Лекция 10. EM-алгоритм

Сергей Лебедев

sergei.lebedev@jetbrains.com

18 апреля 2015 г.

- В прошлый раз на примере датасета *20 newsgroups*[1] мы научились предсказывать по тексту сообщения, в какой список рассылки оно будет отправлено.
- Пример сообщения из списка рассылки `comp.windows.x`:

```
Hi there,

I'm looking for tools that can make X programming
easy. I would like to have a tool that will enable
to create X motif GUI interactivly. [...]. A package
that enables to create GUI with no coding at all
(but the callbacks).
Any help will be appreciated.

Thanks Gabi.
```

- Хочется научиться по тексту сообщения предсказывать его автора. Какие идеи?

[1] http://qwone.com/~jason/20Newsgroups/

Известное

- Пусть $V = \{v_1, \ldots, v_{|V|}\}$ – упорядоченное множество слов,
- тогда сообщение можно представить в виде вектора, в котором на d-той позиции стоит **количество раз**, которое слово v_d встречается в сообщении.
- Пример:
  - $V = \{\text{what}, \text{love}, \text{baby}, \text{hurt}, \text{more}\}$
  - Сообщение «What is love? Baby, don't hurt me, don't hurt me no more» будет векторизовано как $[1, 1, 1, 2, 1]$.

Вопрос

Как определить функцию правдоподобия $p(x|y)$ на множестве $X \equiv \mathbb{N}_0^{|V|}$?

- Мультиномиальное распределение — дискретное распределение с функцией вероятности

$$\mathrm{Mul}(x; n, \vec{\theta}) = \binom{n}{x_1, \ldots, x_{|V|}} \theta_1^{x_1} \ldots \theta_{|V|}^{x_{|V|}}$$

- и двумя параметрами:
  - $n = \sum_{d=1}^{|V|} x_d$ — количество слов в сообщении и
  - $\vec{\theta} = \{\theta_1, \ldots, \theta_{|V|}\} \in [0, 1]^{|V|}$ — вектор вероятностей каждого слова из словаря, удовлетворяющий $\sum_{d=1}^{|V|} \theta_d = 1$.

Вопрос

Какую комбинаторную интерпретацию можно дать функции вероятности мультиномиального распределения?

- Найдём ОМП априорных вероятностей классов $\hat{P}_y$ и параметров мультиномиального распределения $\hat{\theta}_{yd}$:

$$\hat{P}_y = \frac{\sum\limits_{i=1}^{l}[y_i = y]}{l} \qquad \hat{\theta}_{yd} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{l}[y_i = y]x_{id}}{\sum\limits_{e=1}^{|V|}\sum\limits_{i=1}^{l}[y_i = y]x_{ie}}$$

- Подставим оценки в оптимальный алгоритм классификации:

$$a(x) = \arg\max_{y\in Y} \lambda_y \hat{P}_y \prod_{d=1}^{|V|} \mathrm{Mul}(x_{id}; \hat{\theta}_{yd})$$

Вопрос

Что делать, если наша обучающая выборка $X^l = (x, y)_{i=1}^{l}$ состоит из одного элемента?

Неизвестное

- Пусть $Y \equiv \{0,1\}$ и $X^N = (x_i)_{i=1}^N$ – выборка и (x_l, y_l) – пример, для которого известна метка класса.
- На время забудем про (x_l, y_l) и сфокусируемся на оценивании параметров $\hat{P}_y$ и $\hat{\theta}_{yd}$ по выборке X^N.
- Попытка 1: метод максимального правдоподобия:

$$L(\Theta) = \ln \prod_{i=1}^{N} \sum_{y \in Y} p(x_i, y; \Theta)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \ln \sum_{y \in Y} p(x_i, y; \Theta) \to \max_{\Theta}$$

- Попытка 2: введём N **независимых** случайных величин $y_i \in Y$ с функциями вероятности Q_i и запишем функцию **полного** правдоподобия:

$$L(\Theta, \vec{y}) = \sum_{i=1}^{N} \ln p(x_i, y_i; \Theta)$$

$$L(\Theta) = \ln \sum_{\vec{y}} \exp L(\Theta, \vec{y}) = \ln \sum_{\vec{y}} \prod_{i=1}^{N} p(x_i, y_i; \Theta)$$

$$= \ln \sum_{\vec{y}} \prod_{i=1}^{N} Q_i(y_i) \frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)} = \ln \mathbb{E}_{\vec{y}} \left[\prod_{i=1}^{N} \frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \ln \mathbb{E}_{y_i} \left[\frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)} \right] \to \max_{\Theta}$$

Вопрос

Что произошло с мат. ожиданием $\mathbb{E}_{\vec{y}}\left[.\right]$?

- Пусть X — случайная величина и f — вогнутая функция, тогда справедливо

$$f(\mathbb{E}[X]) \geq \mathbb{E}[f(x)],$$

причём, если $\mathbb{E}[X] = X$, то есть X — константная случайная величина, то неравенство превращается в равенство.
- Почему нам это важно?

$$L(\Theta) = \sum_{i=1}^{N} \ln \mathbb{E}_{y_i}\left[\frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)}\right] \geq \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{y_i}\left[\ln \frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)}\right]$$

- Нижнюю оценку проще оптимизировать! Кстати, **почему**?

- В предыдущих рассуждениях мы не делали никаких предположений о распределении y_i, поэтому можем выбрать его удобным нам образом:

$$Q_i(y_i) \propto p(x_i, y_i; \Theta) = \frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{\sum\limits_{y \in Y} p(x_i, y; \Theta)} = P(y_i | x_i; \Theta)$$

- Получили, что

$$\frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)} = \frac{p(x_i, y_i; \Theta) \sum\limits_{y \in Y} p(x_i, y; \Theta)}{p(x_i, y_i; \Theta)} = \text{const}(y_i),$$

- а значит неравенство Йенсена стало равенством!

$$L(\Theta) = \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{y_i} \left[\ln \frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)} \right]$$

- EM-алгоритм (англ. *expectation-maximization*) итеративно максимизирует нижнюю оценку на функцию правдоподобия.

$t \leftarrow 0$
repeat
  for $i = 1 \dots N$ **do**
    $Q_i^{(t)}(y_i) \leftarrow P(y_i | x_i; \Theta^{(t)})$ ▷ E-шаг
  end for
  $\Theta^{(t+1)} \leftarrow \arg\max_{\Theta} \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{y_i} \left[\ln \frac{p(x_i, y_i; \Theta^{(t)})}{Q_i^{(t)}(y_i)} \right]$ ▷ M-шаг
  $t \leftarrow t + 1$
until convergence

- Для работы алгоритму требуется начальное приближение параметров $\Theta^{(0)}$. Как можно его построить?

- Хочется верить, что между итерациями EM-алгоритма правдоподобие $L(\Theta)$ не уменьшается.
- Пусть $\Theta^{(t)}$ и $\Theta^{(t+1)}$ – оптимальные параметры для t-й и $t+1$-й итерации соответственно, а $Q_i^{(t)}$ – распределение y_i, вычисленное на t-й итерации, тогда:

$$L(\Theta^{(t+1)}) \geq \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{y_i}\left[\ln \frac{p(x_i, y_i; \Theta^{(t+1)})}{Q_i^{(t)}(y_i)}\right] \qquad (1)$$

$$\geq \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{y_i}\left[\ln \frac{p(x_i, y_i; \Theta^{(t)})}{Q_i^{(t)}(y_i)}\right] = L(\Theta^{(t)}) \qquad (2)$$

- Неравенство (1) верно для любых Q_i и Θ, см. слайд 7, почему, а (2) верно в силу того, что $\Theta^{(t+1)} = \arg\max_{\Theta} L(\Theta^{(t)})$.

Назад к наивному Байесовскому классификатору: E-шаг

- Напоминание:

$$Q_i(y_i) = P(y_i|x_i;\Theta) = \frac{p(x_i, y_i;\Theta)}{\sum\limits_{y\in Y} p(x_i, y;\Theta)} \propto p(x_i, y_i;\Theta)$$

- То есть для мультиномиального наивного Байесовского классификатора:

$$\begin{aligned} Q_i(y_i) &\propto P_{y_i} p(x_i|y_i;\Theta) = P_{y_i}\,\mathrm{Mul}(x_i; n, \vec{\theta}_{y_i}) \\ &= P_{y_i}\binom{n_i}{x_{i1},\dots,x_{i|V|}}\theta_{y_i1}^{x_{i1}}\dots\theta_{y_i|V|}^{x_{i|V|}} \\ &\propto P_{y_i}\theta_{y_i1}^{x_{i1}}\dots\theta_{y_i|V|}^{x_{i|V|}}, \end{aligned}$$

где $n_i = \sum\limits_{i=1}^{|V|} x_{id}$ – количество слов в сообщении.

- Хочется $\arg\max_{\Theta} L(\Theta)$, но как?

$$L(\Theta) = \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{y_i}\left[\ln \frac{p(x_i, y_i; \Theta)}{Q_i(y_i)}\right]$$
$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{y_i \in Y} Q_i(y_i) \ln \frac{P_y \operatorname{Mul}(x_i | y; n, \vec{\theta}_{y_i})}{Q_i(y_i)}$$

- Теперь видно, что $L(\Theta)$ можно оптимизировать аналитически,
- но сперва воспользуемся методом множителей Лагранжа, чтобы учесть ограничение на сумму вероятностей θ_{yd}:

$$\mathcal{L}(\Theta) = L(\Theta) + \sum_{y \in Y} \lambda_y \left(1 - \sum_{d=1}^{|V|} \theta_{yd}\right) \to \max_{\Theta}$$

- В качестве примера оптимизируем $\mathcal{L}(\Theta)$ относительно θ_{yd}:

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{yd}} \mathcal{L}(\Theta) = \frac{1}{\theta_{yd}} \sum_{i=1}^{N} Q_i(y) x_{id} - \lambda_y \equiv 0$$

$$\Rightarrow \theta_{yd} = \frac{1}{\lambda_y} \sum_{i=1}^{N} Q_i(y) x_{id}$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_y} \mathcal{L}(\Theta) = 1 - \sum_{d=1}^{|V|} \theta_{yd} = 1 - \frac{1}{\lambda_y} \sum_{d=1}^{|V|} \sum_{i=1}^{N} Q_i(y) x_{id} \equiv 0$$

$$\Rightarrow \lambda_y = \sum_{d=1}^{|V|} \sum_{i=1}^{N} Q_i(y) x_{id}$$

- Получили:

$$\hat{\theta}_{yd} \propto \sum_{i=1}^{N} Q_i(y) x_{id}$$

- ЕМ-алгоритм для мультиномиального варианта классификатора заключается в повторении до сходимости двух шагов:
  - Е-шаг:
$$Q_i(y_i) \propto P_{y_i}\theta_{y_i 1}^{x_{i1}} \dots \theta_{y_i |V|}^{x_{i|V|}}$$
  - М-шаг:
$$\hat{P}_y = \frac{\sum\limits_{i=1}^{N} Q_i(y)}{N} \qquad \hat{\theta}_{yd} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{N} Q_i(y)x_{id}}{\sum\limits_{d=1}^{|V|}\sum\limits_{i=1}^{N} Q_i(y)x_{id}}$$
- Полученные оценки эквивалентны ОМП, если положить $Q_i(y) = [y_i = y]$, где y_i известны из обучающей выборки.

Вопрос

Какие проблемы, на ваш взгляд, есть у получившегося алгоритма?

ЕМ-алгоритм: проблемы и “решения”

- ЕМ-алгоритм не гарантирует сходимость к ОМП :-(
- Сходимость алгоритма может зависеть от выбора начального приближения параметров. Какие варианты?
    - Делать несколько запусков со случайными параметрами, обучаться до сходимости и выбирать параметры, максимизирующие правдоподобие.
    - Аналогично предыдущему, но обучаться только фиксированное число итераций.
    - Кластеризовывать объекты непараметрическим алгоритмом и оценивать параметры по получившимся кластерам.
- Критерий сходимости можно определять по-разному и получать разные результаты, например:
    - по параметрам,
    - по изменению правдоподобия,
    - по количеству итераций алгоритма.

- Функция правдоподобия $L(\Theta)$ инвариантна относительно перестановки меток классов, то есть, если $\sigma : Y \to Y$ — перестановка, то:

$$L(\Theta(Y)) = L(\Theta(\sigma(Y)))$$

- Чтобы разрешить неоднозначности, можно воспользоваться знаниями из предметной области, например: «Маша пишет чаще, чем Саша, поэтому нам нужна перестановка, в которой $P_y > P_s$»,
- или использовать небольшую контрольную выборку.
- Для случая двух классов хватит одного примера (x_l, y_l). Кстати, **почему**?

- EM-алгоритм — это не совсем алгоритм, а скорее способ находить ОМП параметров при наличии “отсутствующих” данных.
- Суть алгоритма в итеративной оптимизации нижней оценки на функцию правдоподобия.
- Мы поговорили
    - о том, почему EM-алгоритм “работает”,
    - применили его к мультиномиальному наивному Байесовскому классификатору,
    - обсудили основные проблемы, возникающие при использовании EM-алгоритма, и их возможные “решения”.

Последовательное

- Наивный Байесовский классификатор предполагает, что классы всех наблюдений **независимы**, то есть:

$$P(\vec{y}) = \prod_{i=1}^{N} P(y_i)$$

- Для задачи определения авторства естественно предположить, что между авторами последовательных писем есть зависимость.
- Удобной (с точки зрения обучения) формой зависимости является Марковская цепь порядка k:

$$P(\vec{y}) = \prod_{i=1}^{N} P(y_i | y_{i-1}, y_{i-2}, \ldots, y_{i-k})$$

На практике чаще всего рассматривают случай $k = 1$.

Скрытый Марковский наивный Байесовский классификатор

- Чтобы сделать наш классификатор Марковским, необходимо параметризовать его вероятностями переходов P_{ys} и включить их в вероятность $\vec{y}$:

$$P(\vec{y}) = P_{y_1} \prod_{i=2}^{N} P_{y_{i-1}y_i}$$

- Таким образом, для обучения классификатора необходимо оценить:
  - P_y — априорные вероятности классов,
  - P_{ys} — вероятности перехода между классами,
  - θ_{yd} — вероятности слов для функции правдоподобия.

Вопрос

Как будем оценивать? И, кстати, почему **скрытый**?

- Выпишем функцию **полного** правдоподобия

$$L(\Theta, \vec{y}) = \underbrace{\ln P_{y_1} + \sum_{i=2}^{N} \ln P_{y_{i-1} y_i}}_{\ln P(\vec{y})} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N} p(x_i | y_i; \Theta)}_{\ln p(\vec{x}|\vec{y})}$$

- и подставим её в функцию правдоподобия:

$$\begin{aligned} L(\Theta) &= \mathbb{E}_{\vec{y}} \left[L(\Theta, \vec{y}) - \ln Q(\vec{y}) \right] \\ &= \mathbb{E}_{\vec{y}} \left[\ln P_{y_1} \right] + \sum_{i=2}^{N} \mathbb{E}_{\vec{y}} \left[\ln P_{y_{i-1} y_i} \right] + \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{\vec{y}} \left[p(x_i | y_i; \Theta) \right] \\ &- \mathbb{E} \left[\ln Q(\vec{y}) \right] \to \max_{\Theta} \end{aligned}$$

- Ура, $L(\Theta)$ выглядит как то, что несложно оптимизировать аналитически!

- Максимизировать $L(\Theta)$ напрямую нельзя, потому что не все значения параметров нам подходят:

$$\sum_{y \in Y} P_y = 1 \qquad \sum_{s \in Y} P_{ys} = 1 \qquad \sum_{d=1}^{|V|} \theta_{yd} = 1$$

- В очередной раз воспользуемся методом множителей Лагранжа:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\Theta) = L(\Theta) &+ \lambda(1 - \sum_{y \in Y} P_y) \\ &+ \sum_{y \in Y} \kappa_y (1 - \sum_{s \in Y} P_{ys}) \\ &+ \sum_{y \in Y} \delta_y (1 - \sum_{d=1}^{|V|} \theta_{yd})\end{aligned}$$

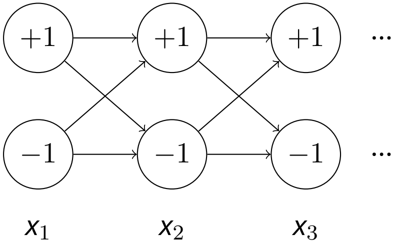
- Остальное — дело техники (и внимательности).

- М-шаг *aka* алгоритм Баума-Велша:

$$\hat{P}_y = \frac{\sum_{i=1}^{N} Q_i(y)}{N} \qquad \hat{P}_{ys} = \frac{\sum_{i=1}^{N} Q_i(y_{i-1}, y_i)}{\sum_{i=1}^{N} Q_i(y)} \qquad \hat{\theta}_{yd} \propto \sum_{i=1}^{N} Q_i(y) x_{id},$$

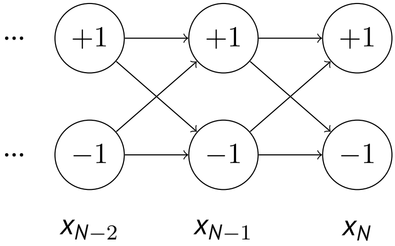
- Таким образом, в Е-шаге нам необходимо вычислить не только $Q_i(y)$, но и $Q_i(y_{i-1}, y_i)$.
- Идея: представим $Q_i(y_i)$ в виде произведения двух вспомогательных переменных:

$$Q_i(y_i) \propto \alpha_y(i)\beta_y(i) \qquad \begin{aligned} \alpha_y(i) &\doteq P(x_1, \ldots, x_i, y_i = y) \\ \beta_y(i) &\doteq P(x_{i+1}, \ldots, x_N | y_i = y) \end{aligned}$$



$$\alpha_y(i) \doteq P(x_1, \ldots, x_i, y_i = y)$$
$$\alpha_y(1) = P_y p(x_1 | y; \Theta)$$
$$\alpha_y(i) = \left(\sum_{s \in Y} \alpha_s(i-1) P_{sy} \right) p(x_i | y; \Theta)$$

Алгоритм обратного хода



$$
\begin{aligned}
\beta_y(i) &\doteq P(x_{i+1}, \ldots, x_N | y_i = y) \\
\beta_y(N) &= 1 \\
\beta_y(i) &= \sum_{s \in Y} P_{ys} p(x_{i+1} | s; \Theta) \beta_s(i+1)
\end{aligned}
$$

- $Q_i(y_i)$ можно посчитать с помощью алгоритмов прямого и обратного хода:

$$Q_i(y_i = y) = \frac{\alpha_y(i)\beta_y(i)}{\sum\limits_{s \in Y} \alpha_y(i)\beta_y(i)}$$

- Оставшуюся вероятность $Q_i(y_{i-1}, y_i)$ тоже можно выразить в терминах $\alpha_y(i)$ и $\beta_y(i)$:

$$Q_i(y_{i-1} = y, y_i = s) \propto \alpha_y(i-1) P_{ys} p(x_i | s; \Theta) \beta_s(i)$$

Вопрос

Какая константа нормализации в выражении для $Q_i(y_{i-1}, y_i)$?

Максимум правдоподобия *vs.* максимум апостериорной вероятности

- До сих пор мы обсуждали классификацию методом максимума апостериорной вероятности

$$y_i^{\mathrm{MAP}} = \arg\max_{y \in Y} P(y | x_i; \Theta),$$

- но существует и альтернативный подход, который ищет вектор $\vec{y}$, максимизирующий правдоподобие:

$$\vec{y}^{\mathrm{MLE}} = \arg\max_{\vec{y} \in Y^N} L(\vec{x}, \vec{y}; \Theta)$$

- Для наивного Байесовского классификатора оба подхода эквивалентны, но после перехода к скрытому Марковскому [...] классификатору эквивалентность теряется.

Вопрос

Какой из методов лучше подходит для задачи определения авторства?

- Марковское предположение позволяет добавить в классификатор удобную для вычисления форму зависимости.
- Мы обсудили
  - применение EM-алгоритма для обучение скрытого Марковского [...] классификатора,
  - алгоритмы прямого и обратного хода, вычисляющие необходимые для M-шага значения $Q_i(y_i)$ и $Q_i(y_{i-1}, y_i)$,
  - два подхода к классификации при наличии Марковского предположения.

Очевидное

- Обучение вероятностных классификаторов подразумевает операции с большим количеством вероятностей,
- большинство существующих языков программирования реализуют вещественные числа в соответствии со стандартом IEEE-754[2],
- поэтому, чтобы не потерять точность, рекомендуется проводить все операции в логарифмах:
  - умножение, возведение в степень, деление

$$\ln(ab) = \ln a + \ln b \qquad \ln\left(a^b\right) = b \ln a \qquad \ln \frac{a}{b} = \ln a - \ln b$$

  - сложение

$$\ln(a+b) = ??? \quad \ln \sum_{i=1}^{N} a_i = ???$$

[2] Кстати, чем отличаются стандартные функции `log` и `log1p`?

- Пусть $a > b$, тогда посчитать логарифм суммы можно так:

$$\ln(a+b) = \ln\left(a\left(1+\frac{b}{a}\right)\right) = \ln a + \ln\left(1+\frac{b}{a}\right),$$

- а если a и b представимы в виде e^z:

$$\ln(e^x + e^y) = x + \ln\left(1 + e^{y-x}\right)$$

- и для произвольного количества слагаемых:

$$x_m \doteq \max_{i=1}^{N} x_i \qquad \ln\sum_{i=1}^{N} e^{x_i} = x_m + \ln\sum_{i=1}^{N} e^{x_i - x_m}$$

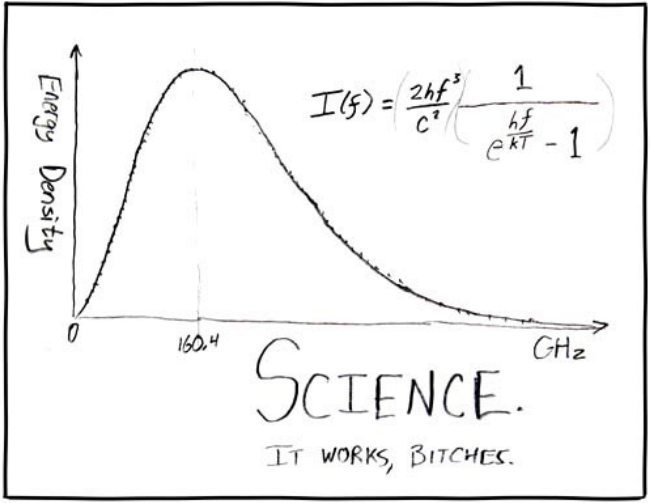
- На первый взгляд может показаться, что логарифмы сумм — вещь бесполезная, но вспомним алгоритм прямого хода:

$$\alpha_y(1) = P_y p(x_1|y;\Theta)$$
$$\alpha_y(i) = \left(\sum_{s\in Y} \alpha_s(i-1)P_{sy}\right) p(x_i|y;\Theta)$$

- и прологарифмируем $\alpha_y(i)$:

$$\ln \alpha_y(i) = \ln \sum_{s\in Y} \alpha_s(i-1)P_{sy} + \ln p(x_i|y;\Theta)$$
$$= \ln \sum_{s\in Y} e^{\ln \alpha_s(i-1) + \ln P_{sy}} + \ln p(x_i|y;\Theta)$$

- QED.



https://xkcd.com/54