Advanced Institute for Artificial Intelligence

Modelo de Mistura de Gaussianas

Advanced Institute for Artificial Intelligence – AI2

https://advancedinstitute.ai

Introdução

Modelo de Misturas de Gaussianas, do inglês *Gaussian Mixture Models* - GMMs, é uma técnica de **aprendizado não supervisionado** que pode ser entendida como uma generalização do k-Médias. Ao invés de estimarmos os centroides de cada agrupamento, tentamos estimar também a forma e proporção de cada Gaussiana que compõe a mistura.

Definição do problema: seja $\mathcal{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\}$ um conjunto de dados tal que $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n$. Assumimos que as amostras são independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.) a partir de uma função de densidade de probabilidade $p(\boldsymbol{x}_i)$, $\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}$. Assumimos, também, que $p(\boldsymbol{x}_i)$ é uma **mistura finita** de K componentes, ou seja:

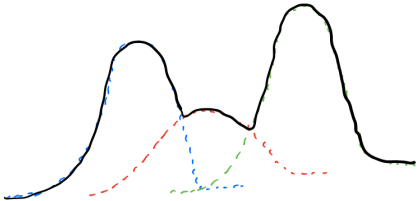
$$p(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{K} w_k p(\boldsymbol{x}_i|\theta_k), \tag{1}$$

em que $\theta_k = (w_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$ corresponde aos parâmetros relativos à Gaussiana k e $\sum_{k=1}^{k} w_k = 1$.

As componentes são densidades Gaussianas multivariadas dadas por:

$$p(\boldsymbol{x}_i|\theta_k) = \frac{1}{(2\pi)^{m'_k/2}|\Sigma_k|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)\right\}. \quad (2)$$

No caso, os pesos w_k representam a probabilidade que uma amostra $\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}$ selecionada aleatoriamente tenha sigo gerada pela componente k. Vejamos o exemplo de uma mistura 1D com $k = 3$.



Como não temos os rótulos, devemos utilizar alguma informação adicional para estimar $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_k\}$. Para tal tarefa, podemos empregar o conhecido algoritmo E-M (*Expectation-Maximization*), o qual segue a mesma ideia da abordagem de máxima verossimilhança.

A falta do rótulo dos dados caracteriza um **problema estatístico incompleto**, fazendo com que utilizemos as chamadas **variáveis latentes**, isto é, variáveis que **não são observadas**. Note que no caso do classificador Bayesiano temos o conjunto de rótulos, ou seja, observamos essas variáveis.

Seja $\mathcal{Z} = \{z_1, z_2, \ldots, z_m\}$ um conjunto de variáveis latentes em que cada uma delas está relacionada com uma amostra do conjunto de treinamento $\mathcal{X}$. Dado o conjunto de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$, temos que a função de verossimilhança é dada por:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X}, \mathcal{Z}) = p(\mathcal{X}, \mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}), \tag{3}$$

em que $p(\mathcal{X}, \mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta})$ corresponde à densidade conjunta de $\mathcal{X}$ e $\mathcal{Z}$. Ademais, o estimador de máxima verossimilhança do vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ é dado, então, pela **maximização da verossimilhança marginal** (só temos acesso ao $\mathcal{X}$) dos dados observados, ou seja:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X}) = p(\mathcal{X}|\boldsymbol{\theta}) = \int p(\mathcal{X}, \mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}) \mathrm{d}\mathcal{Z}. \tag{4}$$

A formulação acima corresponde à calcular a integral da probabilidade conjunta em $\mathcal{Z}$.

No entanto, não temos como calcular essa integral manualmente, pois não temos conhecido de $\mathcal{Z}$. No entanto, o algoritmo E-M é um estimador iterativo para a verossimilhança marginal. Ele funciona por meio da aplicação sucessiva de dois passos:

1. *Expectation* (E): calcula o valor esperado do logaritmo da verossimilhança com relação à distribuição condicional de $\mathcal{Z}$ dado $\mathcal{X}$ utilizando a estimativa atual dos parâmetros $\boldsymbol{\theta}$:

$$Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(t)}) = \mathbb{E}_{\mathcal{Z}|\mathcal{X},\boldsymbol{\theta}^{(t)}}[\log L(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X},\mathcal{Z})], \tag{5}$$

   em que Q denota uma "quantidade".

2. *Maximization* (M): encontra os parâmetros que maximizam essa quantidade Q:

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(t)}). \tag{6}$$

De maneira geral, a ideia do algoritmo E-M é executar os passos 1 e 2 de maneira iterativa até que $|\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} - \boldsymbol{\theta}^{(t)}| < \epsilon$. **A variável latente $\mathcal{Z}$ nos diz, basicamente, a pertinência de uma dada amostra $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$ pertencer à um determinado agrupamento (classe).**

Basicamente, temos as seguintes informações acerca de nosso problema:

- Observações em $\mathcal{X}$ podem ser discretas ou contínuas (ex: podem ser oriundas de distribuições Gaussianas).
- Variáveis latentes em $\mathcal{Z}$ são discretas (pseudo-rótulos).
- Os parâmetros em $\boldsymbol{\theta}$ são contínuos.

Basicamente, os passos do E-M são os seguintes:

1. Inicializar o conjunto de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$ de maneira aleatória.
   - Passo E: para cada amostra $\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}$ associamos uma pontuação γ_{ki} que denota a probabilidade dessa amostra pertencer ao agrupamento k.
   - Passo M: dadas as pontuações para todas as amostras, ajusto $\boldsymbol{\theta}_k$ para cada Gaussiana (agrupamento) k utilizando utilizando uma função de verossimilhança marginal (Equação 4).
2. Avaliamos a função do logaritmos da verossimilhança. Caso ela tenha estabilizado entre as iterações, podemos assumir que o método convergiu e interrompemos o processo treinamento.

No entanto, uma maneira melhor de inicializar μ_k e Σ_k é via algoritmo do k-médias, em que $k = 1, 2, \ldots, K$. Já os pesos w_k podem ser inicializados como $w_k = \frac{C_k}{|\mathcal{X}|}$, em que C_k corresponde ao número de amostras do agrupamento k.

Vamos às equações de atualização:

- Passo E: temos que as pontuações na iteração t podem ser calculadas como segue:

$$\gamma_{ki}^{(t)} = \frac{w_k p(\boldsymbol{x}_i | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^{K} w_j p(\boldsymbol{x}_i | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}. \tag{7}$$

  A equação assim equivale ao preenchimento de uma matrix $\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^{K \times |\mathcal{X}|}$.

- Passo M: as seguintes equações são então utilizadas para atualizar os valores dos parâmetros:

$$C_k = \sum_{i=1}^{\mathcal{X}} T_{ki}^{(t)}, \tag{8}$$

em que $\boldsymbol{T}^{(t)} \in \mathbb{R}^{K \times |\mathcal{X}|}$ é uma matriz da iteração t e definida da seguinte forma:

$$\boldsymbol{T}_{ki}^{(t)} = \begin{cases} 1 & \text{a amostra } \boldsymbol{x}_i \text{ pertence ao agrupamento } k \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)} = \frac{1}{C_k} \sum_{i=1}^{|\mathcal{X}|} \gamma_{ki}^{(t)} \boldsymbol{x}_i, \tag{10}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)} = \frac{1}{C_k} \sum_{i=1}^{|\mathcal{X}|} T_{ki}^{(t)} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^T (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k), \tag{11}$$

e

$$w_k^{(t+1)} = \frac{C_k}{|\mathcal{X}|}. \tag{12}$$

O logaritmo da verossimilhança é utilizado como critério de parada do algoritmo. Essa verossimilhança é uma medida de **confiança** que temos que os dados do conjunto de dados $\mathcal{X}$ são gerados pelos parâmetros estimados:

$$\log p(\mathcal{X}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{|\mathcal{X}|} \log \left[\sum_{k=1}^{K} w_k p(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \right]. \tag{13}$$

A equação acima deve ser calculada ao final de cada iteração do algoritmo E-M.