パターン認識

Pattern Recognition

Toru Wakahara

授業のテーマと到達目標

コンピュータによるパターン認識の基礎となる，統計的パターン認識の考え方とその適用法を学ぶことをテーマとし，

① 統計的パターン認識の生成モデルと識別モデルの主要技法を理解し，特長を説明できる。

② 手書き数字認識を例題に簡単な認識系を実装して，認識手法の具体的適用法を習得する。

を到達目標とする。

授業の概要

1. まず，ベイズの定理と最小誤り確率に基づく統計的パターン認識の考え方を導入する。
2. 次に，生成モデルに基づくアプローチを説明し，中心的課題である確率密度関数の代表的な推定法を紹介する。
3. さらに，識別モデルに基づくアプローチを説明し，線形識別関数法から入り，より柔軟性のある多層パーセプトロンを紹介する。
4. 授業後半では，手書き数字認識を取り上げ，簡単な認識系を実装して認識実験を行う。

授業計画

	内容
第1回	数学的基礎 --- 確率・統計および線形代数の復習
第2回	統計的パターン認識の考え方 --- クラスと特徴の結合確率，ベイズの定理と事後確率
第3回	ベイズ決定理論 --- 誤り確率最小化，最適な決定境界，生成モデルと識別モデル
第4回	確率密度関数の推定（１） --- パラメトリックな方法としてのガウスモデルと最尤法
第5回	確率密度関数の推定（２） --- ノンパラメトリックな方法としてのカーネル法
第6回	線形識別関数 --- 識別モデルに基づく識別関数法と線形識別関数による分類
第7回	多層パーセプトロン（１） --- sigmoidalユニットを持つ多層パーセプトロンの写像能力
第8回	多層パーセプトロン（２） --- 多層パーセプトロンの学習法としての誤差逆伝播法
第9回	手書き数字認識（１） --- 画像データの取得，前処理
第10回	手書き数字認識（２） --- 特徴抽出
第11回	手書き数字認識（３） --- 最近傍平均分類法の実装
第12回	手書き数字認識（４） --- k-NN分類法の実装
第13回	手書き数字認識（５） --- 認識実験と性能評価・分析
第14回	手書き数字認識（６） --- 最終レポート作成
第15回	まとめ --- 学習到達度の総合的な確認ー期末試験

参考書:

[1] 石井健一郎, 上田修功, 前田英作, 村瀬洋著:
「わかりやすいパターン認識」, オーム社, 1998年.

[2] C. M. Bishop: "*Neural Networks for Pattern Recognition*," Oxford University Press, 1995.

[3] 杉山将著:「統計的機械学習ー生成モデルに基づくパターン認識」, オーム社, 2009年.

[4] 金谷健一著:「これなら分かる応用数学教室
ー最小二乗法からウェーブレットまでー」,
共立出版, 2003年.

講義ノート: 授業支援システムの教材にupload
patrec_1.pdf, …

講義の進め方:

１. パターン認識の理論的基礎を理解する

→ 計算問題を解く

２. 手書き数字認識を例題に，簡単な認識系を実装する

→ プログラミング能力が大切

３. 質問時間を十分に取る

評価方法:

出席点 20点　　宿題点 40点

期末試験 40点

第１回講義「パターン認識」

数学的基礎

[A.1] 線形代数

[A.2] 確率論

A.1　線形代数

A.1.1 記号と予備知識

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (x_1 \ \ x_2 \ \ \cdots \ \ x_d)$$

ベクトルと行列の定義は基本中の基本

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & \cdots & m_{1d} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & \cdots & m_{2d} \\ & & \cdots & & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{nd} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{M}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{21} & \cdots & m_{n1} \\ m_{12} & m_{22} & \cdots & m_{n2} \\ m_{13} & m_{23} & \cdots & m_{n3} \\ & \cdots & & \\ m_{1d} & m_{2d} & \cdots & m_{nd} \end{pmatrix}$$

- 非負行列　$m_{ij} \geq 0, \forall i, j$

- $(d \times d)$正方行列　　$\boldsymbol{I} = \left(\delta_{ij}\right)$:単位行列

  $m_{ij} = m_{ji}$:対称行列　　$m_{ij} = -m_{ji}$:反対称行列

- 行列とベクトルの積:　$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & \cdots & m_{1d} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & \cdots & m_{2d} \\ & & \cdots & & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{nd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

行列とベクトルの積も基本中の基本

$$y_i = \sum_{j=1}^{d} m_{ij} x_j \quad (1 \leq i \leq n)$$

A.1.2 内積

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{d} x_i y_i = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$$

$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}, (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ とも記す

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}$$

: ユークリッドノルム

内積はしっかり
覚えること

2つのd次元ベクトルのなす角θ

$$\cos\theta = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|}$$

$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 0$: 直交

$|\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}| = \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$: 平行

$|\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}| \leq \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$: Cauchy-Schwarz の不等式

この不等式は有用

A.1.3 外積

$$
\boldsymbol{M} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & \cdots & x_1 y_n \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & \cdots & x_2 y_n \\ & \cdots & & \\ x_d y_1 & x_d y_2 & \cdots & x_d y_n \end{pmatrix}
$$

A.1.4 線形独立

ベクトルの集合があり，どのベクトルも他のベクトルの線形結合として表せない場合に線形独立と呼ぶ．
d 個の線形独立なベクトルは d 次元のベクトル空間を張り，その空間内の任意のベクトルはそれら d 個のベクトルの線形結合で表すことができる．

A.1.5 行列の微分

・スカラー関数の微分

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathrm{grad}\, f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_d} \end{pmatrix}$$

∇はナブラと読む

・行列 $\boldsymbol{M}$ と $\boldsymbol{y}$ が $\boldsymbol{x}$ に独立であるとき

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}[\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}] = \boldsymbol{M} \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}[\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}] = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}] = \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}] = [\boldsymbol{M} + \boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}]\boldsymbol{x}$$

A.1.6 行列式とトレース

・$(d \times d)$正方行列の行列式はスカラー：$|\boldsymbol{M}|$

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccccc} & & & j & & \end{array} \\
i & \begin{pmatrix}
m_{11} & m_{12} & \cdots & \otimes & \cdots & m_{1d} \\
m_{21} & m_{22} & \cdots & \otimes & \cdots & m_{2d} \\
 & & & \otimes & & \\
 & & & \otimes & & \\
\otimes & \otimes & \cdots & \otimes & \cdots & \otimes \\
 & & & \otimes & & \\
m_{d1} & m_{d2} & \cdots & \otimes & \cdots & m_{dd}
\end{pmatrix}
\end{array}
= \boldsymbol{M}_{i|j}
$$

$\boldsymbol{M}$ の第 i 行と第 j 列を取り除いた行列

・ $|\boldsymbol{M}|$ は再帰的に次式で計算できる.

$$|\boldsymbol{M}| = m_{11}\left|\boldsymbol{M}_{1|1}\right| - m_{21}\left|\boldsymbol{M}_{2|1}\right| + m_{31}\left|\boldsymbol{M}_{3|1}\right| - \cdots \pm m_{d1}\left|\boldsymbol{M}_{d|1}\right|$$

$$d = 1 \qquad |\boldsymbol{M}| = m_{11}$$

$$d = 2 \qquad |\boldsymbol{M}| = m_{11}m_{22} - m_{21}\,m_{12}$$

・ 性質 $\quad |\boldsymbol{M}| = \left|\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\right| \qquad |\boldsymbol{M}\boldsymbol{N}| = |\boldsymbol{M}||\boldsymbol{N}|$

$\boldsymbol{M}$ の列ベクトルが線形独立でない $\rightarrow$ $|\boldsymbol{M}| = 0$

・トレース

$$\mathrm{tr}[\boldsymbol{M}] = \sum_{i=1}^{d} m_{ii}$$

$|\boldsymbol{M}|$ および $\mathrm{tr}[\boldsymbol{M}]$ は座標軸の回転に関して不変である.

A.1.7 逆行列

・行列式が0でなければ逆行列 $\boldsymbol{M}^{-1}$ が存在する.

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{-1} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{I}$$

逆行列の定義は重要

$$\boldsymbol{M}^{-1} = \frac{\widetilde{\boldsymbol{M}}}{|\boldsymbol{M}|}$$

$\widetilde{\boldsymbol{M}}$：$\boldsymbol{M}$ の随伴行列

$$\widetilde{m}_{ij} = (-1)^{i+j}\left|\boldsymbol{M}_{j|i}\right|$$

・$\boldsymbol{M}$ が正方でないときは，次式の擬似逆行列$\boldsymbol{M}^{+}$を用いる.

$$\boldsymbol{M}^{+}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{I} \qquad \boldsymbol{M}^{+} = [\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}]^{-1}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}$$

A.1.8 固有ベクトルと固有値

- $(d \times d)$正方行列 $\boldsymbol{M}$ に対して次の $\boldsymbol{x}$ に関する1次方程式を解く.

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x} \quad \rightarrow \quad (\boldsymbol{M} - \lambda\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

$$|\boldsymbol{M} - \lambda\boldsymbol{I}| = \lambda^d + a_1\lambda^{d-1} + \cdots + a_{d-1}\lambda + a_d = 0$$

- 実対称行列の固有値 $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_d\}$ はすべて実数であり,
対応する固有ベクトル $\{\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_d\}$ も実数ベクトルとなる.

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{e}_j = \lambda_j\boldsymbol{e}_j, \quad \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_d$$

$$\mathrm{tr}[\boldsymbol{M}] = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i \qquad |\boldsymbol{M}| = \prod_{i=1}^{d} \lambda_i$$

固有値, 固有ベクトル
の意味を理解する

A.2　確率論

A.2.1　離散的確率変数

$$x \in X = \{v_1, v_2, \ldots, v_m\}$$

$$p_i = \Pr[x = v_i] \quad (i = 1, \ldots, m)$$

$$p_i \geq 0 \quad and \quad \sum_{i=1}^{m} p_i = 1$$

・確率の集合 $\{p_1, p_2, \ldots, p_m\}$ は確率質量関数 $P(x)$ を使って書くとわかり易い.

$$P(x) \geq 0 \quad and \quad \sum_{x \in X} P(x) = 1$$

A.2.2 期待値

- 確率変数 x の期待値（平均値）:

$$E[x] = \mu = \sum_{x \in X} x P(x) = \sum_{i=1}^{m} v_i p_i$$

期待値の操作 $E[\ ]$ の意味を理解すること

一般に $E[f(x)] = \sum_{x \in X} f(x) P(x)$

E は線形演算子であることに注意

- 確率変数 x の分散

平均値と分散の定義は暗記すること

$$\mathrm{Var}[x] = \sigma^2 = E[(x-\mu)^2] = \sum_{x \in X} (x-\mu)^2 P(x)$$

一般に $\mathrm{Var}[f(x)] = \sum_{x \in X} (f(x) - E[f(x)])^2 P(x)$

A.2.3 離散的確率変数の対

$$x \in X = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}, \qquad y \in Y = \{w_1, w_2, \dots, w_n\}$$

$$P(x, y) \geq 0 \quad and \quad \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} P(x, y) = 1$$

・結合確率質量関数 $P(x, y)$ の周辺分布

$$P_x(x) = \sum_{y \in Y} P(x, y), \qquad P_y(y) = \sum_{x \in X} P(x, y)$$

・統計的独立性

$$P(x, y) = P_x(x) P_y(y)$$

A.2.4 2変量関数の期待値

$$E[f(x,y)] = \sum_{x\in X}\sum_{y\in Y} f(x,y)P(x,y)$$

$$\mu_x = E[x] = \sum_{x\in X}\sum_{y\in Y} xP(x,y) = \sum_{x\in X} xP_x(x)$$

$$\mu_y = E[y] = \sum_{x\in X}\sum_{y\in Y} yP(x,y) = \sum_{y\in Y} yP_y(y)$$

$$\sigma_x^2 = \mathrm{Var}[x] = E[(x-\mu_x)^2] = \sum_{x\in X}(x-\mu_x)^2 P_x(x)$$

$$\sigma_y^2 = \mathrm{Var}[y] = E\left[\left(y-\mu_y\right)^2\right] = \sum_{y\in Y}\left(y-\mu_y\right)^2 P_y(y)$$

- 相互モーメント

$$\sigma_{xy} = E\left[(x-\mu_x)\left(y-\mu_y\right)\right]$$

$$= \sum_{x\in X}\sum_{y\in Y}(x-\mu_x)\left(y-\mu_y\right)P(x,y)$$

- $\lambda x + y$ （λ: 実数）の分散が負にならないことから
  次の不等式が導き出される.

$$\sigma_{xy}^2 \le \sigma_x^2\,\sigma_y^2 \qquad\qquad (1)$$

- 相関係数

$$\rho = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x\sigma_y}, \qquad -1 \le \rho \le 1$$

$\rho = 1$: 最大の正相関
$\rho = 0$: 無相関
$\rho = -1$: 最大の負相関

A.2.5 総確率の法則とベイズ則

事象 A が相互に排他的な子事象 $\{A_i\}$ に分けられたとすると A の起こる確率は子事象 A_i の起こる確率の総和となる.

$$P(A) = \sum_i P(A_i)$$:総確率の法則

したがって

$$P(y) = \sum_{x \in X} P(x, y), \qquad P(x) = \sum_{y \in Y} P(x, y) \tag{2}$$

一方, 条件付き確率の定義より

$$P(x, y) = P(y|x)P(x) = P(x|y)P(y) \tag{3}$$

条件付き確率の定義は覚えること

式(2)と式(3)を組み合わせると次式が得られる.

$$P(x|y) = \frac{P(y|x)P(x)}{\sum_{x' \in X} P(y|x')P(x')}$$:ベイズ則

ベイズ則は覚えること

ベイズ則の意義:

x を原因, y を結果と考える. 結果 y を知って原因 x を推定する際の条件付き確率 $P(x|y)$ を計算する手段を与えている.

すなわち, 比較的求めやすい

[1] y を観測する前の x の事前確率 $P(x)$, および

[2] x という原因があるときの y という結果の起こる条件付き確率 $P(y|x)$

を用いることにより, 事後確率 $P(x|y)$ が算出可能となる.

A.2.6 ベクトル確率変数

・d 次元ベクトルの確率変数 $\boldsymbol{x}$ を扱う.

$$\boldsymbol{\mu} = E[\boldsymbol{x}] = \sum_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{x} P(\boldsymbol{x})$$:平均ベクトル

$$\Sigma = E[(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}]$$:共分散行列

Σ は対称行列で, 任意の d 次元ベクトル $\boldsymbol{w}$ に対して

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \Sigma \boldsymbol{w} = E\left[\left((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w}\right)^2\right] \geq 0$$

を満たすことより, 半正定値の行列である. これより,
共分散行列 Σ の固有値はすべて非負であることが示される.

A.2.7 連続な確率変数と正規分布

- 確率質量関数 $P(x)$ の代わりに確率密度関数 $p(x)$ を考える.

$$\Pr[x \in (a,b)] = \int_a^b p(x)dx$$

- 正規分布 $N(\mu,\sigma^2)$

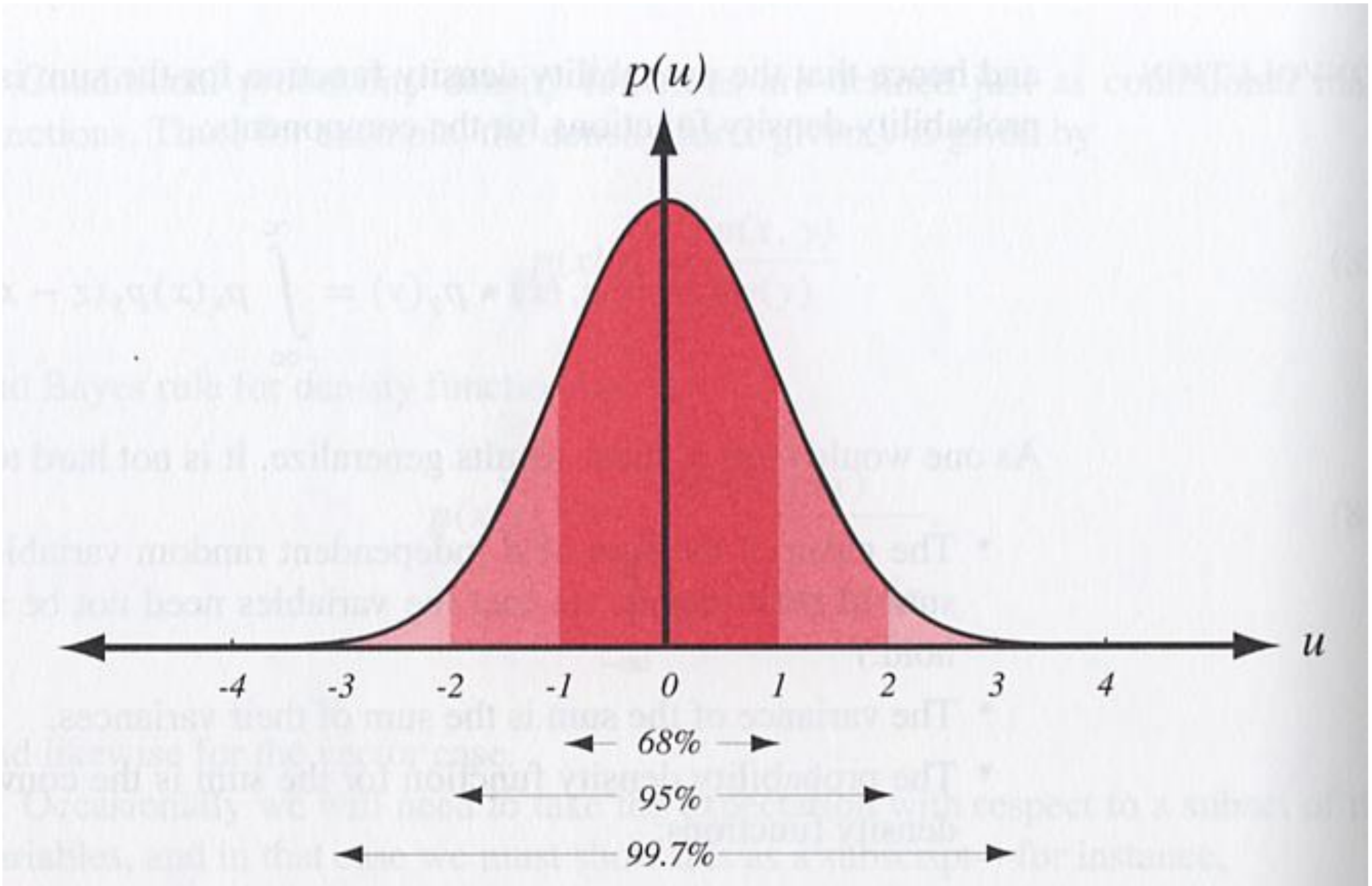
$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

1次元正規分布の式は暗記すること

$$E[1] = \int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1 \qquad E[x] = \int_{-\infty}^{\infty} xp(x)dx = \mu$$

$$E[(x-\mu)^2] = \int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2 p(x)dx = \sigma^2$$

1次元正規分布 $p(u) \sim N(0,1)$



$|u| \leq 1$の範囲に68%が，$|u| \leq 2$の範囲には95%,
$|u| \leq 3$の範囲には 99.7 % の確率質量が存在する.

練習問題1

2つの箱がある．第1の箱には，リンゴが7個，オレンジが5個入っている．第2の箱には，リンゴが6個，オレンジが9個入っている．このとき，第1の箱を確率1/3，第2の箱を確率2/3で選択して，中から果物を1つ取り出すものとする．

今，箱を選んで果物を取り出したら，リンゴであった．選んだ箱が第1の箱である確率を計算しなさい．

ヒント：ベイズ則を用いなさい．原因 x が箱の選択，結果 y が取り出した果物の種類，に対応するとして，$P(x|y)$，すなわち，$P(\text{第1の箱}|\text{リンゴ})$ を計算しなさい．

課題の提出要領

【提出方法】

・A4用紙に手書きもしくはMS Wordで作成

・複数枚の場合はホッチキス止め

・第１頁の冒頭に

パターン認識　第○回課題レポート

提出年月日　2016年△月□日

学籍番号　　氏名

を必ず記す

【提出期限】

・次回講義の冒頭，遅刻は認めず