低いときは「棄却」という選択肢を選ぶこともできる（応用上は重要！）

確率的パターン認識の標準手法：カーネルロジスティック回帰（KLR）

- 多クラスカーネル**ロジスティックモデル**：

$$q(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}) \propto \exp\left(\sum_{i=1}^{n} \theta_i^{(y)} K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)\right)$$

$$K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

- （罰則付き）**最尤推定**により学習：

$$\min_{\boldsymbol{\theta}}\left[-\sum_{i=1}^{n}\log q(y_i|\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}) + \frac{\lambda}{2}\boldsymbol{\theta}^\top\boldsymbol{\theta}\right]$$

学習アルゴリズム

	サポートベクトルマシン（決定的分類）	ロジスティック回帰（確率的分類）
非線形	高速	低速
線形で入力が疎	超高速	超高速

- 超高速に学習できる非線形確率的分類器を紹介する

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
   - A) 条件付き確率推定
   - B) 提案手法
   - C) 高速化の理由
   - D) 実験
2. クラスタリング

定式化

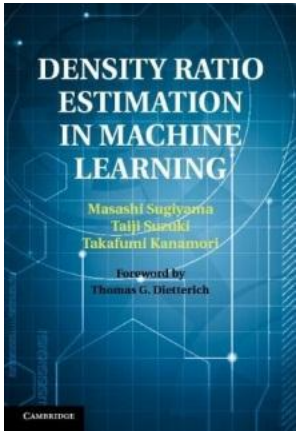
- パターン: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$
- クラス: $y \in \{1, \ldots, c\}$
- 訓練標本: パターンとクラスの組

$$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{n} \overset{i.i.d.}{\sim} p(\boldsymbol{x}, y)$$

- 方針: 条件付き確率を密度比の形で推定する

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

Sugiyama, Suzuki & Kanamori,
Density Ratio Estimation
in Machine Learning,
Cambridge University Press, 2012



条件付き確率のカーネル最小二乗推定

■ モデル: $$q(y|\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(y)} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)$$

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

■ クラス y のパラメータの学習規準: $\min_{\boldsymbol{\alpha}} J_y(\boldsymbol{\alpha})$

$$J_y(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\int \Big(q(y|\boldsymbol{x}) - p(y|\boldsymbol{x})\Big)^2 p(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}$$

二乗損失の分解

$$J_y(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\int \Big(q(y|\boldsymbol{x}) - p(y|\boldsymbol{x})\Big)^2 p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}$$

$$= \frac{1}{2}\int \Big(q(y|\boldsymbol{x})\Big)^2 p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \; - \int q(y|\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x},y)d\boldsymbol{x}$$

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

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

- 1項目：$(q(y|\boldsymbol{x}))^2$の $p(\boldsymbol{x})$に関する期待値
- 2項目：$q(y|\boldsymbol{x})$の $p(\boldsymbol{x},y)$に関する期待値
- 3項目：定数なので無視
- 期待値は標本平均で近似できる

→ 密度推定不要

最小二乗確率的分類器(LSPC)

Sugiyama (IEICE-ED 2010)

- 期待値を標本平均で近似し，ℓ_2-正則化項を加える：

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}^{(y)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\alpha}} \left[\frac{1}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{\alpha} - \frac{2}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{1}^{(y)} + \frac{\lambda}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{\alpha} \right]$$

$$K_{i,j} = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \qquad 1_i^{(y)} = \begin{cases} 1 & \text{if } y_i = y \\ 0 & \text{if } y_i \neq y \end{cases}$$

- 解は解析的に計算できる：

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}^{(y)} = (\boldsymbol{K}^2 + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{K} \boldsymbol{1}^{(y)}$$

  - $\boldsymbol{1}^{(y)}$を出力とするカーネルリッジ学習と等価

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
   - A) 条件付き確率推定
   - B) 提案手法
   - C) 高速化の理由
   - D) 実験
2. クラスタリング

KLRの学習の困難さ

$$q(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\theta})} \exp\left(\sum_{i=1}^{n} \theta_i^{(y)} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\right)$$

- 正規化定数 $Z(\boldsymbol{\theta})$ の計算が煩雑:

$$Z(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{y=1}^{c} \exp\left(\sum_{i=1}^{n} \theta_i^{(y)} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\right) \qquad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\theta}^{(1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\theta}^{(c)} \end{pmatrix}$$

  - $Z(\boldsymbol{\theta})$ は全クラスのパラメータを含む: $\dim \boldsymbol{\theta} = nc$
  - 正規化なしでは尤度が無限大に発散:

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \left[-\sum_{i=1}^{n} \log q(y_i|\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}) + \frac{\lambda}{2} \boldsymbol{\theta}^\top \boldsymbol{\theta} \right]$$

- 最適化を高速化するための良い「構造」がない

なぜLSPCは速いか？

- LSPCは正規化定数を含まない:

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}^{(y)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\alpha}} \left[\frac{1}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{\alpha} - \frac{2}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{K} \mathbf{1}^{(y)} + \frac{\lambda}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{\alpha} \right]$$

$$K_{i,j} = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \qquad 1_i^{(y)} = \begin{cases} 1 & \text{if } y_i = y \\ 0 & \text{if } y_i \neq y \end{cases}$$

  - LSPCは正規化なしでも一致性を持つ
    （実用上は事後に正規化をしても良い）
  - 各クラス別々に学習できる: $\dim \boldsymbol{\alpha} = n$

- 単純なカーネル最小二乗の定式化のおかげで，解が解析的に求められる！

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}^{(y)} = (\boldsymbol{K}^2 + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{K} \mathbf{1}^{(y)}$$

LSPCのパラメータの非負性

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}^{(y)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\alpha}} \left[\frac{1}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{\alpha} - \frac{2}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{K} \mathbf{1}^{(y)} + \frac{\lambda}{n} \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{\alpha} \right]$$

- 学習したパラメータ $\widehat{\alpha}^{(y)}$ は負の値を取る可能性がある.
  - 非負拘束を加えても良いが，解を解析的に求められなくなる（二次計画問題を数値的に解く必要がある）

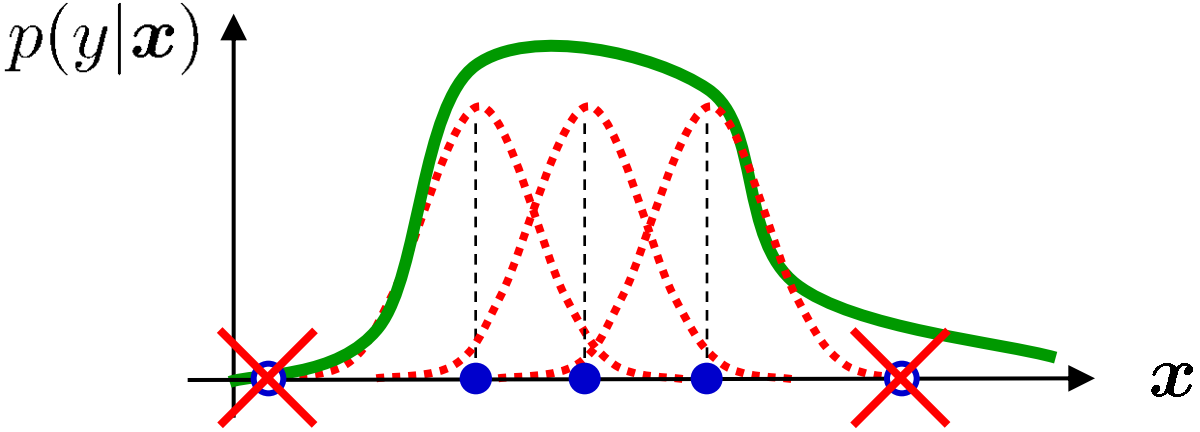
$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}^{(y)} = (\boldsymbol{K}^2 + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{K} \mathbf{1}^{(y)}$$

- 単純に負の出力を0に切り上げることにする:

$$\widehat{p}(y|\boldsymbol{x}) \propto \max\left(0, \sum_{\ell=1}^{n} \widehat{\alpha}_\ell^{(y)} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_\ell)\right)$$

LSPCの更なる高速化

- カーネルを対象クラスの標本のみに配置する:
  - 対象クラスの標本がある場所は事後確率が大きい
  - それ以外では事後確率はゼロに近い



$$q(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\alpha}^{(y)}) = \sum_{\ell=1}^{n_y} \alpha_\ell^{(y)} \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_\ell^{(y)}\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

$\dim \boldsymbol{\alpha}^{(y)} = n_y$

n_y: クラス y の標本数

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
   - A) 条件付き確率推定
   - B) 提案手法
   - C) 高速化の理由
   - D) 実験
2. クラスタリング

実験結果

Dataset	LSPC	KLR
Aeroplane	**82.6**(1.0)	**83.0**(1.3)
Bicycle	**77.7**(1.7)	76.6(3.4)
Bird	68.7(2.0)	**70.8**(2.2)
Boat	**74.4**(2.0)	72.8(2.6)
Bottle	**65.4**(1.8)	62.1(4.3)
Bus	**85.4**(1.4)	**85.6**(1.4)
Car	**73.0**(0.8)	72.1(1.2)
Cat	**73.6**(1.4)	**74.1**(1.7)
Chair	**71.0**(1.0)	**70.5**(1.0)
Cow	**71.7**(3.2)	69.3(3.6)
Diningtable	**75.0**(1.6)	71.4(2.7)
Dog	**69.6**(1.0)	**69.4**(1.8)
Horse	**64.4**(2.5)	61.2(3.2)
Motorbike	**77.0**(1.7)	75.9(3.3)
Person	**67.6**(0.9)	67.0(0.8)
Pottedplant	**66.2**(2.6)	61.9(3.2)
Sheep	**77.8**(1.6)	74.0(3.8)
Sofa	**67.4**(2.7)	65.4(4.6)
Train	**79.2**(1.3)	**78.4**(3.0)
Tvmonitor	**76.7**(2.2)	**76.6**(2.3)
Average	73.2	71.9
Train time [sec]	0.7	24.6

画像からの一般物体認識
Pascal VOC
(AUC)

オーディオタグ付け
Freesound (AUC)

	LSPC	KLR
AUC	70.1 (9.6)	66.7 (10.3)
Train time [sec]	0.005	0.612

- LSPCは速くて高精度！

確率的パターン認識のまとめ

- KLR:対数線形モデルの最尤推定
  - 正規化項の計算が煩雑
  - 最適化を高速化するための良い「構造」がない
- LSPC:線形モデルの最小二乗推定
  - 正規化が不要⇒クラスごとに学習できる
  - 解が解析的に計算できる

http://sugiyama-www.cs.titech.ac.jp/~sugi/software/LSPC/

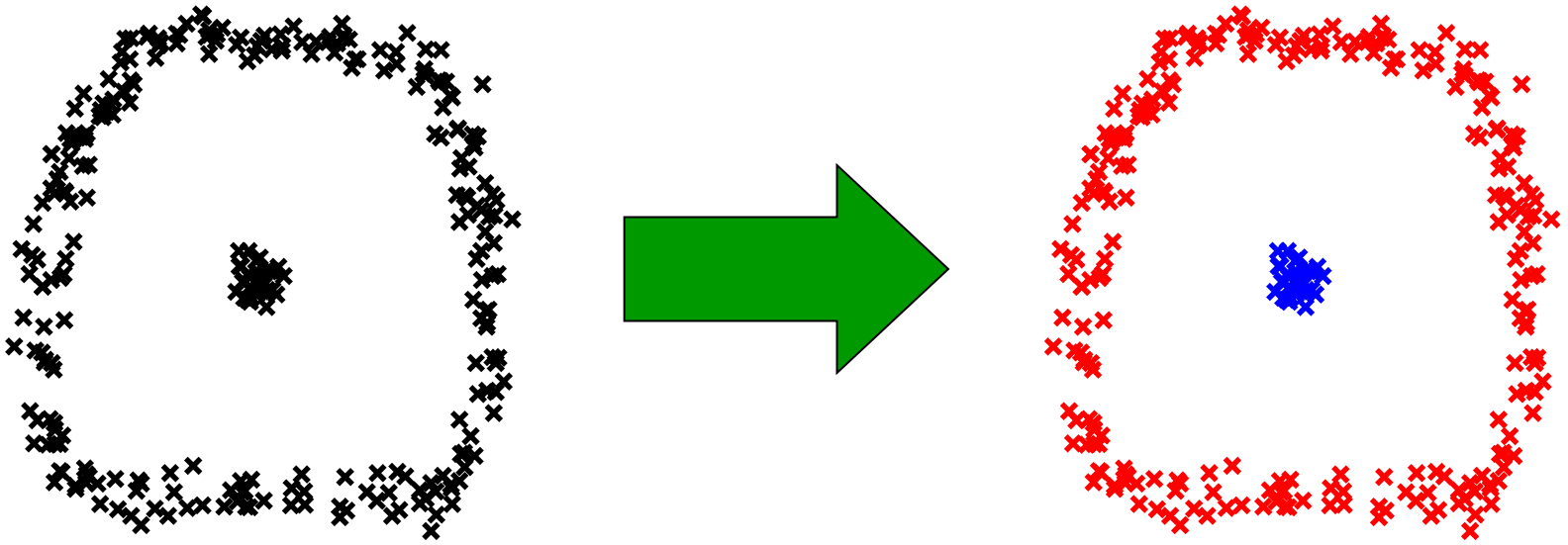
- 関連研究:
  - マルチタスク，マルチラベル，転移学習への拡張
  - 条件付き確率密度推定
  - 顔画像からの年齢認証への応用

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
2. クラスタリング
   - A) 従来法の紹介
   - B) 提案法
     - i. クラスタリング
     - ii. チューニングパラメータの自動選択
   - C) 実験

クラスタリング

- ラベルなし標本 $\{\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d\}_{i=1}^n$ に
  クラスタラベル $\{y_i \in \{1, \ldots, c\}\}_{i=1}^n$ を付与する:
  - 似た標本は同じクラスタに割り当てる
  - 似ていない標本は違うクラスタに割り当てる
- 本研究では，クラスタ数 c は既知と仮定する



本発表の構成

1. 確率的パターン認識
2. クラスタリング
   - A) 従来法の紹介
   - B) 提案法
     - i. クラスタリング
     - ii. チューニングパラメータの自動選択
   - C) 実験

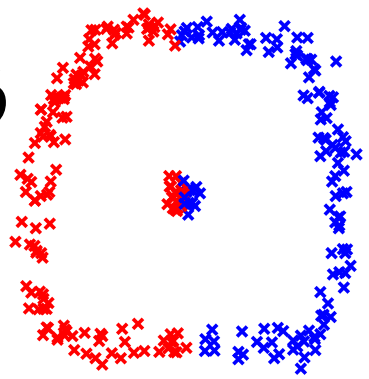
モデルに基づくクラスタリング

- 混合モデルを最尤推定やベイズ推定で学習

$$p(\boldsymbol{x}) = \sum_{y=1}^{c} p(\boldsymbol{x}|y)p(y)$$

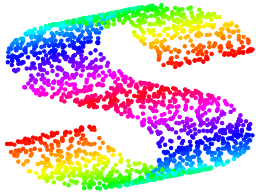
  - K平均法 (MacQueen, 1967)
  - ディリクレ過程混合法 (Ferguson, 1973)

- 利点と欠点:
  - ☺ チューニングパラメータがない
  - ☹ クラスタの形状があらかじめ定めたモデル(≒ガウシアン)で決まってしまう
  - ☹ アルゴリズムの初期化が困難

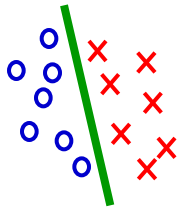


モデルなしクラスタリング

- クラスタの形状に関して仮定を置かない:
  - スペクトルクラスタリング: 非線形次元削減を行ったあとにK平均法を適用する
    (Shi & Malik, 2000; Ng *et al*., 2002)



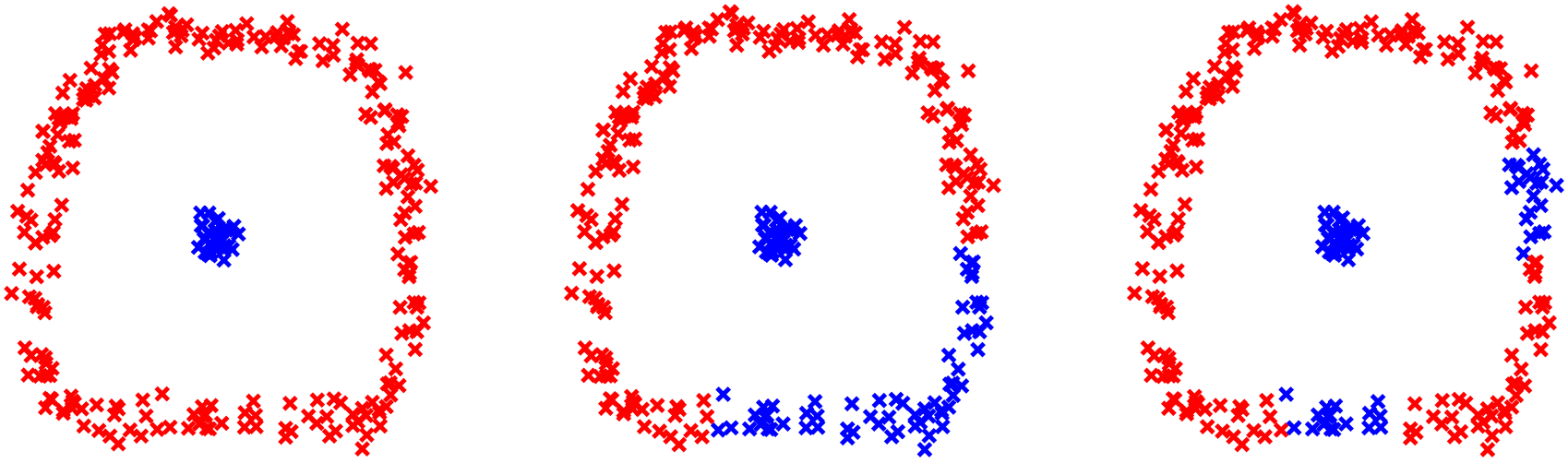
  - 識別的クラスタリング: 識別器とクラスタラベルを同時に学習する
    (Xu *et al*., 2005; Bach & Harchaoui, 2008)



  - 従属性最大化クラスタリング: 標本との従属性が最大になるようにクラスタラベルを決定する
    (Song *et al*., 2007; Faivishevsky & Goldberger, 2010)
  - 情報量最大化クラスタリング: 情報量が最大になるように識別器を学習
    (Agakov & Barberu, 2006; Gomes *et al*., 2010)

モデルなしクラスタリング

- 利点と欠点:
  - ☺ クラスタの形状が柔軟
  - ☹ カーネル・類似度のパラメータの決定が困難
  - ☹ アルゴリズムの初期化が困難



本発表の構成

1. 確率的パターン認識
2. クラスタリング
   - A) 従来法の紹介
   - B) 提案法
     - i. クラスタリング
     - ii. チューニングパラメータの自動選択
   - C) 実験

本研究の目的

- 新たな情報量最大化クラスタリング法を提案する:
  - ☺ 最適解が解析的に求められる
  - ☺ チューニングパラメータを客観的に決定できる

- 提案法の流れ:
  - 情報量を最大にするようにノンパラメトリック・カーネル分類器を学習する
  - 情報量を最大にするようにチューニングパラメータを決定する

二乗損失相互情報量（SMI）

- 情報量の尺度として，SMIを用いる：

$$\mathrm{SMI} = \frac{1}{2} \int \sum_{y=1}^{c} p(\boldsymbol{x}) p(y) \left(\frac{p(\boldsymbol{x}, y)}{p(\boldsymbol{x}) p(y)} - 1 \right)^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

  - 通常の相互情報量はカルバック・ライブラー（KL）ダイバージェンス
  - SMIはピアソン（PE）ダイバージェンス
  - KLもPEも，f-ダイバージェンスというクラスに属する（即ち，似た性質を有する）
  - 実際，通常の相互情報量と同様に，SMIは

$$\mathrm{SMI} = 0 \iff \boldsymbol{x} \perp\!\!\!\perp y$$

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
2. クラスタリング
   - A) 従来法の紹介
   - B) 提案法
     - i. クラスタリング
     - ii. チューニングパラメータの自動選択
   - C) 実験

カーネル確率的分類器

- カーネル確率的分類器:

$$p(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{y,i} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)$$

- SMIが最大になるように分類器を学習する:

$$\mathrm{SMI} = \frac{1}{2} \int \sum_{y=1}^{c} p(\boldsymbol{x}) p(y) \left(\frac{p(\boldsymbol{x}, y)}{p(\boldsymbol{x}) p(y)} - 1 \right)^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

- ただし，ラベルなしデータ $\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^{n}$ しか与えられない！

SMIの近似

- クラスタ事後確率をカーネルモデルで近似:

$$p(y|\boldsymbol{x}) \approx \sum_{i=1}^{n} \alpha_{y,i} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)$$

- 期待値を標本平均で近似:

$$\int f(\boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(\boldsymbol{x}_i)$$

$$\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^{n} \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} p(\boldsymbol{x})$$

- クラスタ事前確率は一様と仮定:

$$p(y) = 1/c$$

c: クラスタ数

- これらにより，次のSMIの推定量が得られる:

$$\widehat{\mathrm{SMI}} = \frac{c}{2n} \sum_{y=1}^{c} \boldsymbol{\alpha}_y^\top \boldsymbol{K}^2 \boldsymbol{\alpha}_y - \frac{1}{2}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_y = (\alpha_{y,1}, \ldots, \alpha_{y,n})^\top$$

$$K_{i,j} = K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$

SMI推定量の最大化

$$\max_{\{\boldsymbol{\alpha}_y\}_{y=1}^{c}} \widehat{\mathrm{SMI}}$$

$$\widehat{\mathrm{SMI}} = \frac{c}{2n}\sum_{y=1}^{c}\boldsymbol{\alpha}_y^\top \boldsymbol{K}^2\boldsymbol{\alpha}_y - \frac{1}{2}$$

- $\{\boldsymbol{\alpha}_y\}_{y=1}^{c}$ が正規直交だという仮定のもと，大域的最適解はカーネル行列 $\boldsymbol{K}$ の主成分によって与えられる
  - Cf. Ding & He (ICML2004)

SMIに基づくクラスタリング(SMIC)

- 事後処理:
  - 主成分 $\{\boldsymbol{\phi}_y\}_{y=1}^{c}$ の符号を定める:

$$\widetilde{\boldsymbol{\phi}}_y = \boldsymbol{\phi}_y \times \mathrm{sign}(\boldsymbol{\phi}_y^\top \mathbf{1})$$

$\mathbf{1}$:要素が全て1のベクトル

  - $p(y) = 1/c$ に基づいて正規化
  - 負の出力をゼロに切り上げる
- 最終的な解(解析的に計算可能):

$$y_i = \underset{y}{\mathrm{argmax}} \frac{[\max(\mathbf{0}, \widetilde{\boldsymbol{\phi}}_y)]_i}{\max(\mathbf{0}, \widetilde{\boldsymbol{\phi}}_y)^\top \mathbf{1}}$$

$[\cdot]_i$:ベクトルの第i要素

$\mathbf{0}$:要素が全て0のベクトル

本発表の構成

1. 確率的パターン認識
2. クラスタリング
   - A) 従来法の紹介
   - B) 提案法
     - i. クラスタリング
     - ii. チューニングパラメータの自動選択
   - C) 実験

チューニングパラメータの決定

- SMICの解はカーネル関数に依存する
- SMIを最大にするようにカーネルを決める
- クラスタリングに用いた $\widehat{\mathrm{SMI}}$ を使えば良い？

$$\widehat{\mathrm{SMI}} = \frac{c}{2n} \sum_{y=1}^{c} \boldsymbol{\alpha}_y^\top \boldsymbol{K}^2 \boldsymbol{\alpha}_y - \frac{1}{2}$$

- しかし，$\widehat{\mathrm{SMI}}$ はSMIの教師なし推定量のため，精度が良くない
- チューニングパラメータの決定の段階ではクラスタラベルの推定値が得られているため，SMIの教師付き推定が可能！

SMIの教師付き推定

$$\mathrm{SMI} = \frac{1}{2}\int \sum_{y=1}^{c} p(\boldsymbol{x})p(y)\left(\frac{p(\boldsymbol{x},y)}{p(\boldsymbol{x})p(y)} - 1\right)^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

■最小二乗相互情報量（LSMI）:

- 密度比を直接推定する

Suzuki & Sugiyama (AISTATS2010)

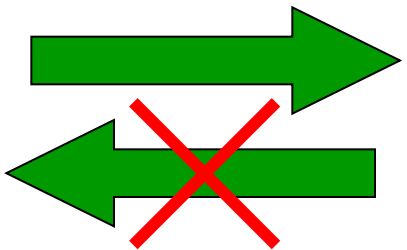
$$r(\boldsymbol{x},y) = \frac{p(\boldsymbol{x},y)}{p(\boldsymbol{x})p(y)}$$

※各確率密度は推定しない

- 密度比推定は密度推定よりも優しい（Vapnikの原理）

各密度がわかる

$$p(\boldsymbol{x},y), p(\boldsymbol{x}), p(y)$$



密度比がわかる

$$r(\boldsymbol{x},y) = \frac{p(\boldsymbol{x},y)}{p(\boldsymbol{x})p(y)}$$

密度比の直接推定

■ カーネル密度比モデル:

$$\widehat{r}(\boldsymbol{x}, y) = \sum_{\ell: y_\ell = y} \theta_\ell L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_\ell)$$

$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$:カーネル関数

（実験ではガウスカーネルを用いる）

■ 最小二乗推定:

$$\frac{1}{2} \int \sum_{y=1}^{c} \left(\widehat{r}(\boldsymbol{x}, y) - r(\boldsymbol{x}, y) \right)^2 p(\boldsymbol{x}) p(y) d\boldsymbol{x}$$

$$r(\boldsymbol{x}, y) = \frac{p(\boldsymbol{x}, y)}{p(\boldsymbol{x}) p(y)}$$

密度比の直接推定

- 期待値を標本平均で近似し，正則化する:

$$\min_{\boldsymbol{\theta}_y}\left[\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}_y^\top\widehat{\boldsymbol{H}}^{(y)}\boldsymbol{\theta}_y-\boldsymbol{\theta}_y^\top\widehat{\boldsymbol{h}}^{(y)}+\frac{\delta}{2}\boldsymbol{\theta}_y^\top\boldsymbol{\theta}_y\right]$$

$$\widehat{H}_{\ell,\ell'}^{(y)}=\frac{n_y}{n^2}\sum_{i=1}^{n}L(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_\ell^{(y)})L(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_{\ell'}^{(y)})\qquad\widehat{h}_\ell^{(y)}=\frac{1}{n}\sum_{i:y_i=y}L(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_\ell^{(y)})$$

- 大域的最適解が解析的に計算できる:

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(y)}=(\widehat{\boldsymbol{H}}^{(y)}+\delta\boldsymbol{I})^{-1}\widehat{\boldsymbol{h}}^{(y)}$$

$$\widehat{r}(\boldsymbol{x},y)=\sum_{\ell=1}^{n_y}\widehat{\theta}_\ell^{(y)}L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_\ell^{(y)})$$

- カーネル関数と正則化パラメータはクロスバリデーションで決定できる

最小二乗相互情報量(LSMI)

- SMIの推定量が解析的に計算できる:

$$\mathrm{LSMI} = -\frac{1}{2n^2}\sum_{i,j=1}^{n}\widehat{r}(\boldsymbol{x}_i, y_j)^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widehat{r}(\boldsymbol{x}_i, y_i) - \frac{1}{2}$$

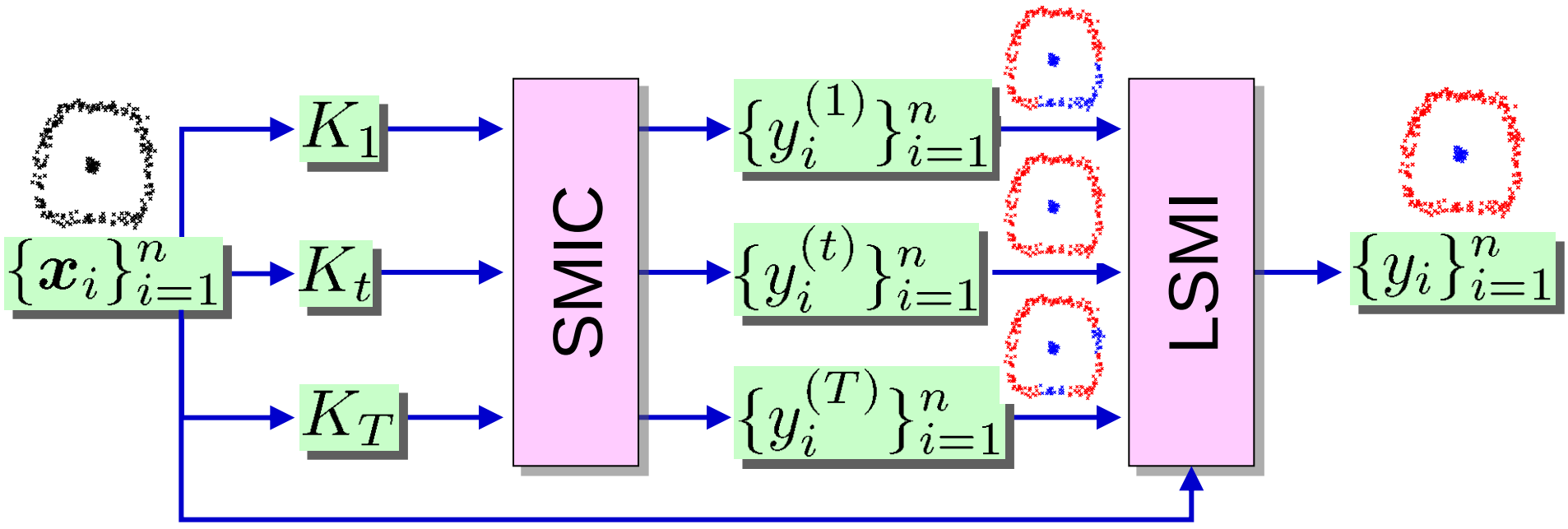
- LSMIは優れた理論的収束特性を有する！

Suzuki & Sugiyama (AISTATS2010)

- LSMIを最大にするように，SMICのカーネル関数を決定する

提案法のまとめ

- SMIクラスタリング＋LSMIによるモデル選択:
  - 入力: ラベルなし標本 $\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n$
    カーネルの候補 $\{K_t(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\}_{t=1}^T$
  - 出力: クラスタラベル $\{y_i\}_{i=1}^n$



本発表の構成

1. 確率的パターン認識
2. クラスタリング
   - A) 従来法の紹介
   - B) 提案法
     - i. クラスタリング
     - ii. チューニングパラメータの自動選択
   - C) 実験

実験設定

- 局所スケールカーネルのスパース版を用いる

(Zelnik-Manor & Perona, NIPS2004)

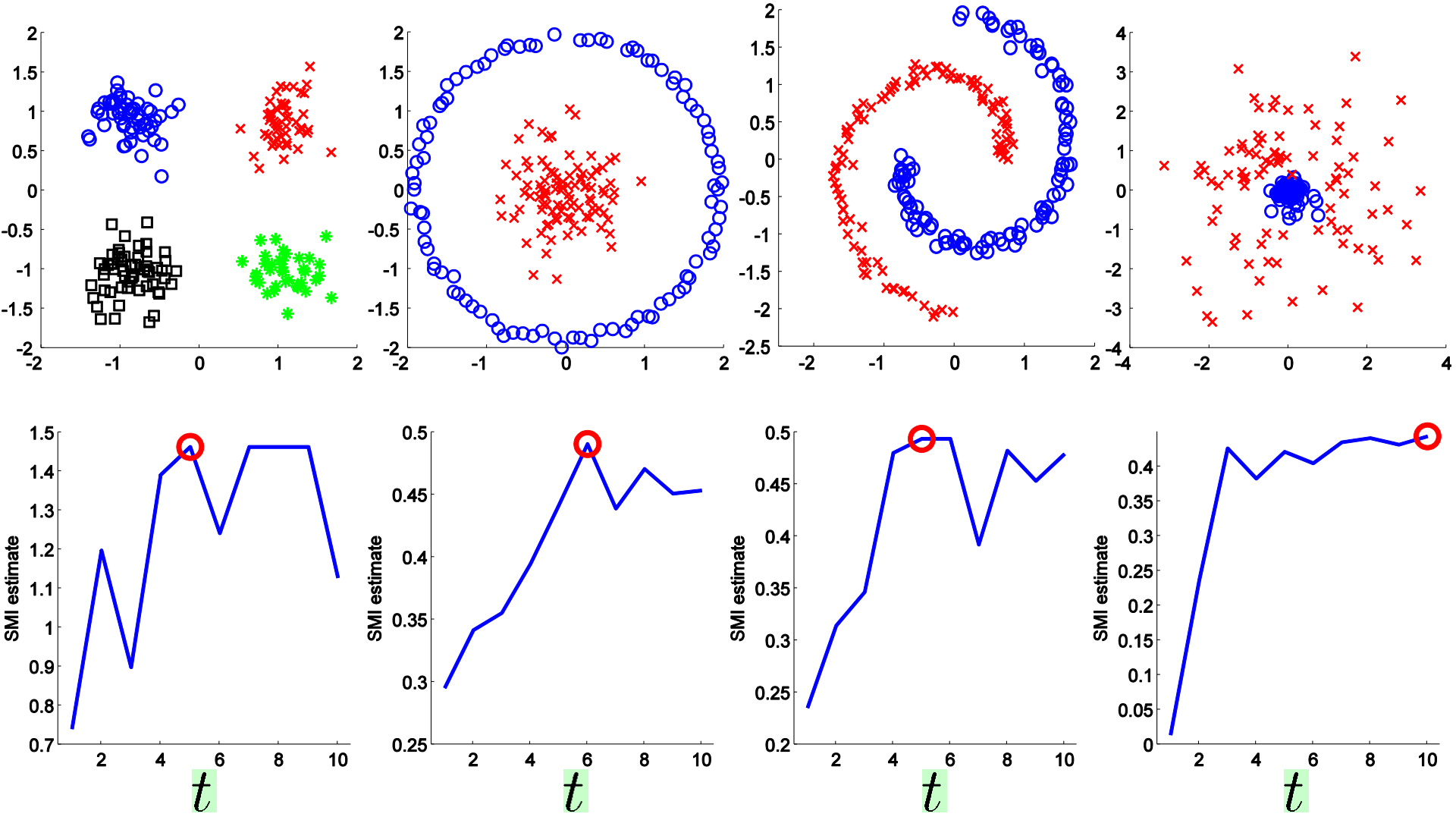
$$K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2}{2\sigma_i \sigma_j}\right) & \text{if } \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j \text{ are } t \text{ neighbors} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$\sigma_i = \|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_i^{(t)}\|$

$\boldsymbol{x}_i^{(t)}$: t-th neighbor of $\boldsymbol{x}_i$

- チューニングパラメータ t は，LSMIを最大にするように決定する

SMICの実行例



- 提案法により自然なクラスタリング結果が得られた

性能比較

- KM：K平均法 (MacQueen, 1967)
- SC：自動調整スペクトルクラスタリング (Zelnik-Manor & Perona, NIPS2004)
- MNN：平均最近傍近似に基づく従属性最大化クラスタリング (Faivishevsky & Goldberger, ICML2010)
- MIC：ロジスティックモデルを用いた情報量最大化クラスタリング＋最尤相互情報量に基づくモデル選択 (Gomes, Krause & Perona, NIPS2010) (Suzuki, Sugiyama, Sese & Kanamori, FSDM2008)

実験結果

Digit ($d = 256, n = 5000,$ and $c = 10$)

	KM	SC	MNN	MIC	SMIC
ARI	0.42(0.01)	0.24(0.02)	0.44(0.03)	**0.63(0.08)**	**0.63(0.05)**
Time	835.9	973.3	318.5	84.4[3631.7]	14.4[359.5]

Face ($d = 4096, n = 100,$ and $c = 10$)

	KM	SC	MNN	MIC	SMIC
ARI	0.60(0.11)	**0.62(0.11)**	0.47(0.10)	**0.64(0.12)**	**0.65(0.11)**
Time	93.3	2.1	1.0	1.4[30.8]	0.0[19.3]

20News Group

Document ($d = 50, n = 700,$ and $c = 7$)

	KM	SC	MNN	MIC	SMIC
ARI	0.00(0.00)	0.09(0.02)	0.09(0.02)	0.01(0.02)	**0.19(0.03)**
Time	77.8	9.7	6.4	3.4[530.5]	0.3[115.3]

Sens eval2

Word ($d = 50, n = 300,$ and $c = 3$)

	KM	SC	MNN	MIC	SMIC
ARI	0.04(0.05)	0.02(0.01)	0.02(0.02)	0.04(0.04)	**0.08(0.05)**
Time	6.5	5.9	2.2	1.0[369.6]	0.2[203.9]

Accelerometry ($d = 5, n = 300,$ and $c = 3$)

	KM	SC	MNN	MIC	SMIC
ARI	0.49(0.04)	0.58(0.14)	**0.71(0.05)**	0.57(0.23)	**0.68(0.12)**
Time	0.4	3.3	1.9	0.8[410.6]	0.2[92.6]

Speech ($d = 50, n = 400,$ and $c = 2$)

	KM	SC	MNN	MIC	SMIC
ARI	0.00(0.00)	0.00(0.00)	0.04(0.15)	**0.18(0.16)**	**0.21(0.25)**
Time	0.9	4.2	1.8	0.7[413.4]	0.3[179.7]

- Adjusted Rand index (ARI): 大きい方が良い
- 赤：1%のt検定で最適か最適タイ
- SMICは精度が良く，計算速度も速い！

クラスタリングのまとめ

- 従来のクラスタリング法の欠点：
  - アルゴリズムの初期化が困難
  - チューニングパラメータの初期化が困難
- SMIC：二乗損失相互情報量（SMI）に基づく新たな情報量最大化クラスタリング法
  - 大域的最適解が解析的に求められる
  - チューニングパラメータを客観的に決定できる

http://sugiyama-www.cs.titech.ac.jp/~sugi/software/SMIC/