情報認識
「ガウス混合モデル」

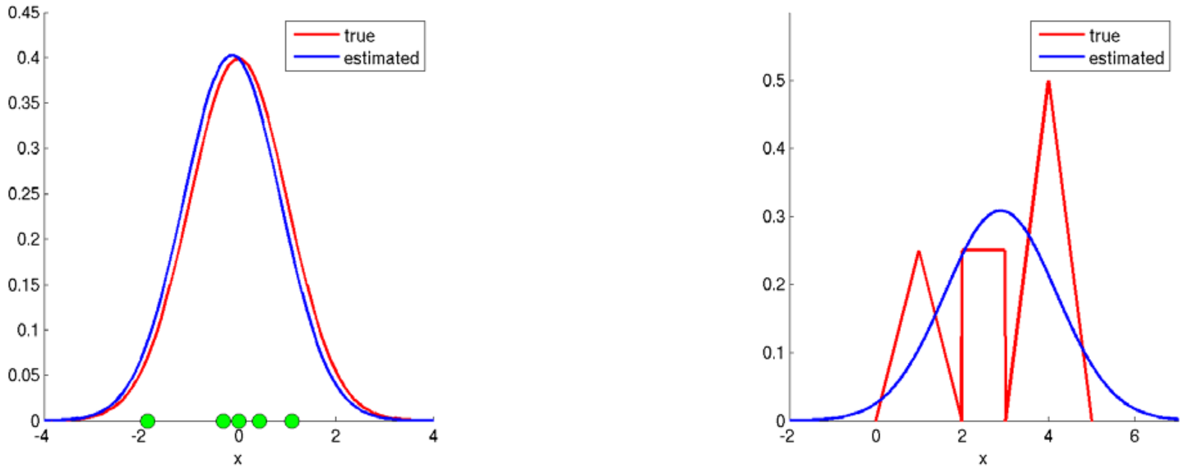
- 担当教員：　杉山　将（計算工学専攻）
- 居室：　W8E-505
- 電子メール:　　sugi@cs.titech.ac.jp

モデルの表現力

■ガウスモデル＋最尤推定:

- モデルが(大体)正しい場合，訓練標本数が比較的少なくても推定精度が良い
- モデルが単純なため，表現できる確率密度関数の形が限られる

$$q(x;\mu,\Sigma)=\frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma|^{1/2}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right)$$



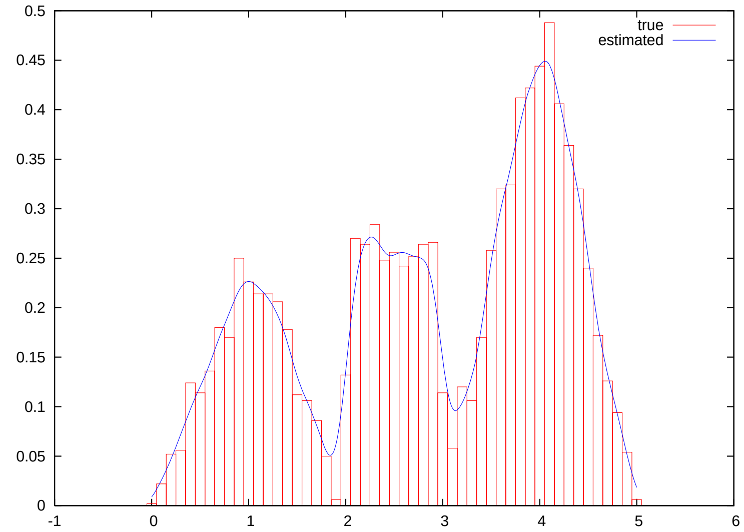
モデルの表現力(続き)

■ガウス核密度推定:

- 任意の確率密度関数を近似できる
- 精度良く近似するためには多数の訓練標本が必要

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

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



ガウス混合モデル

- ガウス混合モデル(Gaussian mixture model):

$$q(x;\theta) = \sum_{j=1}^{m} w_j \phi(x;\mu_j,\sigma_j)$$

$$w_j \geq 0, \sum_{j=1}^{m} w_j = 1$$

$$\theta = \{w_j, \mu_j, \sigma_j\}_{j=1}^{m}$$

$$\mu_j \in \Re^d, \sigma_j > 0$$

$$\phi(x;\mu,\sigma) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^T(x-\mu)}{2\sigma^2} \right)$$

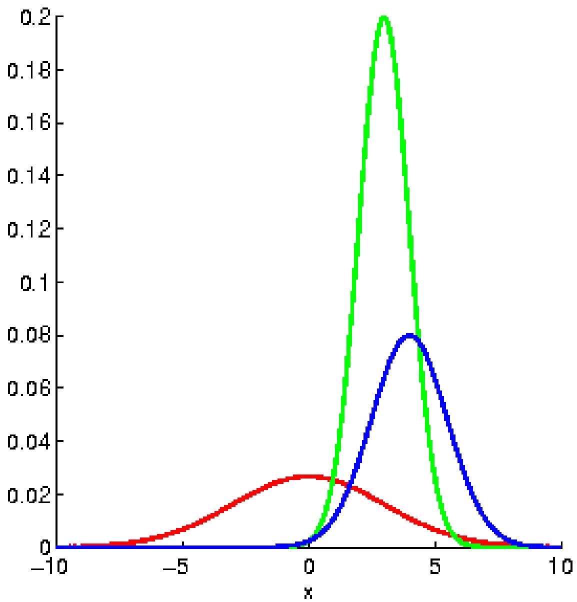
- 注意: $q(x;\theta)$ は確率密度関数なので

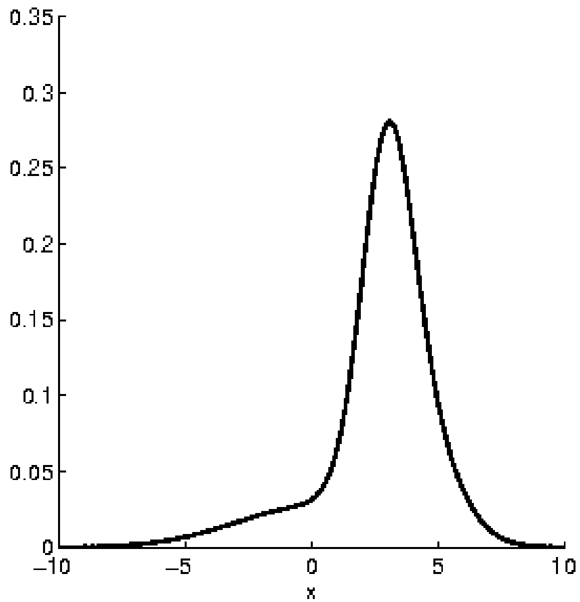
$$\int_D q(x;\theta)dx = 1 \quad \forall x \in D, q(x;\theta) \geq 0$$

を満たす.

ガウス混合モデル

- 有限個のガウスモデルの線形結合：





- 通常のガウスモデルよりも複雑な確率密度関数を表現できる.
- ガウス核密度推定より単純なので，訓練標本が比較的少ない場合でも推定精度が良い.

ガウス混合モデルの最尤推定

- 最尤推定：(対数)尤度(訓練標本 $\{x_i\}_{i=1}^n$ が生成される確率)を最大にするように θ を定める

$$\log L(\theta) = \sum_{i=1}^n \log \sum_{j=1}^m q(x_i;\theta) = \sum_{i=1}^n \log \sum_{j=1}^m w_j \phi(x_i;\mu_j,\sigma_j)$$

- 但し，拘束条件 $w_j \geq 0, \sum_{j=1}^m w_j = 1$ を考慮しなければならない！

- $w_j = \dfrac{\exp(\gamma_j)}{\sum_{j'=1}^m \exp(\gamma_{j'})}$ とおき，$\gamma_j \in \Re$ を決定する

ことにすれば，拘束条件は自動的に満たされる．

尤度方程式

- 最尤推定解の必要条件:

$$\frac{\partial \log L}{\partial \gamma_j}=0,\quad \frac{\partial \log L}{\partial \mu_j}=0,\quad \frac{\partial \log L}{\partial \sigma_j}=0$$

より，最尤推定解は以下を満たす（証明は宿題）

$$\hat{w}_j=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}$$

$$\hat{\sigma}_j=\sqrt{\frac{1}{d}\frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}(x_i-\hat{\mu}_j)^T(x_i-\hat{\mu}_j)}{\sum_{i'=1}^{n}\hat{\eta}_{i',j}}}$$

$$\hat{\mu}_j=\frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}x_i}{\sum_{i'=1}^{n}\hat{\eta}_{i',j}}$$

$$\hat{\eta}_{i,j}=\frac{\hat{w}_j\phi(x_i;\hat{\mu}_j,\hat{\sigma}_j)}{\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'},\hat{\sigma}_{j'})}$$

$d:x$の次元

- しかし，この連立方程式は簡単に解けない．

EMアルゴリズム(expectation-maximization algorithm)

- 適当な初期値から開始($t=0$): $\left\{\hat{w}_j^{(t)}, \hat{\mu}_j^{(t)}, \hat{\sigma}_j^{(t)}\right\}_{j=1}^{m}$
- Eステップ: $\left\{\hat{w}_j^{(t)}, \hat{\mu}_j^{(t)}, \hat{\sigma}_j^{(t)}\right\}_{j=1}^{m}$ から $\left\{\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}\right\}_{i=1,j=1}^{n,m}$ を計算

$$\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} = \frac{\hat{w}_j^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_j^{(t)},\hat{\sigma}_j^{(t)})}{\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'}^{(t)},\hat{\sigma}_{j'}^{(t)})}$$

- Mステップ: $\left\{\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}\right\}_{i=1,j=1}^{n,m}$ から $\left\{\hat{w}_j^{(t+1)}, \hat{\mu}_j^{(t+1)}, \hat{\sigma}_j^{(t+1)}\right\}_{j=1}^{m}$ を計算

$$\hat{w}_j^{(t+1)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}$$

$$\hat{\mu}_j^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}x_i}{\sum_{i'=1}^{n}\hat{\eta}_{i',j}^{(t)}}$$

$$\hat{\sigma}_j^{(t+1)} = \sqrt{\frac{1}{d}\frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}(x_i-\hat{\mu}_j^{(t)})^T(x_i-\hat{\mu}_j^{(t)})}{\sum_{i'=1}^{n}\hat{\eta}_{i',j}^{(t)}}}$$

- $t=t+1$ し，収束するまでE,Mステップを繰り返す．

EMアルゴリズムの解釈

■EMアルゴリズムによって尤度は単調非減少

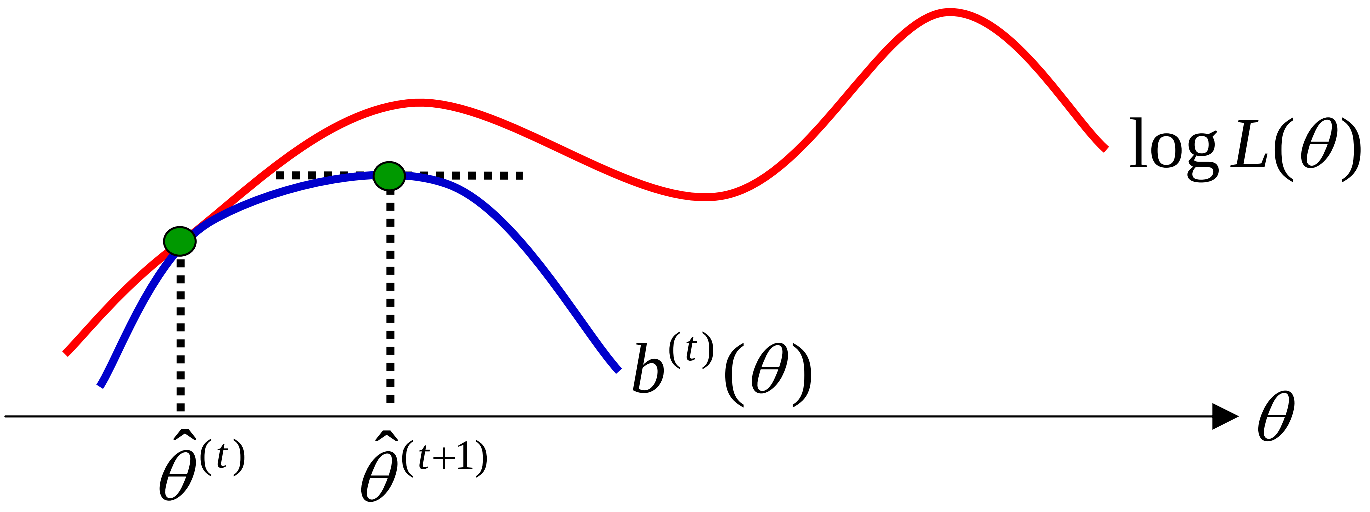
- Eステップ: $\hat{\theta}^{(t)}$を通る対数尤度の下界を求めること に対応

$$\forall \theta, \quad \log L(\theta) \geq b^{(t)}(\theta)$$

$$\log L(\hat{\theta}^{(t)}) = b^{(t)}(\hat{\theta}^{(t)})$$

- Mステップ: 下界を最大化するパラメータ値を求める ことに対応

$$\hat{\theta}^{(t+1)} = \arg\max_{\theta} b^{(t)}(\theta)$$

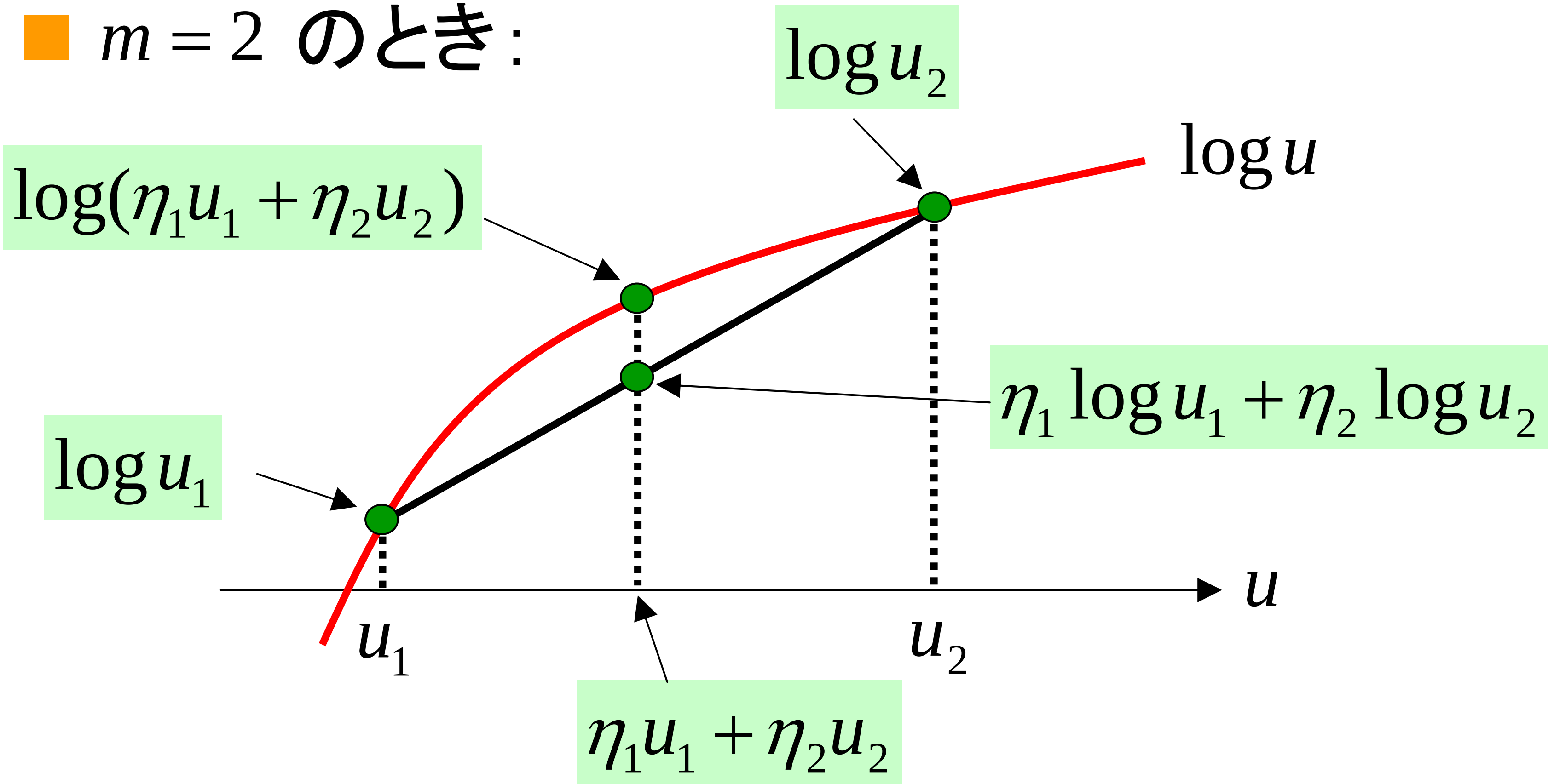


Eステップの導出

- ジェンセンの不等式(Jensen's inequality):

$$\log \sum_{j=1}^{m} \eta_j u_j \geq \sum_{j=1}^{m} \eta_j \log u_j \qquad \eta_j \geq 0, \sum_{j=1}^{m} \eta_j = 1$$

- $m = 2$ のとき:



Eステップの導出(続き)

■対数尤度:

$$\log L(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log \sum_{j=1}^{m} w_j \phi(x_i; \mu_j, \sigma_j)$$

■ダミーの変数 $\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}$ を入れる:

$$\log L(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log \sum_{j=1}^{m} \hat{\eta}_{i,j}^{(t)} \underbrace{\frac{w_j \phi(x_i; \mu_j, \sigma_j)}{\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}}}_{\text{前頁の } u_j \text{ とみなす}}$$

前頁の u_j とみなす

$$\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} = \frac{\hat{w}_j^{(t)} \phi(x_i; \hat{\mu}_j^{(t)}, \hat{\sigma}_j^{(t)})}{\sum_{j'=1}^{m} \hat{w}_{j'}^{(t)} \phi(x_i; \hat{\mu}_{j'}^{(t)}, \hat{\sigma}_{j'}^{(t)})}$$

$$\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} \geq 0, \sum_{j=1}^{m} \hat{\eta}_{i,j}^{(t)} = 1$$

Eステップの導出(続き)

$$\log L(\theta)=\sum_{i=1}^{n}\log\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}\frac{w_j\phi(x_i;\mu_j,\sigma_j)}{\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}}$$

- ジェンセンの不等式より対数尤度の下界を得る:

$$\log L(\theta)\ge b^{(t)}(\theta)$$

$$b^{(t)}(\theta)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}\log\frac{w_j\phi(x_i;\mu_j,\sigma_j)}{\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}}$$

- $\log L(\hat{\theta}^{(t)})=b^{(t)}(\hat{\theta}^{(t)})$ を満たす:

$$b^{(t)}(\hat{\theta}^{(t)})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}\log\frac{\hat{w}_j^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_j^{(t)},\hat{\sigma}_j^{(t)})}{\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}}$$

$$\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}=\frac{\hat{w}_j^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_j^{(t)},\hat{\sigma}_j^{(t)})}{\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'}^{(t)},\hat{\sigma}_{j'}^{(t)})}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}\right)\log\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'}^{(t)},\hat{\sigma}_{j'}^{(t)})$$

$$\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}=1$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\log\sum_{j=1}^{m}\hat{w}_j^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_j^{(t)},\hat{\sigma}_j^{(t)})=\log L(\hat{\theta}^{(t)})$$

Mステップの導出

$$b^{(t)}(\theta) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} \log w_j \phi(x_i;\mu_j,\sigma_j) - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} \log \hat{\eta}_{i,j}^{(t)}$$

- 下界を最大にするパラメータ値を求める:

$$\frac{\partial b^{(t)}}{\partial \gamma_j} = 0, \quad \frac{\partial b^{(t)}}{\partial \mu_j} = 0, \quad \frac{\partial b^{(t)}}{\partial \sigma_j} = 0$$

$$\hat{w}_j^{(t+1)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}$$

$$\hat{\mu}_j^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} x_i}{\sum_{i'=1}^{n}\hat{\eta}_{i',j}^{(t)}}$$

$$\hat{\sigma}_j^{(t+1)} = \sqrt{\frac{1}{d}\frac{\sum_{i=1}^{n}\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}(x_i-\hat{\mu}_j^{(t)})^T(x_i-\hat{\mu}_j^{(t)})}{\sum_{i'=1}^{n}\hat{\eta}_{i',j}^{(t)}}}$$

EMアルゴリズムの一般形

- 不完全データに対する最尤推定:
  - モデル $q(z;\theta)$ のパラメータ θ を最尤推定したい
  - 完全な訓練標本 $\{z_i \mid z_i = (x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ のうち，その一部 $\{x_i\}_{i=1}^n$ しか観測できない．
- Eステップ:現在のパラメータ $\hat{\theta}^{(t)}$ を用いて観測されない部分 $\{y_i\}_{i=1}^n$ を推定し，対数尤度の期待値(expectation)を計算

$$Q(\theta;\hat{\theta}^{(t)}) = \sum_{i=1}^n \int \hat{p}(y_i \mid x_i;\hat{\theta}^{(t)}) \log q(x_i, y_i;\theta) dy_i$$

- Mステップ: $Q(\theta;\hat{\theta}^{(t)})$ を最大化(maximization)するように θ を更新

$$\hat{\theta}^{(t+1)} = \arg\max_{\theta} Q(\theta;\hat{\theta}^{(t)})$$

ガウス混合モデルの場合

- $\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}$ は，標本 x_i が j 番目の混合から出てくる確率と解釈できる．

$$\hat{\eta}_{i,j}^{(t)} = \frac{\hat{w}_j^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_j^{(t)},\hat{\sigma}_j^{(t)})}{\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'}^{(t)},\hat{\sigma}_{j'}^{(t)})}$$

- x_i が出てきた“本当”の混合の番号を y_i とする．
- (x_i, y_i) が分かるとき，完全データに対する対数尤度は

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{n}\log w_{y_i}\phi(x_i;\mu_{y_i},\sigma_{y_i})$$

- Eステップ：対数尤度の y_i に関する期待値を計算

$$Q(\theta;\hat{\theta}^{(t)}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\eta_{i,j}^{(t)}\log w_j\phi(x_i;\mu_j,\sigma_j)$$

小レポート(第9回)

1. ガウス混合モデルの最尤推定量が以下の条件を満たすことを証明せよ.

- $$\hat{w}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\eta_{i,j}$$

- $$\hat{\mu}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n}\eta_{i,j}x_i}{\sum_{i'=1}^{n}\eta_{i',j}}$$

$$\eta_{i,j} = \frac{\hat{w}_j\phi(x_i;\hat{\mu}_j,\hat{\sigma}_j)}{\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'},\hat{\sigma}_{j'})}$$

- $$\hat{\sigma}_j = \sqrt{\frac{1}{d}\frac{\sum_{i=1}^{n}\eta_{i,j}(x_i-\hat{\mu}_j)^T(x_i-\hat{\mu}_j)}{\sum_{i'=1}^{n}\eta_{i',j}}}$$

小レポート（続き）

2. 計算機実験：ガウス混合モデルのEMアルゴリズムを実装し，適当な一次元の確率密度関数を推定せよ．
3. 計算機実験：ガウス混合モデルを用いて手書き文字認識を行なえ．混合数 m は あらかじめ固定，あるいは交差確認法を用いて決定せよ．

- 次回の講義は~~1月14日（水）~~

1月19日（月） ← 訂正！