情報意味論(7) EM

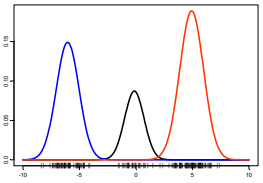
櫻井彰人
慶應義塾大学理工学部

より複雑なモデル

- 確率モデルであって、一個の著名(?)な分布で表せないもの、… で表せそうもないもの、…ではなさそうなものが、世の中にはたくさんある。
- 様々な分布を考える
  - 指数・ポアソン・t・対数正規・…
- 分布を組み合わせる
  - 線形和 – 非観測変数の出現
  - しかし、工夫がある → EMアルゴリズム
- 分布を考えない – しょせん、多項分布
  - 変数が多いと大変。
  - しかし、工夫がある → Bayesian network

例: 混合正規分布

- 正規分布(ガウス混合)の線形和



線形和(重みの和は1)

$$p(x) = \sum \pi_j p_j(x)$$

考え方: 各データは、まず、j のどれかをランダムに選び(確率分布は $\{\pi_j\}$)、次に p_j に従い生成される

推定の面倒さ

データが一個の正規分布から生成されることがわかっていれば、その分布を推定することができる(平均と分散を推定すればよい。最尤推定すればよい)。例えば

$$\mu_{\mathrm{ML}} = \underset{\mu}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{m} (x_i - \mu) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_i$$

しかし、混合分布の場合、分布が2個以上あるので、ある観測点がどの分布に属するかが分からない限り、分布(平均値等)を推定することはできない。

ところで、分布推定は「教師なし学習」

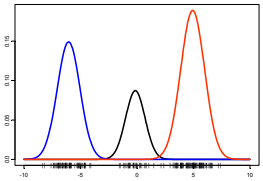
- 教師付き学習: データ <x, y>
- 教師なし学習: データ x

教師なし学習が必要となるところ

- 分布関数(確率密度関数)の推定
- クラスタリング
- 外れ値/新規点の検出
- データ圧縮
- 可視化

分布推定とクラスタリング

- クラスタリング: 混合分布から生成されたデータに対し、どの分布から生成されたかを推定する



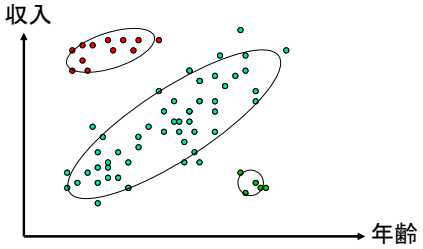
混合分布

$$p(x) = \sum \pi_j p_j(x)$$

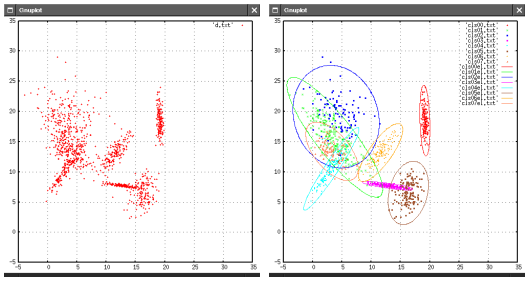
各クラスタは混合分布の個々の分布に対応すると考える

- 隠れ変数: データ点がどのガウス分布から生成されたか
- すなわち, 観測データ <x>, 全データ <x, c>.
- 課題: <x> から <x, c> を推定する

クラスタリング/密度推定

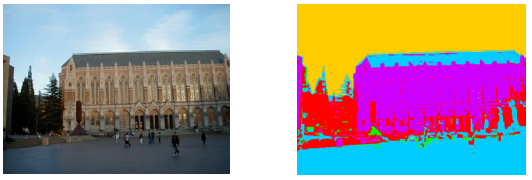


(EM)クラスタリング例



http://jormungand.net/projects/em/

(K-means)クラスタリング例



http://www.cs.washington.edu/research/imagedatabase/demo/kmcluster/

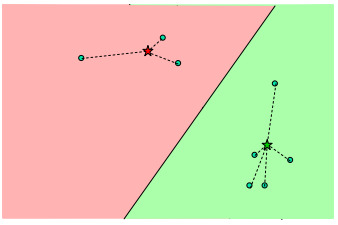
クラスタリングと分布推定

- つまり、クラスタリングができれば、
  - データ x → クラスタ(正規分布) j
  - クラスタ(正規分布) j → j の平均値・分散

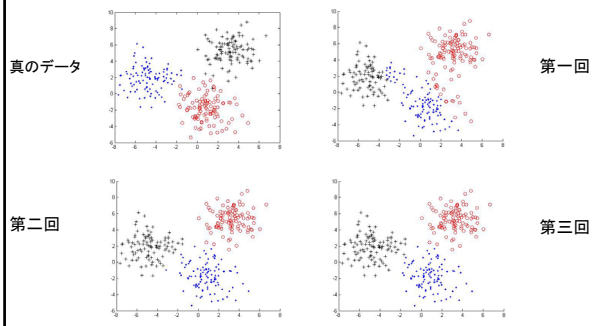
  という具合に分布推定ができる
- しかし、分布推定ができれば、
  - データ x →クラスタ(正規分布) j に属する確率
  - クラスタ(正規分布) j に属する確率 → 確率最大のクラスタ

  という具合にクラスタリングができる
- ということは、鶏と卵。つまり、解けない。さて、どうする？

ヒント: K-Means クラスタリング



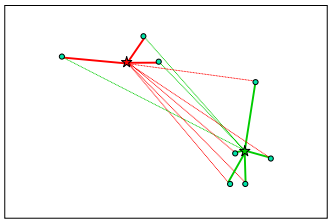
K-means クラスタリング例



K-means の行っていること

- 前提(「動作だけ」を記述するには不要)
  - (各正規分布の)分散は同じとする
- 初期値
  - クラスタ中心 o_j をランダムに定め、推定を開始する
- 繰り返し
  - 各観測点ごと、その(産みの親である)クラスタを推定する
    - 各 <x> → <x, j>, ただし $j = \arg\min_j |x - o_j|$.
    - i.e. 最近傍のクラスタ中心を選び、そのクラスタ番号を j とする
  - クラスタごと、同一クラスタの点のみを用いて、その重心(平均値)を新たにクラスタ中心とする
    - 各 j につき、o_i = center of { x | <x, j> }

K-means をソフトに



読み換えよう

- 前提
  - $\boldsymbol{x}$ の生成もとがクラスタ j ($1 \le j \le k$)である確率を π_j 、クラスタ j から生成された場合に生成される確率を $p_j(\boldsymbol{x})$ とする。そして $p(\boldsymbol{x}) = \sum \pi_j p_j(\boldsymbol{x})$ とする。
  - まず、簡単のため、$\pi_j = 1/k$ とする
- 初期値
  - クラスタ中心 o_j をランダムに定め、推定を開始する
- 繰り返し
  - 各観測点ごと、その(産みの親である)クラスタを推定する
    - 各 <x> → <x, j>, ただし $j = \arg\min_j |x - o_j|$.
    - i.e. $j = \arg\max_j p_j(x) \Rightarrow$ Prob($x \in C_j$)=Const. $p_j(x)=(1/\sum p_j(x))\ p_j(x)$
  - クラスタごと、同一クラスタの点のみを用いて、その重心(平均値)を新たにクラスタ中心とする
    - 各 j につき、o_i = center of { x | <x, j> }
    - i.e. $o_i = (1/N_j) \sum x$ (where $x \in C_j$) $\Rightarrow o_i = (1/\sum P(x \in C_j)) \sum x\ P(x \in C_j)$

読み換えよう (2)

- 前提
  - $\boldsymbol{x}$ の生成もとがクラスタ j ($1 \le j \le k$)である確率を π_j 、クラスタ j から生成された場合に生成される確率を $p_j(\boldsymbol{x})$ とする。そして $p(\boldsymbol{x}) = \sum \pi_j p_j(\boldsymbol{x})$ とする。
  - 確率変数 z_{ij} =1 if データ $x_i \in C_j$ or 0 otherwise
- 初期値
  - クラスタ中心 o_j をランダムに定め、推定を開始する
- 繰り返し
  - 各観測点ごと、その(産みの親である)クラスタを推定する
    - 各 <x> → <x, j>, ただし $j = \arg\min_j |x - o_j|$.
    - i.e. z_{ij}= "1 if $j=\arg\min_j |x_i - o_j|$ or 0 otherwise" = $P(x_i \in C_j) = P(z_{ij}=1)$
    - $\Rightarrow$ $E[z_{ij}]=Prob(z_{ij}=1)=Const.\ p_j(x_i)=(1/\sum_j p_j(x_i))\ p_j(x_i)$
  - クラスタごと、同一クラスタの点のみを用いて、その重心(平均値)を新たにクラスタ中心とする
    - 各 j につき、o_i = center of { x | <x, j> }
    - i.e. $o_i = (1/N_j) \sum_i x_i$ (where $x_i \in C_j$) = $(1/N) \sum_i x_i\ P(x_i \in C_j)$
    - $\Rightarrow$ $o_i = (1/N) \sum_i x_i\ P(z_{ij}=1) = (1/\sum_i E[z_{ij}]) \sum_i x_i\ E[z_{ij}]$

繰り返しの部分

- 確率変数 z_{ij} ="1 if データ $x_i \in C_j$ or 0 otherwise"
- 各観測点ごと、その(産みの親である)クラスタを推定する
  - $E[z_{ij}]=Prob(z_{ij}=1)=(1/\sum_j p_j(x_i))\ p_j(x_i)$
- クラスタごと、同一クラスタの点のみを用いて、その重心(平均値)を新たにクラスタ中心とする
  - $o_i = (1/\sum_i E[z_{ij}]) \sum_i x_i\ E[z_{ij}]$

混合正規分布の学習
(分散は共通・既知)

$$x_1, x_2, \ldots, x_N \sim N(x \mid \mu_j, \sigma) \text{ with probability } \pi_j = 1/k$$

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } C(x_i) = j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

E-Step
$$E[z_{ij}] \leftarrow \frac{p(C(x_i)=j)}{\sum_{j=1}^{k} p(C(x_i)=j)} = \frac{N(x_i \mid \mu_j, \sigma)}{\sum_{j=1}^{k} N(x_i \mid \mu_j, \sigma)}$$
$$= \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu_j)^2}}{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \sum_{j=1}^{k} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu_j)^2}}$$

M-Step
$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, x_i$$

混合正規分布の学習
(分散は共通・既知)

$$x_1, x_2, \ldots, x_N \sim N(x \mid \mu_j, \sigma) \text{ with probability } \pi_j$$

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } C(x_i) = j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

E-Step
$$E[z_{ij}] \leftarrow \frac{p(C(x_i)=j)}{\sum_{j=1}^{k} p(C(x_i)=j)} = \frac{\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \sigma)}{\sum_{j=1}^{k} \pi_j N(x_i \mid \mu_j, \sigma)}$$

M-Step
$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, x_i$$

$$\pi_j \leftarrow \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]$$

混合正規分布の学習
(分散は既知)

$$x_1, x_2, \ldots, x_N \sim N(x \mid \mu_j, \sigma_j) \text{ with probability } \pi_j$$

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } C(x_i) = j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

E-Step
$$E[z_{ij}] \leftarrow \frac{p(C(x_i)=j)}{\sum_{j=1}^{k} p(C(x_i)=j)} = \frac{\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \sigma_j)}{\sum_{j=1}^{k} \pi_j N(x_i \mid \mu_j, \sigma_j)}$$

M-Step
$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, x_i$$

$$\pi_j \leftarrow \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]$$

混合正規分布の学習

$$x_1, x_2, \ldots, x_N \sim N(x \mid \mu_j, \sigma_j) \text{ with probability } \pi_j$$

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } C(x_i) = j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

E-Step
$$E[z_{ij}] \leftarrow \frac{p(C(x_i)=j)}{\sum_{j=1}^{k} p(C(x_i)=j)} = \frac{\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \sigma_j)}{\sum_{j=1}^{k} \pi_j N(x_i \mid \mu_j, \sigma_j)}$$

M-Step
$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, x_i \qquad \pi_j \leftarrow \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]$$

$$\sigma_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, (x_i - \mu_j)^2$$

混合正規分布の学習
(高次元)

$$x_1, x_2, \ldots, x_N \sim N(x \mid \mu_j, \Sigma_j) \text{ with probability } \pi_j$$

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } C(x_i) = j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

E-Step
$$E[z_{ij}] \leftarrow \frac{p(C(x_i)=j)}{\sum_{j=1}^{k} p(C(x_i)=j)} = \frac{\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)}{\sum_{j=1}^{k} \pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)}$$

M-Step
$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, x_i \qquad \pi_j \leftarrow \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]$$

$$\sigma_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij}]\, (x_i - \mu_j)(x_i - \mu_j)^T$$

ソフト化(?) K-means

- 収束する!
- 証明 [Neal&Hinton '99, McLachlan&Krishnan '97]:
  - E/M stepは、データの尤度を減少させない
  - 鞍点に収束する
  - 説明が必要ですね…

EM 一般的な定義

- X={x_1,…,x_N} 観測データ
- Z={z_1,…,z_N} 非観測データ
  (隠れ変数)
- Y=X∪Z
- 目標: E[ln P(Y | h)] を最大化する h を見出すこと, i.e. (非観測データ含めた)データの事後確率を最大化する h を求める

EM 一般的な定義 (続)

- E-Step: Y の確率(の対数)の期待値を求める(式で表す). ただし, 現在の仮説 h と観測データ X は既知とする (目標: E[ln P(Y | h)] の最大化であった)

  Q(h' | h) = E[ln P(Y | h') | h, X]

- M-Step: 現在の仮説 h を, Q を最大化する h' で置き換える

  h ← $\mathrm{argmax}_{h'}$ Q(h' | h)

EM化 K-Means で考えてみよう

- k 個の(等荷重)正規分布から生成されたデータ:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\frac{(x_i-\mu_j)^2}{\sigma^2}}$$

- X = *N* 個のデータ点の集合
- Z = {z_{ij}}. 但し
  z_{ij}=1 iff i-番目のデータは
  j-番目の正規分布から生成
- 仮説 *h* は平均値の組

$$P(y_i \mid h) = P(x_i, z_{i1}, \ldots, z_{ik} \mid h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k} z_{ij}\frac{(x_i-\mu_j)^2}{\sigma^2}}$$

EM化 K-Means, E-Step

$$\begin{aligned}
Q(h' \mid h) &= E[\ln P(Y \mid h') \mid h, X] \\
&= E[\ln \prod_{i=1}^{N} P(y_i \mid h') \mid h, X] \\
&= E[\sum_{i=1}^{N} \ln P(y_i \mid h') \mid h, X] \\
&= E[\sum_{i=1}^{N} \left(\ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k} z_{ij}\frac{(x_i-\mu_j')^2}{\sigma^2}} \right) \mid h, X] \\
&= E[\sum_{i=1}^{N} \left(\ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^{k} z_{ij}(x_i-\mu_j')^2 \right) \mid h, X] \\
&= \sum_{i=1}^{N} \left(\ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^{k} E[z_{ij} \mid h, X](x_i-\mu_j')^2 \right)
\end{aligned}$$

EM化 K-Means, M-Step

$$\begin{aligned}
h &\leftarrow \arg\max_{h'} Q(h' \mid h) \\
&= \mathrm{argmax}_{h'} \sum_{i=1}^{N} \left(\ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^{k} E[z_{ij} \mid h, X](x_i-\mu_j')^2 \right) \\
&= \mathrm{argmin}_{h'} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} E[z_{ij} \mid h, X](x_i-\mu_j')^2
\end{aligned}$$

仮説は μ の組であった。
すなわち、*h* は μ の組、*h'* は μ' の組である.
最小化は μ' による偏微分が0とおいて達成できる, i.e.,

$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} E[z_{ij} \mid h, X]} \sum_{i=1}^{N} E[z_{ij} \mid h, X] x_i$$

なお

$$E[z_{ij} \mid h, X] = \frac{e^{-\frac{1}{2}\frac{(x_i-\mu_j)^2}{\sigma^2}}}{\sum_{n=1}^{k} e^{-\frac{1}{2}\frac{(x_i-\mu_n)^2}{\sigma^2}}}$$

EM化 K-Means, まとめ

E-Step:

$$E[z_{ij}] \leftarrow \eta\, e^{-\frac{1}{2}\frac{(x_i-\mu_j)^2}{\sigma^2}}$$

M-Step:

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

EM

- “Expectation Maximization” の略
- 探索アルゴリズム
  - 尤度（likelihood）の最大化
  - Greedy, 局所最大点につかまるかも
  - ある問題クラスに適用
    - “隠れ変数 hidden (latent) variables” 対応
  - 最急降下法より遅いことも
  - 最急降下法より速いことも
- ポピュラー. しかし有効性は問題依存

EM

- 役に立つ状況は:
  - 隠れ変数の値がわかっていれば, 正しい最尤仮説（ML hypothesis）を求めることができる
    - つまり、混合分布のパラメータが推定できる
  - 正しい最尤仮説があれば, 上記の隠れ変数の事後分布が、直ちに計算できる
    - つまり、各データごと隠れ変数の値の事後分布が推定可能
- 大切なポイント: 隠れ変数
  - 「鶏と卵」状況は隠れ変数のせい。
  - しかし、「隠れ変数」は極めて重要な概念

EM Algorithm
より一般的な説明

目次

- K-means クラスタリング
  - Coordinate Descending algorithm
- 確率密度推定
  - （条件なし）混合分布上の EM
- 回帰と分類
  - 条件付混合分布上の EM
- EM Algorithm の一般形

K-means クラスタリング

問題: 一組の観測データが所与とする

これらを K 個のクラスタに分けるにはどうしたらよいか？ ただし、K は所与とする.

- 第一ステップ

$$z_i^j = \begin{cases} 1 & if\ j = \arg\min_j \left\| x_i - \mu_j \right\|^2 \\ 0 & otherwise. \end{cases}$$

- 第二ステップ

$$\mu_j = \frac{1}{\sum_i z_i^j} \sum_i z_i^j x_i$$

K-means クラスタリング

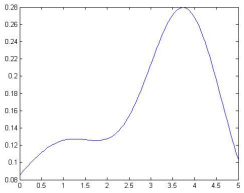
- Coordinate descent 法
- 一変数ごと下記の ***歪み尺度*** J の最小化を試みることに相当

$$J = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} z_i^j \left\| x_i - \mu_j \right\|^2$$

各偏微分値を0にすればよい

混合分布

問題: 与えられたサンプルデータが多峰 multimodal であったら、その真の分布はどうやって推定したらよいのだろうか?

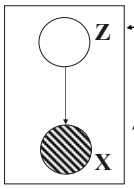


例えば、2項分布を fit しようとする

当然、アルゴリズムは収束する。しかし、結果の分布は真の分布とはかけ離れたものであろう

混合分布

- 分割統治 “divide-and-conquer” 法が使える
- 隠れ変数 Z の導入



多峰性を現すノード. k 個の値のうちの一つをとる

それぞれについて, 一つの分布を割り当てる, 分布の全体は

$$p(x|\theta)=\sum_j p(Z^j=1|\pi_j)p(x|Z^j=1,\theta_j)$$
$$=\sum_j \pi_j p(x|Z^j=1,\theta_j)$$

混合分布

- 混合正規分布
  - このモデルでは, 混合分布の一つ一つは正規分布（未知パラメータあり）である

$$\theta_j=(\mu_j,\Sigma_j),\quad \theta=(\theta_1,\ldots,\theta_k)$$

- 混合正規分布の確率

$$p(x|\theta)=\sum_j \pi_j N(x|\mu_j,\Sigma_j)$$
$$=\sum_j \pi_j \frac{1}{(2\pi)^{m/2}\left|\Sigma_j\right|^{1/2}}\exp\{-\frac{1}{2}(x-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x-\mu_j)\}$$

混合分布

- 隠れ変数 Z の事後確率:

$$\tau^j=p(Z^j|x,\theta)$$
$$=\frac{p(x|Z^j=1,\theta)p(Z^j=1|\pi_j)}{p(x|\theta)}$$
$$=\frac{\pi_j N(x|\mu_j,\Sigma_j)}{\sum_j \pi_j N(x|\mu_j,\Sigma_j)}$$

（x が クラスタ j から発生した確率）

- 対数尤度 Log likelihood:

$$l(\theta|x_1,\cdots,x_N)=\sum_i \log p(x_i|\theta) \qquad p(x|\theta)=\sum_j p(Z^j=1|\pi_j)p(x|Z^j=1,\theta_j)$$
$$=\sum_i \log\sum_z p(x_i,Z|\theta) \qquad =\sum_j \pi_j p(x|Z^j=1,\theta_j)$$
$$=\sum_i \log\sum_j \pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)$$

混合分布

- 変数 π_j に関する l の偏微分（言い忘れたが、Lagrange乗数を用いている）

$$\frac{\partial}{\partial\pi_j}\{l+\lambda(1-\sum_j\pi_j)\}=\frac{\partial}{\partial\pi_j}\{\sum_i\log\sum_j\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)\}-\lambda$$
$$=\sum_i\frac{N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)}{\sum_j\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)}-\lambda$$
$$=\sum_i\frac{\tau_i^j}{\pi_j}-\lambda \qquad \tau^j=\frac{\pi_j N(x|\mu_j,\Sigma_j)}{\sum_j\pi_j N(x|\mu_j,\Sigma_j)}$$

- これらを 0 とおく方程式をとけば

$$\tau_i^j=\frac{\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)}{\sum_j\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)}$$

$$\pi_j=\frac{\sum_i\tau_i^j}{N}$$

混合分布

- 変数 μ_jに関する l の偏微分

$$\frac{\partial l}{\partial\mu_j}=\frac{\partial}{\partial\mu_j}\{\sum_i\log\sum_j\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)\}$$
$$=\sum_i\frac{\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)}{\sum_j\pi_j N(x_i|\mu_j,\Sigma_j)}\frac{\partial}{\partial\mu_j}\{-\frac{1}{2}(x_i-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x_i-\mu_j)\}$$
$$=\sum_i\tau_i^j\Sigma_j^{-1}(x_i-\mu_j)$$

- これを 0 とおけば、次式が得られる

$$\mu_j=\frac{\sum_i\tau_i^j x_i}{\sum_i\tau_i^j}$$

混合分布

- 変数 Σ_j に関する l の偏微分

$$\frac{\partial l}{\partial \Sigma_j} = \frac{\partial}{\partial \Sigma_j}\{\sum_i \log \sum_j \pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)\}$$
$$= \sum_i \frac{\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)}{\sum_j \pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)} \frac{\partial}{\partial \Sigma_j}\{-\frac{1}{2}\log|\Sigma_j| - \frac{1}{2}(x_i-\mu_j)^T \Sigma_j^{-1}(x_i-\mu_j)\}$$
$$= \sum_i \tau_i^j \{-\frac{1}{2}\Sigma_j^{-1} - \frac{1}{2}\Sigma_j^{-1}(x_i-\mu_j)(x_i-\mu_j)^T \Sigma_j^{-1}\}$$

- これを 0 とおくと次式が得られる

$$\Sigma_j = \frac{\sum_i \tau_i^j (x_i-\mu_j)(x_i-\mu_j)^T}{\sum_i \tau_i^j}$$

混合分布

- EM Algorithm
- 第一ステップ

$$\tau_i^{j(t)} = \frac{\pi_j^{(t)} N(x_i \mid \mu_j^{(t)}, \Sigma_j^{(t)})}{\sum_j \pi_j^{(t)} N(x_i \mid \mu_j^{(t)}, \Sigma_j^{(t)})}.$$

（x_i が クラスタ j から発生した確率）

- 第二ステップ

$$\mu_j^{(t+1)} = \frac{1}{\sum_i \tau_i^{j(t)}} \sum_i \tau_i^{j(t)} x_i, \qquad \pi_j^{(t)} = \frac{1}{N}\sum_i \tau_i^{j(t-1)},$$

$$\Sigma_j^{(t+1)} = \frac{1}{\sum_i \tau_i^{j(t)}} \sum_i \tau_i^{j(t)} (x_i - \mu_j^{(t+1)})(x_i - \mu_j^{(t+1)})^T$$

混合分布

- *完全観測の対数尤度の期待値* という観点から EM アルゴリズムをみてみよう

隠れ変数 $Z_i = (Z_i^1, \ldots, Z_i^k)$ を観測したと仮定する

データ集合 $\{(x_i, z_i)\}$ は完全に観測されたことになり，尤度は *完全観測の対数尤度* となり

$$l_c(\theta \mid \{(x_i, z_i)\}) = \sum_i \log p(x_i, z_i \mid \theta)$$
$$= \sum_i \log \prod_j [\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)]^{z_i^j}$$
$$= \sum_i \sum_j z_i^j \log[\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)]$$

混合分布

確率変数 X と $\theta^{(t)}$ で条件付けた変数 $Z_i = (Z_i^1, \ldots, Z_i^k)$ の期待値を求める

なお Z_i^j は2値の確率変数であり

$$E[(Z_i^j \mid x, \theta^{(t)})] = p(Z_i^j = 1 \mid x, \theta^{(t)}) = \tau_i^{j(t)}$$

この値を $Z_i = (Z_i^1, \ldots, Z_i^k)$ に対するベストな推定とすれば，

完全観測の対数尤度の期待値

$$\left\langle l_c(\theta \mid \{(x_i, Z_i)\}) \right\rangle_{\theta^{(t)}} = \left\langle \sum_i \log p(x_i, Z_i \mid \theta) \right\rangle_{\theta^{(t)}}$$
$$= \sum_i \sum_j \left\langle Z_i^j \right\rangle_{\theta^{(t)}} \log[\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)]$$
$$= \sum_i \sum_j \tau_i^{j(t)} \log[\pi_j N(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)]$$

混合分布

- 前述の *完全観測の対数尤度の期待値* を，その偏微分値を 0 にすることにより

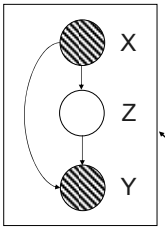
$$\pi_j^{(t+1)} = \frac{1}{N}\sum_i \tau_i^{j(t)},$$

$$\mu_j^{(t+1)} = \frac{1}{\sum_i \tau_i^{j(t)}} \sum_i \tau_i^{j(t)} x_i,$$

$$\Sigma_j^{(t+1)} = \frac{1}{\sum_i \tau_i^{j(t)}} \sum_i \tau_i^{j(t)} (x_i - \mu_j^{(t+1)})(x_i - \mu_j^{(t+1)})^T.$$

条件付混合分布

- Graphical Model



回帰と分類用

変数 X と Z の間の関係を判別分類的にモデル化することができる，e.g. ソフトマックス softmax .

$$\pi_j(x, \xi) = p(Z^j = 1 \mid x, \xi) = \frac{\exp(\xi_j^T x)}{\sum_j \exp(\xi_j^T x)}$$

隠れ変数 Z, 多峰性を表すもの. k 個の値をとる

Back

条件付混合分布

- 変数 Z に関して周辺化すると,

$$p(y \mid x,\theta) = \sum_j p(Z^j = 1 \mid x,\xi)\, p(y \mid Z^j = 1, x, \theta_j)$$

- X は常に観測可能とする. 事後確率 $\tau^j(x,y,\theta)$ は次のように定まる

$$\begin{aligned}\tau^j(x,y,\theta) &= p(Z^j = 1 \mid x,y,\theta) \\ &= \frac{p(Z^j = 1 \mid x,\theta)\, p(y \mid Z^j = 1, x, \theta)}{\sum_j p(Z^j = 1 \mid x,\theta)\, p(y \mid Z^j = 1, x, \theta)} \\ &= \frac{\pi_j(x,\xi)\, p(y \mid Z^j = 1, x, \theta)}{\sum_j \pi_j(x,\xi)\, p(y \mid Z^j = 1, x, \theta)}\end{aligned}$$

条件付混合分布

- 各要素分布にはいくつかのとり方がある
  - 正規分布

$$p(y \mid x,\theta) = \sum_j \pi_j(x,\xi) N(y \mid \beta_j^T x, \sigma_j^2)$$

  - ロジスティック分布

$$p(y \mid x,\theta) = \sum_j \pi_j(x,\xi) \mu(\theta_j^T x)^y (1 - \mu(\theta_j^T x))^{1-y},$$

ただし $\mu(\theta_i^T x)$ はロジスティック関数:

$$\mu(\theta_j^T x) = \frac{1}{1 + \exp(\theta_j^T x)}$$

条件付混合分布

- EM を用いたパラメータ推定

完全観測の対数尤度:

$$\begin{aligned}l_c(\theta \mid \{(x_i,y_i,z_i)\}) &= \log \prod_i p(y_i, z_i \mid x_i, \theta_j) \\ &= \log \prod_i \prod_j [\pi_j(x_i,\xi)\, p(y_i \mid Z_i^j = 1, x_i, \theta_j)]^{z_i^j} \\ &= \sum_i \sum_j z_i^j \log[\pi_j(x_i,\xi)\, p(y_i \mid Z_i^j = 1, x_i, \theta_j)]\end{aligned}$$

期待値を最良な推定と考え

$$\begin{aligned}\left\langle Z_i^j \right\rangle_{\theta^{(t)}} &= p(Z_i^j = 1 \mid x_i, y_i, \theta^{(t)}) \\ &= \tau_i^j(x_i, y_i, \theta^{(t)})\end{aligned}$$

条件付混合

- そうすると *完全観測の対数尤度* は

$$\begin{aligned}&l(\theta \mid \{(x_i,y_i,z_i)\}) \\ &\quad = \sum_i \sum_j \tau_i^{j(t)} \log[\pi_j(x_i,\xi)\, p(y_i \mid Z_i^j = 1, x_i, \theta_j)]\end{aligned}$$

- 偏微分をとり, それらを 0 とおけば, EMの更新公式が得られる

条件付混合

条件付混合モデルに対する EM algorithm のまとめ

- (E step): 事後確率 $\tau_i^{j(t)}$を計算する
- (M step): 例えば、IRLS algorithm を用い, データ対 $(x_i, \tau_i^{j(t)})$の元で, パラメータ ξ を更新する.
- (M step): 荷重付き IRLS algorithm を用い, データ点 (x_i, y_i) と荷重 $\tau_i^{j(t)}$のもとで, パラメータ θ_j を更新する

IRLS: iterative reweighted least square

一般公式

- X - 全観測可能変数
- Z - 全隠れ変数
- θ - 全パラメータ

仮に Z が観測されたとき, その ML 推定量は

完全観測の対数尤度

$$\theta = \arg\max_\theta l_c(\theta; x, z) = \arg\max_\theta \log p(x, z \mid \theta)$$

しかしながら, Z は実際には観測されないので

$$l(\theta; x) = \log p(x \mid \theta) = \log \sum_z p(x, z \mid \theta)$$

不完全観測の対数尤度

一般公式

- 仮に $p(x,z\,|\,\theta)$ が積に分解できたとすると, 完全観測の対数尤度 は

$$l_c(\theta;x,z)=\sum_z f(z\,|\,x,\theta_z)\log p(x,z\,|\,\theta)$$

- ここで $f(z\,|\,x,\theta_z)$ は未知であるので, この ML 推定量の求め方は不明である. しかしながら, もし $f(z\,|\,x,\theta_z)$ の確率変数の上で平均化すれば

$$q(z\,|\,x)=\sum_{\theta_z} f(z\,|\,x,\theta_z)$$

一般公式

- $q(z\,|\,x)$ を $f(z\,|\,x,\theta_z)$ の推定量とすれば, 完全観測の対数尤度 は 完全観測の対数尤度の期待値 となり

$$\langle l_c(\theta;x,z)\rangle_q=\sum_z q(z\,|\,x)\log p(x,z\,|\,\theta)$$

- この 完全観測の対数尤度の期待値 はとけて, 期待としては, それが 完全観測の対数尤度 をなぜか改善する. (EM の基本的アイデア.)

一般公式

- EM は 不完全観測の対数尤度 を最大化する

$$\begin{aligned} l(\theta;x)&=\log p(x\,|\,\theta)\\ &=\log\sum_z p(x,z\,|\,\theta)\\ &=\log\sum_z q(z\,|\,x)\frac{p(x,z\,|\,\theta)}{q(z\,|\,x)}\\ &\geq\sum_z q(z\,|\,x)\log\frac{p(x,z\,|\,\theta)}{q(z\,|\,x)}\xrightarrow{\Delta}L(q,\theta)\end{aligned}$$

Jensen の不等式

補助関数

一般公式

- $q(z\,|\,x)$ が所与のもと, $L(q,\theta)$ の最大化は, 完全観測対数尤度の期待値を最大化することに等しい

$$\begin{aligned} L(q,\theta)&=\sum_z q(z\,|\,x)\log\frac{p(x,z\,|\,\theta)}{q(z\,|\,x)}\\ &=\sum_z q(z\,|\,x)\log p(x,z\,|\,\theta)-\sum_z q(z\,|\,x)\log q(z\,|\,x)\\ &=\langle l_c(\theta;x,z)\rangle_q-\sum_z q(z\,|\,x)\log q(z\,|\,x)\end{aligned}$$

一般公式

- θ が所与のもと, $q^{(t+1)}(z\,|\,x)=p(z\,|\,x,\theta^{(t)})$ とすれば $L(q,\theta)$ の最大化が計られる

$$\begin{aligned} L(q^{(t+1)}(z\,|\,x),\theta^{(t)})&=\sum_z p(z\,|\,x,\theta^{(t)})\log\frac{p(x,z\,|\,\theta^{(t)})}{p(z\,|\,x,\theta^{(t)})}\\ &=\sum_z p(z\,|\,x,\theta^{(t)})\log p(x\,|\,\theta^{(t)})\\ &=\log p(x\,|\,\theta^{(t)})\\ &=l(\theta^{(t)};x)\end{aligned}$$

注: $L(q,\theta^{(t)})$ は $l(\theta^{(t)};x)$ の上界となる

一般公式

- 前記において, EMの各ステップで, $L(q,\theta)$ を最大化した
- しかしながら, 最後に最大化した $L(q,\theta)$ が同時に 不完全観測対数尤度 $l(\theta;x)$ をも最大化すると, どうして分かるのか?

一般公式

- $l(\theta;x)$ と $L(q,\theta)$との差は

$$l(\theta;x)-L(q,\theta)=l(\theta;x)-\sum_z q(z\,|\,x)\log\frac{p(x,z\,|\,\theta)}{q(z\,|\,x)}$$
$$=\sum_z q(z\,|\,x)\log p(x\,|\,\theta)-\sum_z p(z\,|\,x)\log\frac{p(x,z\,|\,\theta)}{q(z\,|\,x)}$$
$$=\sum_z q(z\,|\,x)\log p(x\,|\,\theta)+\log\frac{q(z\,|\,x)}{p(z\,|\,x,\theta)p(x\,|\,\theta)}$$
$$=\sum_z q(z\,|\,x)\log\frac{q(z\,|\,x)}{p(z\,|\,x,\theta)}=D(q(z\,|\,x)\,\|\,p(z\,|\,x,\theta))$$

非負であり$q(z\,|\,x)=p(z\,|\,x,\theta)$でユニークに最小化する → KL divergence

一般公式

- EM と交互最小化について
  - 尤度の最大化はモデルと経験分布との間の KL divergence を最小化することと同値であった.
  - 隠れ変数 Z を含めることにより、KL divergence は (x,z) の結合分布（それぞれの）間の完全観測の KL divergence となる

一般公式

$$D(\tilde{p}(x)\,\|\,p(x\,|\,\theta))=-\sum_x\tilde{p}(x)\log p(x\,|\,\theta)+\sum_x\tilde{p}(x)\log\tilde{p}(x)$$
$$\le-\sum_x\tilde{p}(x)L(q,\theta)+\sum_x\tilde{p}(x)\log\tilde{p}(x)$$
$$=-\sum_x\tilde{p}(x)\sum_z q(z\,|\,x)\log\frac{p(x,z\,|\,\theta)}{q(z\,|\,x)}+\sum_x\tilde{p}(x)\log\tilde{p}(x)$$
$$=\sum_x\tilde{p}(x)\sum_z q(z\,|\,x)\log\frac{\tilde{p}(x)q(z\,|\,x)}{p(x,z\,|\,\theta)}$$
$$=D(\tilde{p}(x)q(z\,|\,x)\,\|\,p(x,z\,|\,\theta))$$

一般公式

- EM algorithm の再定式化
  - (E step)

$$q^{(t+1)}(z\,|\,x)=\arg\min_q D(q\,\|\,\theta^{(t)})$$

$q^{(t+1)}(z\,|\,x)=p(z\,|\,x,\theta^{(t)})$
$D(q(z\,|\,x)\,\|\,p(z\,|\,x,\theta))$

  - (M step)

$$\theta^{(t+1)}=\arg\min_\theta D(q^{(t+1)}\,\|\,\theta)$$

交互最小化

まとめ（一般的な説明）

- （条件なし）混合分布
  - Graphic model
  - EM algorithm
- 条件付混合分布
  - Graphic model
  - EM algorithm
- EM algorithm の一般的な表現
  - 補助関数の最大化
  - 完全観測のKL divergence の最小化