

第七章

EMアルゴリズム：最尤推定法による教師なし学習

EMアルゴリズムとは

期待値最大化法：

反復法的一种であり、期待値ステップと最大化ステップを交互に繰り返すことで計算が進行する。

Eステップでは、現在推定されている潜在変数の分布に基づいて、モデルの尤度の期待値を計算する。

Mステップでは、Eステップで求めた尤度の期待値を最大化するようなパラメータを求める。

Mステップで求めたパラメータは、次のEステップで使われる潜在変数の分布を決定するために用いられる。

ベルヌーイ分布を用いた最尤推定法

本章で扱う例題は「手書き文字認識」

目標：手書きの数字の画像データが大量に与えられているとして、これらを分類すること。

方法：複数の顔写真を合成して、「平均的な顔」の写真を作る

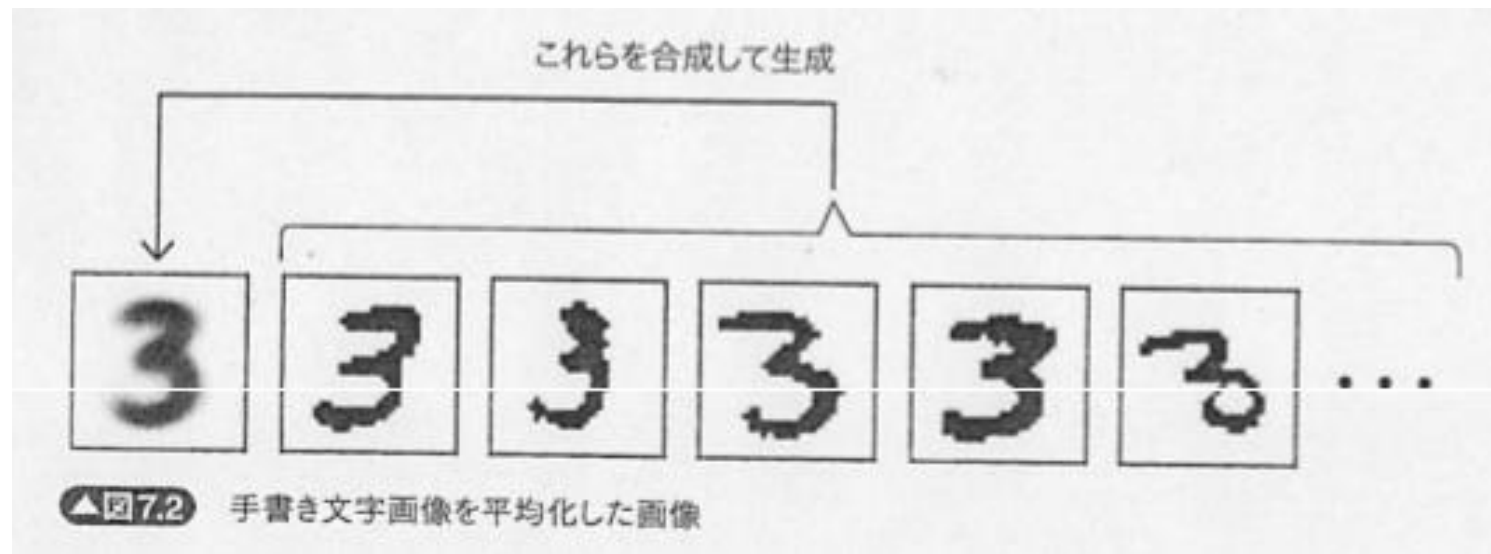


手書き文字に合成方法

- 手書き文字の画像に含まれるピクセルを横一列にならべて、各ピクセルの色を1と0の数値で表したベクトルを用意。
- n 番目の画像に対応するベクトルを x_n とし。第 i 成分 $[x_n]_i$ を見ると、 i 番目のピクセルの色がわかる。
- 特定の数字の手書き画像データが N 個あるとして、これらの平均をとったベクトル μ を用意。

- $$\mu = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n$$

- μ の各成分は、0から1の範囲の実数値になる、これをピクセルの色の濃淡と考え
- 実際にこの方法で100枚の手書き文字画像を合成した結果です



画像生成器による最尤推定法の適用

- 最尤推定法を適用するには「トレーニングセットが得られる確率」を計算する必要がある
- トレーニングセットに含まれる特定の画像データを x とし、 x は、第 i 成分の値 x_i が i 番目のピクセルの色を表すベクトルである
- ピクセル数は、全部で N 個あるものとし、この中でも、特 i 番目のピクセルに注目した場合、そのピクセルの色が得られる確率 p_i は次の式：

$x_i = 1$ の場合： $p_i = \mu_i$

$x_i = 0$ の場合： $p_i = 1 - \mu_i$

まとめて書くと

$$p_i = \mu_i^{x_i} (1 - \mu_i)^{1-x_i}$$

すべてのピクセルについて同じ色になる確率は次の式

$$p(x) = \prod_{i=1}^D p_i = \sum_{i=0}^D \mu_i^{x_i} (1 - \mu_i)^{1-x_i}$$

すべてのデータ $[x_n]_{n=1}^N$ を考えると、すべてに一致する画像が得られる確率は、次の式：

$$P = \prod_{n=1}^N p(x_n) = \prod_{n=1}^N \prod_{i=1}^D \mu_i^{[x_n]_i} (1 - \mu_i)^{1-[x_n]_i}$$

このモデルにおける尤度関数になり

混合分布を用いた最尤推定法

混合分布による確率の計算

全部でK個ある画像生成器を $[\mu_k]_{k=1}^K$ とし、特定の画像生成器 μ_k から画像 x が得られる確率は次の式：

$$p_{\mu_k}(x) = \prod_{i=1}^D [\mu_k]_i^{x_i} (1 - [\mu_k]_i)^{1-x_i}$$

k番目の画像生成器を選ぶ確率を π_k として、 $\{\pi_k\}_{k=1}^K$ は次の条件を満たす

$$\sum_{k=1}^K \pi_k = 1$$

特定の画像 x が得られる確率は次の式：

$$p(x) = \sum_{k=1}^K \pi_k p_{\mu_k}(x)$$

最後に、トレーニングセットに含まれるデータ数を N として、上記の操作を N 回繰り返して、トレーニングセットのデータ群と一致する確率は次の式：

$$P = \prod_{n=1}^N p(x_n) = \prod_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \pi_k p_{\mu_k}(x_n)$$

EMアルゴリズムの手続

- EMアルゴリズムというのは、このような形式の尤度関数を最大にするパラメーターを求める手続きになります
- K 個の画像生成器 $[\mu_k]_{k=1}^K$ を適当に用意して、画像 x_n が得られる確率は、次の式：
- $$p(x_n) = \sum_{k=1}^K \pi_k p_{\mu_k}(x_n)$$
- 特定の k 番目の画像生成器から、画像 x_n が得られる可能性について、その割合を次式で取り出し
- $$\gamma_{nk} = \frac{\pi_k p_{\mu_k}(x_n)}{\sum_{k=1}^K \pi_k p_{\mu_k}(x_n)}$$

- 新たに画像生成器 $[\mu_k]_{k=1}^K$ を作り直して、それぞれの画像生成器を選択する確率 $[\pi_k]_{k=1}^K$ も計算し直す、次の計算式で、再設定する：

- $$\mu_k = \frac{\sum_{k=1}^K \gamma_{nk} x_n}{\sum_{k=1}^K \gamma_{nk}}$$

- $$\pi_k = \frac{\sum_{k=1}^K \gamma_{nk}}{N}$$

この後は上記の二つの式決まった $[\mu_k]_{k=1}^K$ と $[\pi_k]_{k=1}^K$ を用いて、再度、 γ_{nk} を計算しておいて、さらにまた、 μ_k と π_k を計算する、というようにこれらの手続きを何度も繰り返します。これを繰り返すごとに、 P の尤度関数の値が大きくなっていき、最終的に、極大値に達することが証明されています。