Compte-rendu du devoir 1

Vincent Matthys

1 Leaning in discrete graphical models

Etant donné que z et x sont des variables à valeurs discrètes prenant respectivement M et K valeurs, on peut procéder au *one hot encoding*, notant respectivement Z et X leur encodage sur, respectivement \mathbb{R}^M et \mathbb{R}^K . Ainsi, on peut écrire :

$$p(z = m) = P(Z_m = 1) = \pi_m$$
$$p(x = k|z = m) = p(X_k = 1|Z_m = 1) = \theta_{mk}$$

En supposant que l'on ait un échantillon de n observations de (x, z), on peut exprimer la probabilité jointe d'une observation i:

$$p(x^{(i)}, z^{(i)}; \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}) = p(z^{(i)}; \boldsymbol{\pi}) p(x^{(i)} | z^{(i)}; \boldsymbol{\theta})$$

$$p(x^{(i)}, z^{(i)}; \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{m=1}^{M} \prod_{k=1}^{K} \theta_{mk}^{X_k^{(i)} Z_m^{(i)}} \prod_{l=1}^{M} \pi_l^{Z_l^{(i)}}$$
(1)

On peut alors écrire la log-vraisemblance de l'échantillon dans le modèle (π, θ) , composé d'observations i.i.d., en utilisant (1):

$$\ell(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \ln(p(x^{(i)}, z^{(i)}; \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}))$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\ln\left(\prod_{m=1}^{M} \prod_{k=1}^{K} \theta_{mk}^{X_{k}^{(i)}} Z_{m}^{(i)} \prod_{l=1}^{M} \pi_{l}^{Z_{l}^{(i)}} \right) \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \ln\left(\theta_{mk}^{X_{k}^{(i)}} Z_{m}^{(i)}\right) + \sum_{l=1}^{M} \ln\left(\pi_{l}^{Z_{l}^{(i)}}\right) \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} X_{k}^{(i)} Z_{m}^{(i)} \ln(\theta_{mk}) + \sum_{l=1}^{M} Z_{l}^{(i)} \ln(\pi_{l}) \right)$$

$$= \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \left(\sum_{i=1}^{n} X_{k}^{(i)} Z_{m}^{(i)} \right) \ln(\theta_{mk}) + \sum_{l=1}^{M} \left(\sum_{i=1}^{n} Z_{l}^{(i)} \right) \ln(\pi_{l})$$

$$= \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \alpha_{mk} \ln(\theta_{mk}) + \sum_{l=1}^{M} \beta_{l} \ln(\pi_{l})$$

$$(2)$$

avec

$$\alpha_{mk} = \sum_{i=1}^{n} X_k^{(i)} Z_m^{(i)}$$
$$\beta_l = \sum_{i=1}^{n} Z_l^{(i)}$$

D'après (2), la log-vraisemblance est donc strictement concave en chaque composantes de π et θ , par combinaison linéaire de logarithmes. D'autre part, on a les contraintes linéaires suivantes :

$$\sum_{m=1}^{M} \pi_m - 1 = 0$$

$$\sum_{k=1}^{K} \theta_{mk} - 1 = 0, \forall m : 1..M$$
(3)

On peut donc écrire le Lagrangien, en utilisant les multiplicateurs de Lagrange correspondants, associé au problème de maximisation de la log-vraisemblance (2) :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}, \lambda, \boldsymbol{\gamma}) = \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \alpha_{mk} \ln(\theta_{mk}) + \sum_{l=1}^{M} \beta_l \ln(\pi_l) - \lambda \left(\sum_{m=1}^{K} \pi_m - 1\right) - \boldsymbol{\gamma}^{\mathsf{T}} \left(\sum_{k=1}^{K} \theta_{mk} - 1\right)$$

$$\vdots$$

$$(4)$$

Le problème admet une solution unique, notée $(\widehat{\pi_{MLE}}, \widehat{\theta_{MLE}})$ que l'on trouve par dérivation de (4)

1.1 Par rapport à π_m

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}, \lambda, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \pi_m} = \frac{\beta_m}{\pi_m} - \lambda = 0 \implies \pi_m \propto \beta_m \implies \pi_m = \frac{\beta_m}{\sum_{m=1}^M \beta_m} = \frac{\sum_{i=1}^n Z_m^{(i)}}{\sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^n Z_m^{(i)}}$$

D'où finalement:

$$\left(\widehat{\pi_{MLE}}\right)_m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_m^{(i)} \tag{5}$$

1.2 Par rapport à θ_{mk}

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\theta}, \lambda, \boldsymbol{\gamma})}{\partial \theta_{mk}} = \frac{\alpha_{mk}}{\theta_{mk}} - \gamma_m = 0 \implies \theta_{mk} \propto \alpha_{mk} \implies \theta_{mk} = \frac{\alpha_{mk}}{\sum_{k=1}^K \alpha_{mk}} = \frac{\sum_{i=1}^n X_k^{(i)} Z_m^{(i)}}{\sum_{i=1}^n \left(\sum_{k=1}^K X_k^{(i)}\right) Z_m^{(i)}}$$

D'où finalement :

$$\left(\widehat{\theta_{MLE}}\right)_{mk} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_k^{(i)} Z_m^{(i)}}{\sum_{i=1}^{n} Z_m^{(i)}}$$
(6)

On remarque que si $\sum_{i=1}^{n} Z_m^{(i)}$ est nulle, alors $\left(\widehat{\theta_{MLE}}\right)_{mk}$ n'est pas défini, et ce pour tout k. Mais, dans de telles conditions, cela signifie que la $m^{\text{ième}}$ valeur de z n'a pas été observée, et donc que l'on peut réduire $\boldsymbol{\theta}$ d'une ligne entière, puisqu'alors la probabilité d'observer une quelconque valeur de x sachant que z prend la valeur m est nulle.

En définitif, on peut s'affranchir de l'hypothèse implicite qu'aucune composante de π ni de θ n'est nulle. En effet, si tel est le cas, alors la probabilité d'observer une telle observation est nulle.

1.3 Conclusion

On remarque donc que l'estimateur de π n'est rien d'autre que la moyenne empirique des observations de z, et que l'estimateur de θ est également la moyenne des observations de x pour une valeur de z donnée.

2 Linear classification

2.1 Generative model: Linear Discriminant Analysis

Supposons un échantillon de N observations de x, y, notées, (x_n, y_n) , pour n variant de 1 à N, où $y_n \in \{0, 1\}$. Etant donné le modèle suivant :

$$y \sim Bernoulli(\pi)$$
$$p(x|y=i) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\det\Sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_i)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(x-\mu_i)\right)$$

paramétré par :

$$\Theta = (\mu_0, \mu_1, \Sigma, \pi)$$

on peut réecrire la probabilité d'observer (x_n, y_n) sous la forme comprenant déjà la contrainte sur π :

$$p(x_n, y_n) = (\pi p(x_n | y_n = 1))^{y_n} ((1 - \pi) p(x_n | y_n = 0))^{1 - y_n}$$
(7)

ce qui permet de déterminer la log-vraisemblance de l'échantillon composé de N observations i.i.d dans le modèle Θ en utilisant (7):

$$\ell(\Theta) = \sum_{n=1}^{N} \ln(p(x_n, y_n; \Theta))$$

$$\ell(\Theta) = \sum_{n=1}^{N} \ln\left((\pi p(x_n | y_n = 1))^{y_n} ((1 - \pi) p(x_n | y_n = 0))^{1 - y_n}\right)$$

$$\ell(\Theta) = \sum_{n=1}^{N} \left(y_n \left(\ln\left(\frac{\pi}{2\pi\sqrt{\det\Sigma}}\right) - \frac{1}{2}(x_n - \mu_1)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(x_n - \mu_1)\right)\right)$$

$$+ \sum_{n=1}^{N} \left((1 - y_n) \left(\ln\left(\frac{1 - \pi}{2\pi\sqrt{\det\Sigma}}\right) - \frac{1}{2}(x_n - \mu_0)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(x_n - \mu_0)\right)\right)$$

$$\ell(\Theta) = \sum_{n=1}^{N} \left(y_n \left(\ln\pi - \ln(2\pi) - \frac{1}{2}\ln\det\Sigma - \frac{1}{2}(x_n - \mu_1)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(x_n - \mu_1)\right)\right)$$

$$+ \sum_{n=1}^{N} \left((1 - y_n) \left(\ln(1 - \pi) - \ln(2\pi) - \frac{1}{2}\ln\det\Sigma - \frac{1}{2}(x_n - \mu_0)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(x_n - \mu_0)\right)\right)$$

 $\ell(\Theta)$ est donc une fonction stricement concave en π par stricte concavité du logarithme, en μ_0 et μ_1 par stricte concavité de l'opposé d'une forme quadratique (avec les valeurs propres de Σ strictement positives), et en Σ par convextié du logdet. Le problème de maximisation $\ell(\Theta)$ admet une solution unique, notée $(\widehat{\mu_{0,MLE}},\widehat{\mu_{1,MLE}},\widehat{\Sigma_{MLE}},\widehat{\pi_{MLE}})$ que l'on trouve par dérivation de (8).

2.1.1 Par rapport à π

2.1.2 Par rapport à μ_0