

レポート課題 2: 混合ガウスモデルの最尤推定

提出締切 1月10日(火) 18:00. 提出先: A-333

目的: ある未知の確率分布 $p(x)$ にしたがって生成されたデータ x_1, x_2, \dots, x_n が観測されている. m 個のガウス関数の重み付きの和で, できるだけ精度よく, $p(x)$ を近似してみよう. for 文を使わない octave のプログラミングも体験しよう.

基礎知識 (教科書第8章, pp.105-118)

$x_i \sim p(x)$ とする. x は画像など多次元ベクトルでもよいが, ここでは簡単のため1次元の場合を考える. $p(x)$ を複数のガウス関数 $\phi(x; \mu, \sigma^2)$ の重み付きの和

$$q(x; \theta) = \sum_{l=1}^m w_l \phi(x; \mu_l, \sigma_l^2) \quad (1)$$

で近似して表現することを試みる. これを混合ガウスモデルという. もちろん

$$\phi(x; \mu_l, \sigma_l^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_l} e^{-\frac{(x-\mu_l)^2}{2\sigma_l^2}}$$

である. それにはパラメータ

$$\theta = (\mu_1, \dots, \mu_m, \sigma_1, \dots, \sigma_m, w_1, \dots, w_m), \quad \sum_{l=1}^m w_l = 1$$

について, 尤度を最大にする最尤推定値

$$\theta^* = \operatorname{argmax}_{\theta} \prod_{i=1}^n q(x_i; \theta) = \operatorname{argmax}_{\theta} \sum_{i=1}^n \log q(x_i; \theta) \quad (2)$$

を求めればよい. この θ^* を求める次の手順が知られている (詳細は教科書を参照).

EM アルゴリズム

1. w_l, μ_l, σ_l の値として, 適当な初期値を設定 ($l = 1, \dots, m, \sum_{l=1}^m w_l = 1, w_l \geq 0$).

2. $\eta_{i,l} := \frac{w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)}{\sum_{l'=1}^m w_{l'} \phi(x_i; \mu_{l'}, \sigma_{l'}^2)}$ を計算 ($i = 1, \dots, n, l = 1, \dots, m$).

3. $w_l := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_{i,l}$, $\mu_l := \frac{\sum_{i=1}^n \eta_{i,l} x_i}{\sum_{i=1}^n \eta_{i,l}}$, $\sigma_l := \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \eta_{i,l} (x_i - \mu_l)^2}{\sum_{i=1}^n \eta_{i,l}}}$ を計算.

4. 2~3 を尤度が収束するまで繰り返す.

octave でも、for 文は使えるが計算スピードは遅くなる。できる限り for 文を使わないほうがよい (教科書 p.34)。では、どう書けばよいか。

$$\eta_{i,l} := \frac{w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)}{\sum_{l'=1}^m w_{l'} \phi(x_i; \mu_{l'}, \sigma_{l'}^2)}$$

を計算する例を示そう。ここで、 $i = 1, \dots, n$, $l = 1, \dots, m$ であるので、C 言語なら 2 次元配列 $\eta[i][l]$ を用意し、2 重 for ループで値を順に代入するだろう。一方、octave では、変数のコピーをたくさん用意することで for 文を使わず同じことが実現できる (教科書 p.118)。

```
tmp1 = ( repmat(x, [m 1]) - repmat(mu, [1 n])).^2;
tmp2 = 2*repmat( sigma2, [1 n] );
tmp3 = repmat(w, [1 n]).*exp(-tmp1./tmp2)./sqrt(pi*tmp2);
eta = tmp3./repmat(sum(tmp3, 1), [m 1]);
```

はじめてこれを見た場合、なんのことも分からない。そういう場合は、小さい具体例で考えればよい。 $i = 1, \dots, n$, $l = 1, \dots, m$ の 2 重ループを実現するため、 n 個のデータをまとめた x (n 次元横ベクトル) を縦方向に m 個、各ガウスモデルの平均値をまとめた μ (m 次元縦ベクトル) を横方向に n 個複製する。このようにしておくと

$$\phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_l}} e^{-\frac{(x_i - \mu_l)^2}{2\sigma_l^2}}$$

の指数関数の肩にある分数の分子 $(x_i - \mu_l)^2$ が、 $m \times n$ の各要素ごとに計算できる ($i = 1, \dots, n$, $l = 1, \dots, m$)。これが tmp1 で、計算結果は $m \times n$ 行列である。次に、tmp2 は指数関数の肩にある分数の分母 $2\sigma_l^2$ の計算である ($m \times n$ 行列)。あとで tmp1./tmp2 をしたいので、tmp1 と tmp2 の型は同一でなければいけない。ここで .* とか ./ は、行列の要素ごとの掛け算、割り算を意味している。あらかじめ指定しておく必要がある sigma2 は σ^2 の値、つまり標準偏差ではなく分散の値であることを確認しておこう。

tmp3 中に、sqrt(pi*tmp2) がある。この型は tmp2 と同じで $m \times n$ である。したがって exp(-tmp1./tmp2)./sqrt(pi*tmp2) は $e^{-\frac{(x_i - \mu_l)^2}{2\sigma_l^2}}$ である ($m \times n$ 行列)。tmp3 の最初の項 repmat(w, [1 n]) は、w という m 次元縦ベクトルを横に n 個複製して作った $m \times n$ 行列である。これで tmp3 が $w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)$ を意味していることが分かった。

eta = tmp3./repmat(sum(tmp3, 1), [m 1]) を考えよう。sum(tmp3, 1) は tmp3 の l について全部足している。1 というのは縦方向に要素を足すという意味である。足し算した結果は 1 つであるが、計算した後、結果を縦に m 個複製している。

次に,

$$w_l := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_{i,l}, \quad \mu_l := \frac{\sum_{i=1}^n \eta_{i,l} x_i}{\sum_{i'=1}^n \eta_{i',l}}, \quad \sigma_l^2 := \frac{\sum_{i=1}^n \eta_{i,l} (x_i - \mu_l)^2}{\sum_{i'=1}^n \eta_{i',l}}$$

をどのように計算しているか確認しておこう.

```
tmp4 = sum(eta, 2);
w = tmp4/n;
mu = (eta*x')./tmp4;
sigma2 = sum(tmp1.*eta, 2)./tmp4;
```

`sum(eta, 2)` の 2 は, `eta` の型が $m \times n$ であるので, 横方向に (n 個を) 足し込むという意味があり, $\sum_{i=1}^n$ に対応する. 結果, `w` の型は $m \times 1$ である. `tmp1`, `tmp4` は効率的に再利用でき, `mu`, `sigma2` が計算できる. 計算結果の型はすべて $m \times 1$ (m 次元縦ベクトル) である.

ここまですべてを表にまとめておこう. $i = 1, \dots, n$, $l = 1, \dots, m$ である.

tmp1	$(x_i - \mu_l)^2$	$m \times n$
tmp2	$2\sigma_l^2$	$m \times n$
tmp3	$w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)$	$m \times n$
eta	$\frac{w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)}{\sum_{l'=1}^m w_{l'} \phi(x_i; \mu_{l'}, \sigma_{l'}^2)}$	$m \times n$
tmp4	$\sum_{i=1}^n \frac{w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)}{\sum_{l'=1}^m w_{l'} \phi(x_i; \mu_{l'}, \sigma_{l'}^2)}$	$m \times 1$

最後に

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^n \log \sum_{l=1}^m w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2) \tag{3}$$

の計算を考えよう. この計算には `tmp3` が再利用できる. まず, $\sum_{l=1}^m w_l \phi(x_i; \mu_l, \sigma_l^2)$ は `sum(tmp3, 1)` で計算できる ($1 \times n$ の横ベクトル). この各要素を `log` をとり, n 項を足し算すればよいのだから, `sum(log(sum(tmp3, 1)), 2)` で計算できる. 横方向に足しこむ意味の 2 は省略できる.

```
Lnew=sum(log(sum(tmp3, 1)), 2)
```

コンピュータ演習： $m = 3$ の混合ガウスモデルから、データを n 個生成する関数を作成せよ。モデルのパラメータの値を適当に指定し、具体的にデータを 1000 個生成し、ヒストグラムを描け。また、4つの関数、 $q(x; \theta), \phi(x; \mu_l, \sigma_l^2)$ を同一グラフに描いてみよ ($l = 1, \dots, 3$)。

$w_1 = w_2 = w_3 = 1/3, \mu_1 = 1, \mu_2 = 2, \mu_3 = 3, \sigma_1 = 0.1, \sigma_2 = 0.3, \sigma_3 = 0.5$ とする。

$$q(x; \theta) = \sum_{l=1}^m w_l \phi(x; \mu_l, \sigma_l^2)$$

からデータを 1000 個生成する例を以下に示す。

ガウス混合モデルからのデータ生成： myrand_gmm.m

```
function x = myrand_gmm(n)
x=zeros(1,n);
g=randn(1,n);
u=rand(1,n);
mu = [1.0 2.0 3.0]; % 各ガウス分布の平均値. 値を変えていろいろ試す.
sigma = [0.1 0.3 0.5]; % 各分布の標準偏差. 値を変えていろいろ試す.
flag=(0<u & u<1/3); % この例は, 各分布から 1/3 の確率でデータが出現する場合.
x(flag)= mu(1) + sigma(1)*g(flag);
flag=(1/3<=u & u<2/3);
x(flag)= mu(2) + sigma(2)*g(flag);
flag=(2/3<=u & u<=1);
x(flag)= mu(3) + sigma(3)*g(flag);
```

ガウス混合モデルからのデータ生成： test_gmm.m

```
clear all
n = 1000; % 標本数 (サンプル数)
x = myrand_gmm(n); % データの生成 (n 次元横ベクトル)
m = 3;

mu = [1.0 2.0 3.0]';
sigma = [0.1 0.3 0.5]';
sigma2 = sigma.^2;
w = ones(m, 1)/m;

xx = 0:0.01:5;
% octave v2 → v3 正規分布関連の関数の第 3 引数は, 分散ではなく, 標準偏差を指定
y1 = normpdf(xx, mu(1), sigma(1));
y2 = normpdf(xx, mu(2), sigma(2));
y3 = normpdf(xx, mu(3), sigma(3));
y = y1/3 + y2/3 + y3/3;

figure(1);clf;
hist(x, 0:0.1:5, 10);
hold on
plot(xx, y, 'r-');
print -depsc2 hist800.eps % png ファイルを出力したければ -dpng gmm800.png

figure(2);clf;
plot(xx, y1, 'r-', xx, y2, 'r-', xx, y3, 'r-', xx, y, 'b-');
print -depsc2 gmm800.eps
```

```
% octave test_gmm
```

で実行できる。もし理解できないところがあれば、octave を立ち上げた後、1行1行実行し、

```
octave: > whos
```

で各変数の形を確認しながら進むとよい。

```
p118a.m
clear all
n = 5000; % 標本数 (サンプル数).
x = myrand_gmm(n); % 乱数の生成. 実験に使うデータを生成する関数名に書き換える.
m = 3; % 混合数. この値を変えて実験する.

% 初期値の設定. w, mu, sigma2 は m 次元縦ベクトル.
L = -inf;
w = ones(m, 1)/m; % m 個の正規分布の重みの初期値
mu = linspace( min(x), max(x), m)'; % 平均値の初期値
sigma2 = ones(m, 1)/10; % 分散の初期値

while 1
    tmp1 = ( repmat(x, [m 1]) - repmat(mu, [1 n])).^2;
    tmp2 = 2*repmat( sigma2, [1 n] );
    tmp3 = repmat(w, [1 n]).*exp(-tmp1./tmp2)./sqrt(pi*tmp2);
    eta = tmp3./repmat(sum(tmp3, 1), [m 1]); % ここまでが  $\eta$  の計算
    tmp4 = sum(eta, 2);
    w = tmp4/n;
    mu = (eta*x')./tmp4;
    sigma2 = sum(tmp1.*eta, 2)./tmp4;
    Lnew = sum(log(sum(tmp3,1))); % 更新後の対数尤度 *** 教科書誤植あり
    if Lnew -L < 0.0001
        break
    end
    L = Lnew;
end

xx = 0:0.01:5;
% octave v2 → v3 正規分布関連の関数の第3 引数は、分散ではなく、標準偏差を指定
y1 = normpdf(xx, mu(1), sqrt(sigma2(1)) );
y2 = normpdf(xx, mu(2), sqrt(sigma2(2)) );
y3 = normpdf(xx, mu(3), sqrt(sigma2(3)) );
y = y1/3 + y2/3 + y3/3;

figure(1); clf;
hist(x, 0:0.1:5,10);
print -depsc2 hist801.png % png ファイルを出力したければ -dpng hist801.png

% もとの分布が混合ガウス分布の場合、もとのパラメータを指定し比較するのがよい.
figure(2); clf;
plot(xx, y1, 'r-', xx, y2, 'r-', xx, y3, 'r-', xx, y, 'b-');
print -depsc2 gmm801.png
```

レポート課題：

1. $m = 2$, $w_1 = w_2 = 1/2$, $\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 2$, $\sigma_1 = 0.1$, $\sigma_2 = 0.3$ とする.

$$q(x; \theta) = \sum_{l=1}^m w_l \phi(x; \mu_l, \sigma_l^2)$$

からデータを1000個生成し、ヒストグラムを描け。3つの確率密度関数, $q(x; \theta)$, $\phi(x; \mu_l, \sigma_l^2)$ も同一のグラフに描きなさい ($l = 1, 2$) .

2. $m = 3$ で μ, σ を適当な値に設定し、確率密度関数 $p(x)$ からデータを生成する関数を作れ. $m = 3$ のモデル $q(x)$ を使い、最尤推定せよ (p118.m 参照). EM アルゴリズムの繰り返し回数が増えるにしたがい、各パラメータの値が、もとの確率分布のパラメータに近づいていく様子を示せ.

以下の問を 2. と同様に実験し、分析・考察せよ.

3. 真の分布 $p(x)$ を $m = 5$ で作成し、 $m = 3$ のモデル $q(x)$ を使い最尤推定せよ.
4. 真の分布 $p(x)$ を $m = 3$ で作成し、 $m = 5$ のモデル $q(x)$ を使い最尤推定せよ.
5. 真の分布が、教科書 p.172 の `myrand(n)` で定義される分布とする. $m = 2, 3, 5$ のモデル $q(x)$ を使い最尤推定せよ.
6. (オプション) 適当な問題を作り、結果を分析せよ.

レポートの最後には、感想を記述してほしい. 理解できた点、理解できない点・疑問点などを、具体的に箇条書きしてほしい. このプリント中に理解しにくい点があった場合は、何ページ何行目の、どこの部分が分かりにくかったか、具体的に、指摘してほしい.

注意事項：

1. この文章中には記述ミスがあるかもしれない. その場合は以下のページで更新情報を伝えます. 気づいた点があれば、気軽にメールで連絡してほしい.

http://www.cs.miyazaki-u.ac.jp/~date/lectures/pattern/octave4pattern_Ch8.html

2. レポートの L^AT_EX を使った簡単な書き方は

<http://www.cs.miyazaki-u.ac.jp/~date/lectures/latex/latexreport.html> を参照.

3. レポートは、1年前の自分が読んでも、何を調べようとしているのか (目的)、得られた結果 (図) が分かるように書いていけばよい (コレは簡単ではない).
4. 独力で課題が遂行できそうにない場合は、早めに相談すること.