



知的情報処理システム特論 第12回

二宮 崇

今日の講義の予定

- EMアルゴリズム
 - 混合モデルのEMアルゴリズム
 - HMMのEMアルゴリズム
- 教科書
 - 北研二(著) 辻井潤一(編) 言語と計算4 確率的言語モデル 東大出版会
 - C. D. Manning & Hinrich Schütze
“FOUNDATIONS OF STATISTICAL NATURAL LANGUAGE PROCESSING” MIT Press, 1999
 - Christopher M. Bishop “PATTERN RECOGNITION AND MACHINE LEARNING” Springer, 2006



EMアルゴリズムの全体像

$$\tilde{\theta} = \arg \max_{\theta} l(\theta)$$

問題変形

$$\theta^{(\tau+1)} = \arg \max_{\theta} Q(\theta^{(\tau)}, \theta)$$

個々の問題に応じて決まるQ関数の極値を解析的に求める

個々の問題によって決まるパラメータ更新式

[Eステップ] $p(y | x; \theta)$ を計算

[Mステップ]
 $\theta^{(\tau+1)} = \arg \max_{\theta} Q(\theta^{(\tau)}, \theta)$
によりパラメータ更新

EMアルゴリズム: Q関数の最大化

- 次のパラメータ更新を繰り返すアルゴリズム

$$\theta^{(\tau+1)} = \arg \max_{\theta} Q(\theta^{(\tau)}, \theta)$$

観測データ x_1, x_2, \dots, x_n に対して、

$$Q(\theta, \theta') = \sum_{i=1}^n \sum_y p(y | x_i; \theta) \log p(x_i, y; \theta')$$

argmax Qをどうやって求めるか??



EMアルゴリズムによる混合モデル のパラメータ更新



混合モデルのパラメータ更新式 導出

- 混合モデル (mixture model)
 - 観測データ x_1, \dots, x_n に対し、それらを生成する複数の隠れ状態 y_1, \dots, y_m を仮定
 - いずれかの隠れ状態が $\lambda_j (=p(y_j))$ の確率で選択され、その隠れ状態から観測データ x が $p(x | y_j)$ の確率で生成されたと考える

$$p(x) = \sum_{j=1}^m p(x, y_j) = \sum_{j=1}^m p(y_j) p(x | y_j) = \sum_{j=1}^m \lambda_j p(x | y_j)$$

ただし $\sum_{j=1}^m \lambda_j = 1$



混合モデルのパラメータ更新式 導出

- 混合モデル (mixture model)

$$p(x) = \sum_{j=1}^m p(x, y_j) = \sum_{j=1}^m p(y_j) p(x | y_j) = \sum_{j=1}^m \lambda_j p(x | y_j)$$

ただし $\sum_{j=1}^m \lambda_j = 1$

- Q関数

$$Q(\lambda, \lambda') = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m p(y_j | x_i; \lambda) \log p(x_i, y_j; \lambda')$$



混合モデルのパラメータ更新式 導出

- Q関数を最大化する λ' を見つける \Rightarrow ラグランジュの未定乗数法

$$\lambda^{(\tau+1)} = \arg \max_{\lambda} Q(\lambda^{(\tau)}, \lambda)$$

$$Q(\lambda, \lambda') = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m p(y_j | x_i; \lambda) \log p(x_i, y_j; \lambda')$$



ラグランジュの未定乗数法

- ラグランジュの未定乗数法

$$\arg \max_{\boldsymbol{\theta}} f(\boldsymbol{\theta}) \text{ ただし } g_1(\boldsymbol{\theta}) = 0, \dots, g_m(\boldsymbol{\theta}) = 0$$

⇒

$$L(\boldsymbol{\theta}) = f(\boldsymbol{\theta}) - \lambda_1 g_1(\boldsymbol{\theta}) - \dots - \lambda_m g_m(\boldsymbol{\theta})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_1} = 0, \frac{\partial L}{\partial \theta_2} = 0, \dots, \frac{\partial L}{\partial \theta_n} = 0$$

- ラグランジュ関数

$$L(\lambda', \gamma) = Q(\lambda, \lambda') - \gamma \left(\sum_{j=1}^m \lambda'_j - 1 \right)$$



混合モデルのパラメータ更新式 導出

● ラグランジュ関数を偏微分

$$\begin{aligned}\frac{\partial L(\lambda', \gamma)}{\partial \lambda'_k} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{\partial p(y_j | x_i; \lambda)}{\partial \lambda'_k} \log p(x_i, y_j; \lambda') + p(y_j | x_i; \lambda) \frac{\partial \log p(x_i, y_j; \lambda')}{\partial \lambda'_k} \right\} - \gamma \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left\{ p(y_j | x_i; \lambda) \frac{\partial \log p(x_i, y_j; \lambda')}{\partial \lambda'_k} \right\} - \gamma \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left\{ p(y_j | x_i; \lambda) \frac{1}{p(x_i, y_j; \lambda')} \frac{\partial p(x_i, y_j; \lambda')}{\partial \lambda'_k} \right\} - \gamma \\ &= \sum_{i=1}^n p(y_k | x_i; \lambda) \frac{1}{\lambda'_k p(x_i | y_k; \lambda')} p(x_i | y_k; \lambda') - \gamma \\ &= \sum_{i=1}^n p(y_k | x_i; \lambda) \frac{1}{\lambda'_k} - \gamma = 0\end{aligned}$$



混合モデルのパラメータ更新式 導出

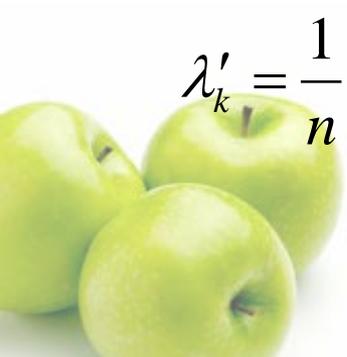
$$\lambda'_k = \frac{1}{\gamma} \sum_{i=1}^n p(y_k | x_i; \lambda)$$

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j = 1 \text{ であるから } \frac{1}{\gamma} \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n p(y_j | x_i; \lambda) = \frac{1}{\gamma} \sum_{i=1}^n 1 = 1 \text{ より } \gamma = n$$

$$p(y_k | x_i) = \frac{p(x_i, y_k)}{p(x_i)} = \frac{p(x_i, y_k)}{\sum_{j=1}^m p(x_i, y_j)} = \frac{\lambda_k p(x_i | y_k)}{\sum_{j=1}^m \lambda_j p(x_i | y_j)}$$

したがって

$$\lambda'_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_k p(x_i | y_k)}{\sum_{j=1}^m \lambda_j p(x_i | y_j)}$$



HMMの教師無し学習

EMアルゴリズムによるHMMのパラ メータ更新



HMMのパラメータ更新式導出

- Q関数

$$\begin{aligned} Q(\theta, \theta') &= \sum_{i=1}^n \sum_{y_i} p(y_i | x_i; \theta) \log p(x_i, y_i; \theta') \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \cdots q_{T_i} | o_1 \cdots o_{T_i}; \theta) \log p(q_1 \cdots q_{T_i}, o_1 \cdots o_{T_i}; \theta') \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \cdots q_{T_i} | o_1 \cdots o_{T_i}; \theta) \log \left(\pi'_{q_1} \prod_{t=2}^{T_i} a'_{q_{t-1}, q_t} \prod_{t=1}^{T_i} b'_{q_t, o_t} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \cdots q_{T_i} | o_1 \cdots o_{T_i}; \theta) \left(\log \pi'_{q_1} + \sum_{t=2}^{T_i} \log a'_{q_{t-1}, q_t} + \sum_{t=1}^{T_i} \log b'_{q_t, o_t} \right) \end{aligned}$$

HMMのパラメータ更新式導出

- Q関数のラグランジュ関数

$$L(\theta, \theta') = \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\log \pi'_{q_1} + \sum_{t=2}^{T_i} \log a'_{q_{t-1}, q_t} + \sum_{t=1}^{T_i} \log b'_{q_t, o_t} \right) \\ - \rho \left(1 - \sum_{q \in Q} \pi'_q \right) - \sum_{q \in Q} \alpha_q \left(1 - \sum_{r \in Q} a'_{q,r} \right) - \sum_{q \in Q} \beta_q \left(1 - \sum_{o \in \Sigma} b'_{q,o} \right)$$

ラグランジュ乗数

ρ ... 1個の変数

α_q ... $|Q|$ 個の変数

β_q ... $|Q|$ 個の変数



HMMのパラメータ更新式導出

$$\frac{\partial L(\theta, \theta')}{\partial \pi'_q} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\pi'_q} \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) [q_1 = q] + \rho = 0$$

$$\pi'_q = \frac{1}{-\rho} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) [q_1 = q] \quad \dots (1)$$

$$\sum_{q \in Q} \pi'_q = 1 \text{ より}$$

$$\frac{1}{-\rho} \sum_{q \in Q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) [q_1 = q] = \frac{1}{-\rho} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) = 1$$

したがって、

$$\rho = - \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) = - \sum_{i=1}^n \frac{\sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i}, o_1 \dots o_{T_i}; \theta)}{p(o_1 \dots o_{T_i}; \theta)} = - \sum_{i=1}^n \frac{\sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i}, o_1 \dots o_{T_i}; \theta)}{\sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i}, o_1 \dots o_{T_i}; \theta)} = -n$$

(1)に代入して、

$$\pi'_q = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) [q_1 = q]}{n}$$

HMMのパラメータ更新式導出

$$\frac{\partial L(\theta, \theta')}{\partial a'_{q,r}} = \frac{1}{a'_{q,r}} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}][r = q_t] \right) + \alpha_q = 0$$

$$a'_{q,r} = \frac{1}{-\alpha_q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}][r = q_t] \right) \quad \dots(1)$$

$$\sum_{r \in Q} a'_{q,r} = 1 \text{ より } \sum_{r' \in Q} \frac{1}{-\alpha_q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}][r' = q_t] \right) = 1, \text{ よって、}$$

$$\alpha_q = - \sum_{r' \in Q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}][r' = q_t] \right). \text{ これを式(1)に代入して、}$$

$$a'_{q,r} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}][r = q_t] \right)}{\sum_{r' \in Q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}][r' = q_t] \right)}$$

HMMのパラメータ更新式導出

$$\frac{\partial L(\theta, \theta')}{\partial b'_{q,o}} = \frac{1}{b'_{q,o}} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o = o_t] \right) + \beta_q = 0$$

$$b'_{q,o} = \frac{1}{-\beta_q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o = o_t] \right) \quad \dots (1)$$

$$\sum_{o \in \Sigma} b'_{q,o} = 1 \text{ より } \sum_{o' \in \Sigma} \frac{1}{-\beta_q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o' = o_t] \right) = 1, \text{ よって}$$

$$-\beta_q = \sum_{o' \in \Sigma} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o' = o_t] \right), (1) \text{ に代入すると、}$$

$$b'_{q,o} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o = o_t] \right)}{\sum_{o' \in \Sigma} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o' = o_t] \right)}$$

HMMのEMアルゴリズム

1. $\pi^{(0)} :=$ 適当な値; $\mathbf{a}^{(0)} :=$ 適当な値; $\mathbf{b}^{(0)} :=$ 適当な値
2. [Eステップ]全ての可能な状態列に対し、 $\pi^{(j)}, \mathbf{a}^{(j)}, \mathbf{b}^{(j)}$ を用いて各々の状態列の確率を計算。文に対する各状態列の相対確率を計算。
3. [Mステップ] $\pi^{(j+1)}, \mathbf{a}^{(j+1)}, \mathbf{b}^{(j+1)}$ を求める
4. 2.に戻る



HMMのEMアルゴリズム

[Eステップ] $\pi^{(j)}, \mathbf{a}^{(j)}, \mathbf{b}^{(j)}$ を用いて各状態列の確率を計算。文 x に対する各状態列の相対確率を計算。

$$p(q_1 o_1 \cdots q_T o_T; \theta^{(j)}) = \pi_{q_1}^{(j)} \prod_{t=2}^T a_{q_{t-1}, q_t}^{(j)} \prod_{t=1}^T b_{q_t, o_t}^{(j)}$$

$$p(q_1 \cdots q_T | o_1 \cdots o_T; \theta) = \frac{p(q_1 o_1 \cdots q_T o_T; \theta)}{p(o_1 \cdots o_T; \theta)} = \frac{p(q_1 o_1 \cdots q_T o_T; \theta)}{\sum_{q'_1 \in Q, \dots, q'_T \in Q} p(q'_1 o_1 \cdots q'_T o_T; \theta)}$$



HMMのEMアルゴリズム

[Mステップ] $\pi^{(j+1)}$ を求める

$$\pi_q^{(j+1)} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \cdots q_{T_i} | o_1 \cdots o_{T_i}; \theta^{(j)}) [q_1 = q]}{n}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_2 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q q_2 \cdots q_{T_i} | o_1 \cdots o_{T_i}; \theta^{(j)})}{n}$$

$$= \frac{\text{先頭が} q \text{となる回数} \text{の期待値}}{n}$$

HMMのEMアルゴリズム

[Mステップ] $a^{(j+1)}$ を求める

$$\begin{aligned} a_{q,r}^{(j+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}] [r = q_t] \right)}{\sum_{r' \in Q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) \left(\sum_{t=2}^{T_i} [q = q_{t-1}] [r' = q_t] \right)} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) C(q, r; q_1 \dots q_{T_i})}{\sum_{r' \in Q} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) C(q, r'; q_1 \dots q_{T_i})} \\ &= \frac{\text{状態 } q \text{ から状態 } r \text{ へ遷移する回数の期待値}}{\text{状態 } q \text{ から遷移する回数の期待値}} \end{aligned}$$

$C(q, r; q_1 \dots q_T)$ $q_1 \dots q_T$ の中で q から r に遷移する回数

HMMのEMアルゴリズム

[Mステップ] $b^{(j+1)}$ を求める

$$\begin{aligned} b_{q,o}^{(j+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o = o_t] \right)}{\sum_{o' \in \Sigma} \sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) \left(\sum_{t=1}^{T_i} [q = q_t][o' = o_t] \right)} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) C(q, o; q_1 \dots q_{T_i}, o_1 \dots o_{T_i})}{\sum_{i=1}^n \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_{T_i} \in Q} p(q_1 \dots q_{T_i} | o_1 \dots o_{T_i}; \theta^{(j)}) C(q; q_1 \dots q_{T_i})} \\ &= \frac{\text{状態 } q \text{ に滞在し記号 } o \text{ を出力する回数の期待値}}{\text{状態 } q \text{ に滞在する回数の期待値}} \end{aligned}$$

$C(q; q_1 \dots q_T)$ $q_1 \dots q_T$ の中で q が出現した回数

$C(q, o; q_1 \dots q_T, o_1 \dots o_T)$ $q_1 \dots q_T o_1 \dots o_T$ の中で q から o を出力する回数

状態遷移回数期待値の例

- q, r の2つの状態があるとする (例えば、名詞、動詞)
- $o_1 o_2 o_3 o_4$ に対する状態列を列挙

状態 q から状態 r へ遷移する回数の期待値

$$= \sum_{q_1 \in Q, \dots, q_T \in Q} p(q_1 \dots q_T | o_1 \dots o_T) \times (q_1 q_2 \dots q_T \text{における } q \text{ から } r \text{ への遷移回数})$$

q から r に遷移する回数の期待値:

$$(0.02 + 0.008 + 0.02 + 0.001 + 0.03 * 2 + 0.02 + 0.08 + 0.085 + 0.024 + 0.011 + 0.098) / 0.626$$

$$= 0.476 / 0.626 = 0.7603$$

状態列 $q_1 q_2 q_3 q_4$	確率 $p(q_1 o_1 q_2 o_2 q_3 o_3 q_4 o_4)$
qqqq	0.03
qqqr	0.02
qqrq	0.008
qqr	0.02
qrqq	0.001
qrqr	0.03
qrrq	0.02
qrrr	0.08
rqqq	0.082
rqqr	0.085
rqrq	0.024
rqrr	0.011
rrqq	0.009
rrqr	0.098
rrrq	0.053
rrrr	0.055

HMMのためのEMアルゴリズム の問題点

- 期待値を計算するために全ての可能な隠れ状態を列挙すると文長に対し、指数爆発的計算量が必要

解決策：前向き後向きアルゴリズム。隠れ状態を列挙することなく、この期待値を計算する動的計画法。



まとめ

- EMアルゴリズム
 - 混合モデルのEMアルゴリズム
 - HMMのEMアルゴリズム
- 資料

<http://aiweb.cs.ehime-u.ac.jp/~ninomiya/iips/>

