情報認識
「ガウス混合モデル（第８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

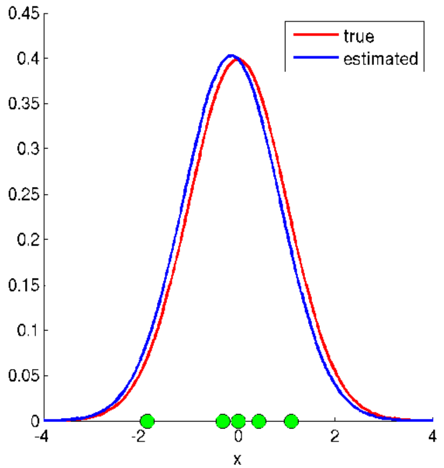
- 識別関数のよさを測る規準
- 条件付き確率の推定
  - パラメトリック法
    - 最尤推定法, EMアルゴリズム
    - ベイズ推定法, 最大事後確率推定法
  - ノンパラメトリック法
    - カーネル密度推定法
    - 最近傍密度推定法
- 手書き文字認識の計算機実習

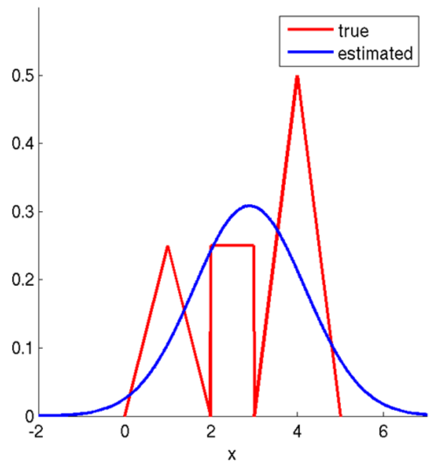
モデルの表現力

■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

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





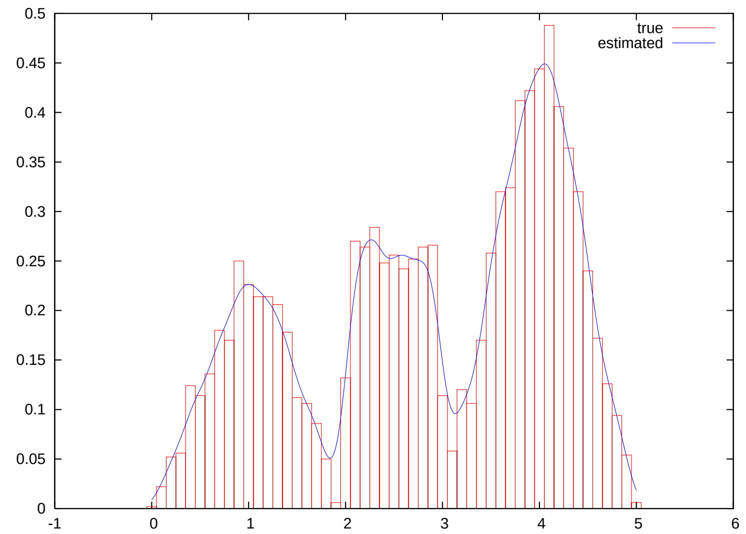
モデルの表現力（続き）

■ガウスカーネル密度推定:

- 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):

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

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

$$\theta=(w_1,\ldots,w_m,\mu_1^T,\ldots,\mu_m^T,\sigma_1,\ldots,\sigma_m)^T$$

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

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

m:混合数

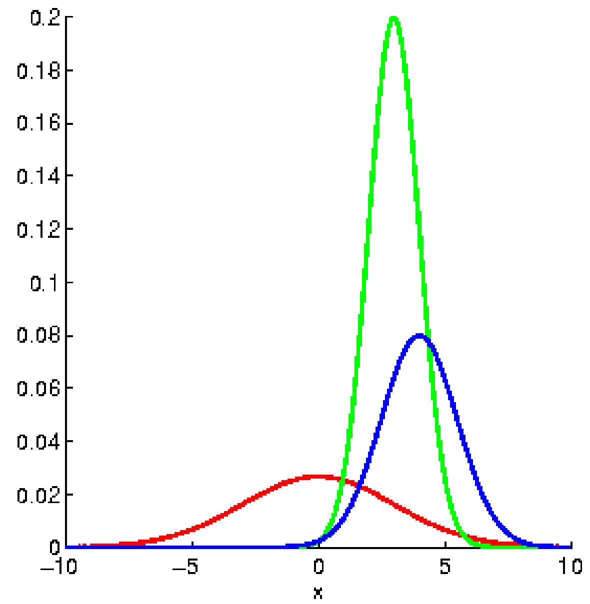
■ 注意: $q(x;\theta)$ は確率密度関数なので

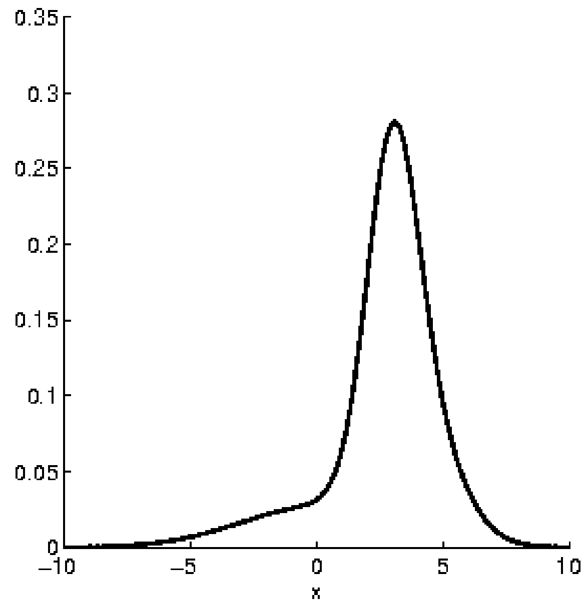
$$\int_D q(x;\theta)dx = 1 \quad \forall x \in D, q(x;\theta) \geq 0$$

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.
- ガウスカーネル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

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

- 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．

勾配法

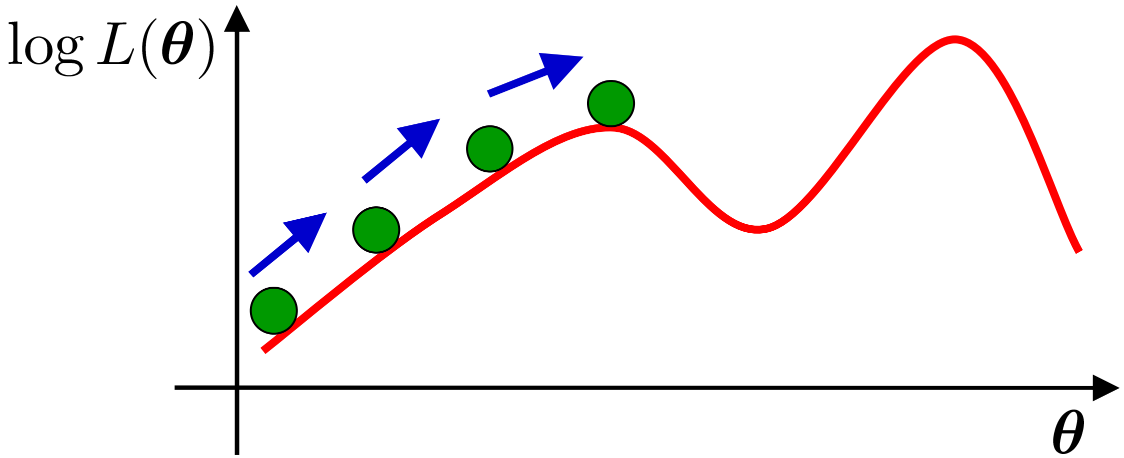
- 勾配法(gradient method):
  1. 適当に初期値 $\hat{\theta}^{(0)}$ を定める.
  2. 勾配を上るようにパラメータを更新する:

$$\hat{\theta}^{(t+1)} \leftarrow \hat{\theta}^{(t)} + \varepsilon \left.\frac{\partial \log L}{\partial \theta}\right|_{\theta=\hat{\theta}^{(t)}}$$

ε :小さい正のスカラー

  3. 収束するまで勾配上昇を繰り返す.

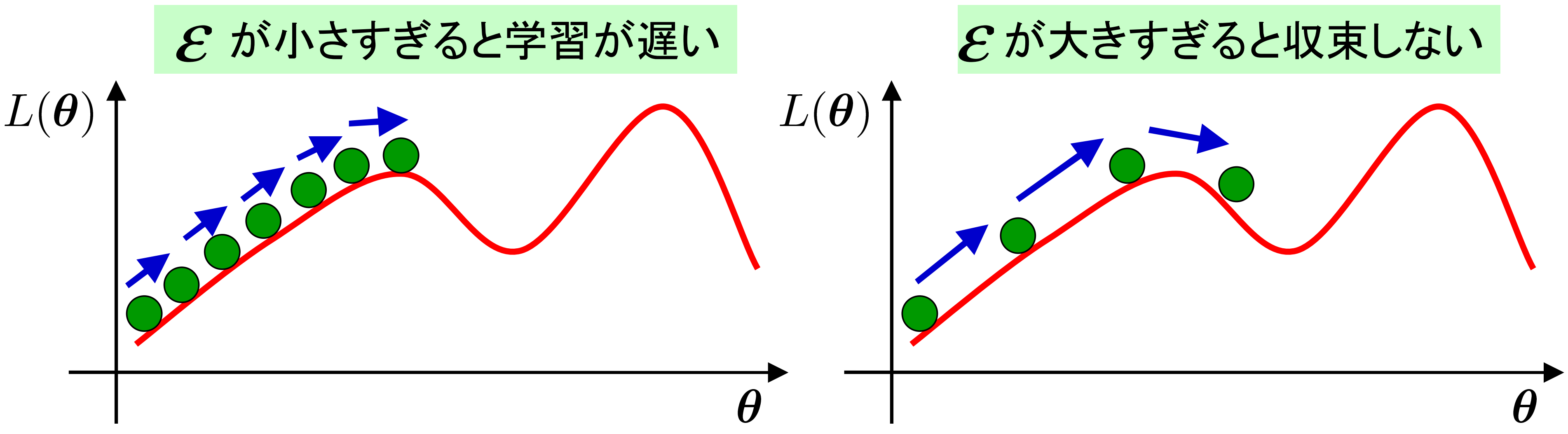
- 局所最適解(local optimal solution)が求まる.



θ

勾配法の欠点

■ 学習率 ε の選び方が難しい：



- ε は，「最初は大きく，徐々に小さく」が原則だが，適切に決定することは難しい

■ 局所最適解しか見つけられない：

- 様々な初期値から何度か学習し，最適な値を採用する

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

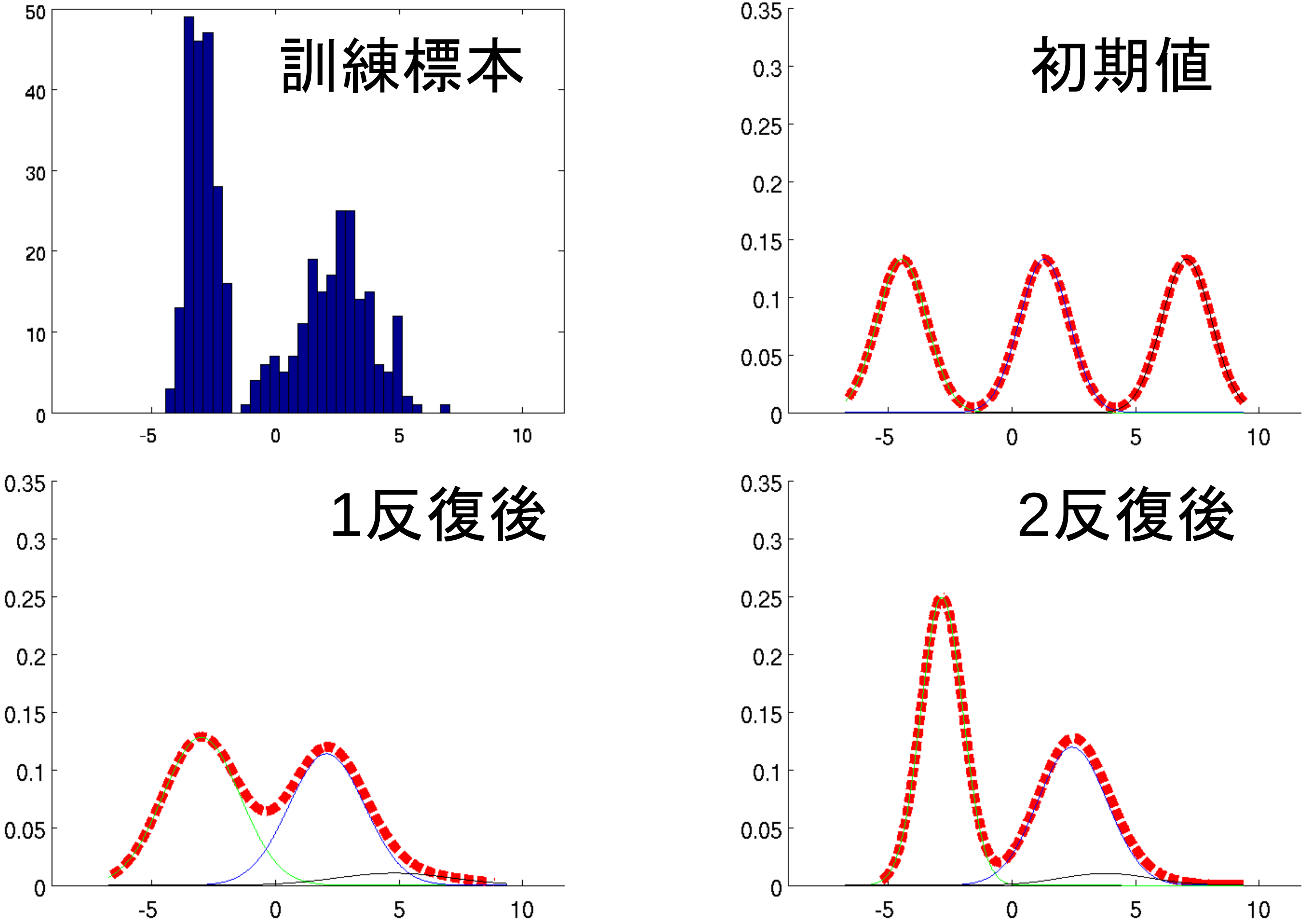
$$\hat{\eta}_{i,j}^{(t)}=\frac{\hat{w}_j^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_j^{(t)},\hat{\sigma}_j^{(t)})}{\sum_{j'=1}^{m}\hat{w}_{j'}^{(t)}\phi(x_i;\hat{\mu}_{j'}^{(t)},\hat{\sigma}_{j'}^{(t)})}$$

- 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

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

- $t=t+1$ し，収束するまでE,Mステップを繰り返す．

例(混合数3)



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

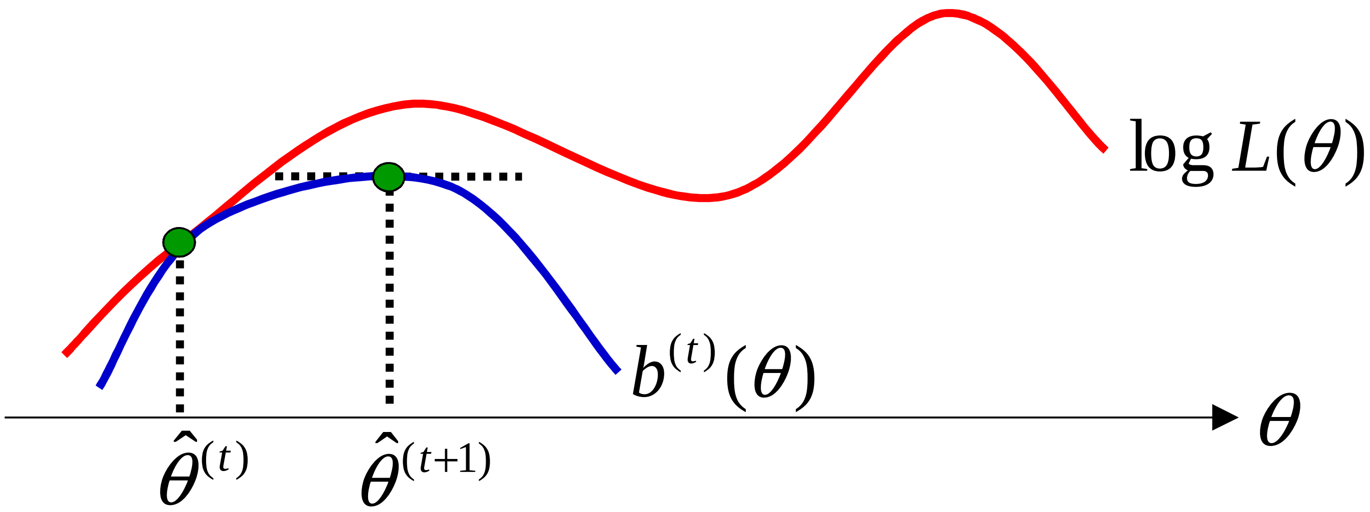
- Eステップ: $\hat{\theta}^{(t)}$を通る対数尤度の下界を求めることに対応

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

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

- 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

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

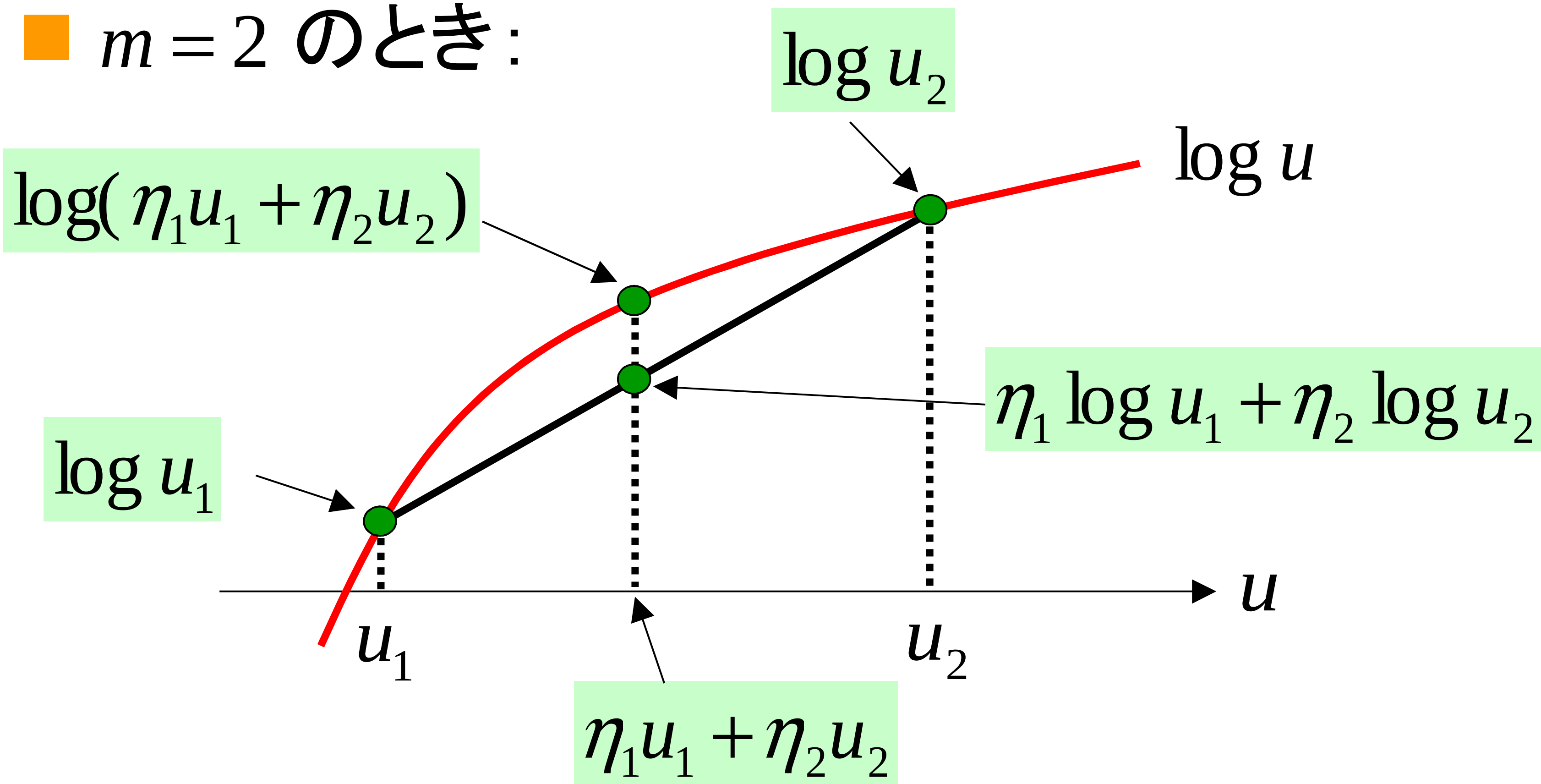


Eステップの導出

- 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:

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

まとめ

- ガウス混合モデル:
  - ガウスモデルより複雑
  - ノンパラメトリックモデルよりも単純
- 勾配法:勾配を上昇するようにパラメータを更新
  - 局所最適解が求まる
  - 学習率を設定するのが難しい
- EMアルゴリズム:下界を最大化するようにパラメータを更新
  - 混合数は交差確認法で決定
  - 局所解の問題は未解決 ⇒ 様々な初期値から何度か学習し，最適な値を採用する

小レポート

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.