MVA, Projet PGM : Rapport
Factorial HMM

Théis Bazin Valentin De Bortoli Élie Michel

3 janvier 2017

1 Présentation du modèle

1.1 Comparaison avec HMM

Le but de ce rapport est de présenter le modèle *Factorial HMM*, extension du modèle HMM, *Hidden Markov Model*. Ce dernier suppose qu'une variable aléatoire cachée, dont l'évolution temporelle est régie par une chaine de Markov homogène, est à l'origine d'une observation. Le modèle que l'on se propose d'étudier ici met en parallèle M chaînes de Markov homogènes et indépendantes qui sont à l'origine d'une observation. Ce modèle décrit bien à des situations d'évolution temporelle dans lesquelles plusieurs facteurs indépendants entrent en jeu. L'espace d'état de chaque variable cachée est supposé être le même et est fini de cardinal K. On pourrait tenter de regrouper les variables cachées en une seule variable et considérer le modèle HMM connu. Ce modèle n'est pas satisfaisant pour deux raisons :
— l'espace d'état de cette unique variable cachée est alors de cardinal K^M, on arrive rapidement aux limites numériques des ordinateurs.
— l'information sur l'indépendance des variables cachées est perdue.
Ces deux remarques justifient l'intérêt et la complexité de Factorial HMM.

1.2 Graphe associé et inférence

Compte tenu de la proximité entre le modèle Factorial HMM et HMM il est naturel de se poser la question de l'inférence et de la possibilité de construire un algorithme pour apprendre les paramètres du modèle. Dans ce but, on présente le graphe de Factorial HMM. Ce graphe permet de nouveau de mettre en évidence la complexité du nouveau modèle.

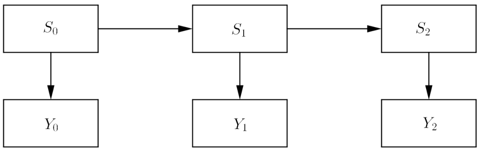


Figure 1 – Modèle HMM

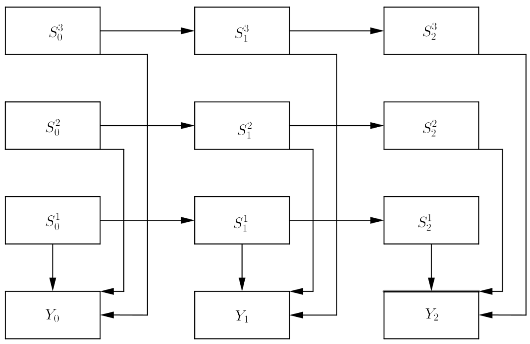


Figure 2 – Modèle Factorial HMM

Dans le cas de Factorial HMM on perd la structure d'arbre. Néanmoins, on peut développer un algorithme semblable à celui développé dans HMM qui permet de calculer exactement les marginales des probabilités se factorisant sur le graphe. Il est alors possible de résoudre exactement E-step dans un algorithme *Expectation-Maximization*, EM. Néanmoins, cet algorithme exact n'est pas satisfaisant pour un nombre de chaînes important. On se tourne alors vers trois méthodes d'approximation :
— l'échantillonnage de Gibbs
— *mean-fields*
— *structured mean-fields*

Toutes ces méthodes ont été implémentées et testées sur des données génératives.

1.3 Notations

On fixe ici les notations qui seront utilisées dans toute la suite de notre rapport.

$T \in \mathbb{N}$	temps de la dernière observation
$M \in \mathbb{N}^*$	nombre de chaînes de Markov
$\Delta_K = \{X \in \{0,1\}^K, \sum_{k=1}^{K} X_k = 1\}$	espace d'état des variables cachées
$D \in \mathbb{N}^*$	dimension des variables observées
$(\Pi_k^m)_{(m,k)\in [\![1,M]\!]\times[\![1,K]\!]} \in [0,1]^{MK}$	mesures de probabilité initiales pour chaque chaîne de Markov
$(A_{k_1,k_2}^m)_{(m,k_1,k_2)\in [\![1,M]\!]\times[\![1,K]\!]^2} \in [0,1]^{MK^2}$	matrices de transition pour chaque chaîne de Markov
$C \in \mathcal{S}_D^{++}(\mathbb{R})$	matrice de covariance
$(W_{x,k}^m)_{(m,x,k)\in [\![1,M]\!]\times[\![1,D]\!]\times[\![1,K]\!]} \in \mathbb{R}^{MDK}$	matrices d'influence des variables cachées sur les variables observées
$(S_t^m)_{(m,t)\in [\![1,M]\!]\times[\![0,T]\!]} \in \Delta_K^{(T+1)\times M}$	variables cachées
$(Y_t)_{t\in[\![0,T]\!]} \in \mathbb{R}^D$	variables observées

Les différentes contraintes (sommation à 1) sur les mesures de probabilité n'ont pas été rappelées ici. Pour plus de simplicité on notera $Y_{(t)}$ le vecteur $(Y_t)_{t\in[\![0,T]\!]}$, $Y_{(-t)}$ le vecteur $(Y_t)_{t\in[\![0,T]\!]\setminus\{t\}}$, $Y_{(t_1,t_2)}$ le vecteur $(Y_t)_{t\in[\![t_1,t_2]\!]}$. Ces notations s'étendent aux variables cachées. Enfin on notera $\theta = (\Pi, A, C, W)$ le vecteur de paramètres.

2 Le problème d'inférence et l'algorithme EM

2.1 Algorithme EM

Soit p une mesure de probabilité qui se factorise selon Factorial HMM. On a alors :

$$\begin{aligned} p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)}|\theta) = &\prod_{m=1}^{M}\prod_{k=1}^{K}(\Pi_k^m)^{(S_0^m)_k}\prod_{t=1}^{T}\prod_{m=1}^{M}\prod_{k_1=1}^{K}\prod_{k_2=1}^{K}(A_{k_1,k_2}^m)^{(S_t^m)_{k_2}(S_{t-1}^m)_{k_1}} \\ &\prod_{t=0}^{T}\frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\frac{1}{|C|^{1/2}}\exp\left(-1/2^t\left(Y_t - \sum_{m=1}^{M}W^m S_t^m\right)C^{-1}\left(Y_t - \sum_{m=1}^{M}W^m S_t^m\right)\right) \end{aligned} \tag{1}$$

De manière analogue au cas HMM ou Gaussian mixture il n'est pas facile de calculer $p(Y_{(t)})$. L'algorithme EM est une méthode itérative qui permet de considérer seulement la probabilité jointe 1 dont la forme est facile à manipuler. L'idée est la suivante :

$$\begin{aligned} p(Y_{(t)}) &= \int_{S_{(t)}^{(m)}} p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)}) \\ &= \int_{S_{(t)}^{(m)}} \frac{p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)})}{q(S_{(t)}^{(m)})} q(S_{(t)}^{(m)}) \\ &= \mathbb{E}_q\left(p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)})\right) \end{aligned} \tag{2}$$

Si on considère la log-vraisemblance on peut utiliser l'inégalité de Jensen et on obtient :

$$\begin{aligned} l(Y_{(t)}, \theta) &= \log(p(Y_{(t)}) \\ &= \log\left(\mathbb{E}_q\left(\frac{p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)})}{q(S_{(t)}^{(m)})}\right)\right) \quad \geq \mathcal{L}(Y_{(t)}, \theta, q) \end{aligned} \tag{3}$$

Avec $\mathcal{L}(Y_{(t)}, \theta, q) = \mathbb{E}_q \log\left(p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)})\right) + H(q)$ où $H(q)$ est l'entropie de q. Il s'agit alors de maximiser cette log-vraisemblance approchée en q et en θ. La maximisation à θ fixé implique

$$\hat{q} = p(S_{(t)}^{(m)}|\theta, Y_{(t)}^{(m)}) \tag{4}$$

Une autre conséquence est l'égalité suivante :

$$\mathcal{L}(Y_{(t)}, \theta, \hat{q}) = l(Y_{(t)}, \theta) \tag{5}$$

L'algorithme consiste à appliquer un algorithme de Gauss-Seidel avec contraintes sur la log-vraisemblance approchée, les deux variables considérées étant q [1] et θ. On distingue ainsi deux étapes :

— E-STEP : $q_{n+1} = p(S_{(t)}^{(m)} | \theta_n, Y_{(t)}^{(m)})$

— M-STEP : maximisation de $\mathbb{E}_{q_n}\left(\log\left(p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)}|\theta)\right)\right)$

Les conditions initiales n'ont pas été discutées ici. Néanmoins elles jouent un rôle crucial dans cet algorithme au comportement très local. En effet, très peu de résultats assurent la convergence théorique de cet algorithme vers un maximum local. Dans [2], les auteurs montrent que sous certaines conditions on a l'assurance de la convergence vers un point stationnaire. Les conditions de maximalité sont plus dures à obtenir. Il est cependant important de remarquer que 5 assure une croissance de la log-vraisemblance à chaque étape de l'algorithme.

2.2 M step

On détaille désormais l'étape M-STEP de notre algorithme. On rappelle qu'il s'agit de maximiser $\mathcal{L}_{approx}(\theta) = \mathbb{E}_{q_n}\left(\log\left(p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)}|\theta)\right)\right)$. La maximisation selon $(\Pi_k^m)_{(m,k)\in[\![1,M]\!]\times[\![1,K]\!]}$ (respectivement selon $(A_{k_1,k_2}^m)_{(m,k_1,k_2)\in[\![1,M]\!]\times[\![1,K]\!]^2})$ pouvant se faire indépendamment des autres variables, on obtient après utilisation des multiplicateurs de Lagrange [2].

$$\widehat{\Pi_k^m} = q_n((S_0^m)_k = 1) \tag{6}$$

De même on obtient.

$$\widehat{A_{k_1,k_2}^m} = \frac{\sum_{t=1}^{T} q_n((S_{t-1}^m)_{k_1} = 1, (S_t^m)_{k_2} = 1)}{\sum_{t=1}^{T} q_n((S_{t-1}^m)_{k_1} = 1)} \tag{7}$$

Pour la suite, on note $W \in \mathcal{M}_{DM,K}(\mathbb{R})$ la matrice obtenue en concaténant les matrices $(W_m)_{m\in[\![1,M]\!]}$. De la même manière on note S_t le vecteur obtenu en concaténant tous les vecteurs $(S_t^m)_{m\in[\![1,M]\!]}$. Il s'agit alors de maximiser en (W, C) la fonction suivante $\mathcal{L}'(W,C) = \mathbb{E}_{q_n}\left(-\frac{T+1}{2}\log(|C|) - \frac{1}{2}{}^t\left(Y_t - WS_t\right)C^{-1}\left(Y_t - WS_t\right)\right)$. Cette étude est classique (maximisation des paramètres pour la log-vraisemblance d'une gaussienne) et les calculs ont déjà été effectués à plusieurs reprises. On rappelle simplement que la maximisation se fait d'abord sur W, l'argument maximum ne dépendant pas de C on peut facilement réinjecter dans $\widehat{W}$ dans $\mathcal{L}'(\widehat{W}, C)$ et optimiser selon C [3]. On obtient les expressions suivantes :

$$\widehat{W} = \left(\sum_{t=0}^{T} Y_t \times \mathbb{E}_{q_n}({}^tS_t)\right)\left(\sum_{t=0}^{T}\mathbb{E}_{q_n}\left(S_t{}^tS_t\right)\right)^{+} \tag{8}$$

Où M^+ est la pseudo-inverse de Moore-Penrose. On a ici utilisé le fait que la pseudo-inverse de Moore-Penrose donne une solution au problème des moindres carrés CITER. La maximisation selon C^{-1} donne :

$$\widehat{C} = \frac{1}{T+1}\sum_{t=0}^{T} Y_t{}^tY_t - \frac{1}{T+1}\sum_{t=0}^{T}\sum_{m=1}^{M} W^m \mathbb{E}_{q_n}(S_t^m)^t Y_t \tag{9}$$

On remarque que les mises à jour données par M-STEP dépendent de E-STEP uniquement pour le calcul de trois quantités :

— $\forall (t,m) \in [\![0,T]\!] \times [\![1,M]\!],\ \mathbb{E}_{q_n}(S_t^m)$

— $\forall (t,m_1,m_2) \in [\![0,T]\!] \times [\![1,M]\!]^2,\ \mathbb{E}_{q_n}(S_t^{m_1} S_t^{m_2})$

— $\forall t \in [\![1,T]\!] \times [\![1,M]\!],\ \mathbb{E}_{q_n}(S_{t-1}^m S_t^m)$

On rappelle que les multiplications considérées ici le sont élément par élément. Il s'agit donc de calculer ces trois quantités afin de pouvoir les réinjecter dans M-STEP. Pour cela, on considère une méthode d'inférence exacte deux méthodes d'inférences variationnelles et une méthode d'échantillonnage.

1. q peut être vue comme une mesure de probabilité mais d'un point de vue optimisation on considère q comme une variable de $[0,1]^{K^M}$

2. Le fait que l'on travaille sur des ouverts, i.e Π_k^m et A_{k_1,k_2}^m ne s'annulent jamais, n'est pas détaillé ici. Cette propriété est issue de la divergence du logarithme en 0

3. En réalité on optimise selon C^{-1} qui donne une expression plus facile à manipuler

3 E step

3.1 Inférence exacte

Pour présenter cet algorithme il est bon d'avoir à l'esprit les calculs effectués lors de la récurrence alpha-beta de HMM. Les calculs sont très semblables. Le problème est ici plus complexe puisque l'on n'a plus une chaîne de Markov mais M. On pose :

$$\begin{cases} \alpha_t = p(S_t^1, \ldots, S_t^M, Y_{(1,t)}|\theta) \\ \forall m \in [\![1, M]\!],\ \alpha_t^m = p(S_{t-1}^1, \ldots, S_{t-1}^m, S_t^{m+1}, \ldots, S_t^M, Y_{(1,t-1)}|\theta) \\ \beta_t = p(Y_{(t+1,T)}|S_t^1, \ldots, S_t^M, \theta) \\ \forall m \in [\![1, M]\!],\ \beta_t^m = p(Y_{(t,T)}|S_t^1, \ldots, S_t^m, S_{t-1}^{m+1}, \ldots, S_{t-1}^M, \theta) \end{cases} \tag{10}$$

On remarque que :

$$\begin{cases} \forall t \in [\![1, T]\!],\ \alpha_{t-1} = \alpha_t^M \\ \forall t \in [\![0, T]\!],\ \beta_t = \beta_t^0 \end{cases} \tag{11}$$

Quatre autres équations permettent de compléter la récurrence :

$$\begin{cases} \alpha_t = p(Y_t|S_t^{(m)}, \theta)\alpha_t^0 \\ \forall m \in [\![0, M-1]\!],\ \alpha_t^m = \sum\limits_{S_{t-1}^{m+1}} p(S_t^{m+1}|S_{t-1}^{m+1}, \theta)\alpha_t^{m+1} \\ \beta_{t-1}^M = P(Y_t\ |S_t^{(m)}, \theta)\beta_t \\ \forall m \in [\![0, M-1]\!],\ \beta_t^m = \sum\limits_{S_{t+1}^{m+1}} p(S_{t+1}^{m+1}|S_t^{(m+1)}, \theta)\beta_t^{m+1} \end{cases} \tag{12}$$

On obtient le schéma suivant :

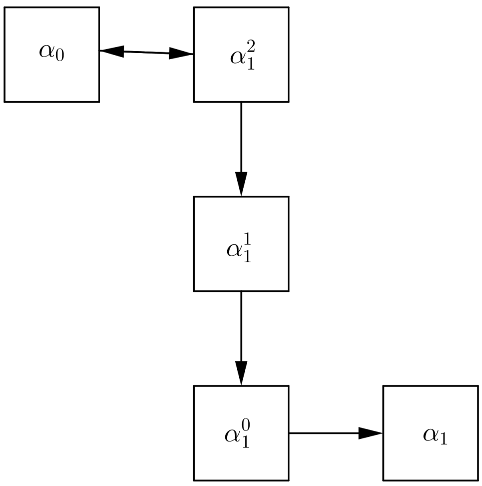


FIGURE 3 – Récurrence sur α

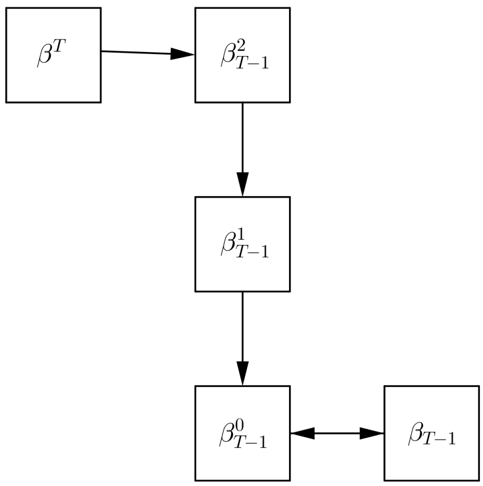


FIGURE 4 – Récurrence sur β

On peut alors calculer γ_t de la manière suivante :

$$\gamma_t = p(S_t|Y_{(t)}, \theta) = \frac{\alpha_t \beta_t}{\sum\limits_{S_t} \alpha_t \beta_t} \tag{13}$$

Il convient alors de calculer les trois quantités issues de M-STEP :
— $\mathbb{E}_{q_n}(S_t^m) = \sum\limits_{S_t^n,\ n \neq m} \gamma_t$
— $\mathbb{E}_{q_n}(S_t^{m_1} S_t^{m_2}) = \sum\limits_{S_t^n,\ n \neq m_1,\ n \neq m_2} \gamma_t$

— $\mathbb{E}_{q_n}(S_{t-1}^m S_t^m) = \dfrac{\sum\limits_{S_{t-1}^n, S_t^r,\ n\neq m,\ r\neq m} \alpha_{t-1} p(S_t|S_{t-1}) p(Y_t|S_t)\beta_t}{\sum\limits_{S_{t-1},S_t} \alpha_{t-1} p(S_t|S_{t-1}) p(Y_t|S_t)\beta_t}$

Il est important de préciser que les formules données sont exactes seulement lorsqu'elles sont appliquées en un point. En effet, $\alpha_t, \beta_t, \gamma_t$ sont des éléments de $\mathbb{R}^{[\![1,K]\!]^M}$. Pour plus de détails sur le sens de ces formules on renvoie à l'implémentation en Python de cet algorithme https ://github.com/eliemichel/fHMM.

3.2 Échantillonnage de Gibbs

L'inférence exacte peut être très assez couteuse en terme d'opérations ($\mathcal{O}(TMK^{M+1})$). L'algorithme d'échantillonnage de Gibbs fournit lui un moyen d'échantillonner approximativement selon $p(S_{(t)}^{(m)}|Y_{(t)}, \theta)$ mais de manière rapide. En effet, l'échantillonnage de Gibbs peut être vu comme un cas particulier de *Monte Carlo Markov Chain*, pour laquelle la convergence en probabilité est assurée. Néanmoins, on ne possède pas d'information sur la vitesse de convergence de ces algorithmes vers la probabilité voulue. Le choix des auteurs de [1] a été de ne pas prendre en compte le temps de mise en route de l'échantillonneur de Gibbs et de directement sélectionner les premiers échantillons produits par l'algorithme. Ce choix sera discuté par la suite. On précise le déroulement de l'échantillonnage :

— les différents états $S_{(t)}^{(m)}$ sont initialisés selon une loi uniforme sur $[\![1, K]\!]$.

— les états $S_0^{(m)}$ sont mis à jour de manière successive (d'abord S_0^1 tiré selon $p(S_0^1|Y_0, S_1^1, S_0^{(-1)}$, puis S_0^2 tiré selon $p(S_0^2|Y_0, S_1^2, S_0^{(-2)})$.

— les états $S_t^{(m)}$ sont mis à jour de manière successive pour $t \in [\![1, T$

— on extrait l'échantillon. Les opérations sont répétées N_s fois à partir de la seconde étape pour obtenir autant d'échantillons de Gibbs.

On détaille simplement le calcul de la probabilité pour $t \in [\![1, T-1]\!]$ (les autres calculs sont similaires).

$$\begin{aligned} p(S_t^m|Y_t, S_{(t)}^{(m)}\backslash S_t^m) &= \frac{1}{Z_1} p(S_t^m, S_{(-t)}^m, S_t^{(-m)}, Y_t) \\ &= \frac{1}{Z_2} p(Y_t|S_t^m, S_t^{(-m)}) p(S_t^m|S_{t-1}^m) p(S_{t+1}^m|S_t^m) \end{aligned} \tag{14}$$

La constante Z_2 est facilement calculable en sommant en notant que $\sum\limits_{S_t^m} p(S_t^m|Y_t, S_{(t)}^{(m)}\backslash S_t^m) = 1$.

3.3 Approche variationnelle complètement factorisée

Un des problèmes de l'échantillonnage de Gibbs est l'absence de résultats concernant la vitesse convergence des algorithmes MCMC. Celle-ci peut être très lente, comme on le verra dans 4.1.3. On présente ici une autre approche. On ne va pas chercher à calculer la probabilité $p(S_t^m|Y_{(t)})$ (résolution exacte de E-STEP) mais plutôt à l'approcher via une autre mesure de probabilité plus simple à calculer. En effet, on rappelle que l'algorithme EM procède à une descente coordonnée par coordonnée. La descente selon la mesure de probabilité est facile à calculer et donne $p(S_{(t)}^{(m)}|Y_{(t)}$. Imposons maintenant la contrainte que tous les états $S_{(t)}^{(m)}$ sont indépendants et reprenons l'étape E-STEP de EM. Ce procédé s'appelle *mean-field*, MEAN-FIELD (ou approche variationnelle complètement factorisée). On a :

$$\begin{aligned} \log(p(Y_{(t)})) - \mathcal{L}(Y_{(t)}, \theta, q) &= \mathbb{E}_q \log\left(\frac{p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)})}{q(S_{(t)}^{(m)})}\right) \\ &= \mathbb{E}_q \log(p(Y_{(t)})) - \mathbb{E}_q \log\left(\frac{p(S_{(t)}^{(m)}, Y_{(t)})}{q(S_{(t)}^{(m)})}\right) \\ &= \mathbb{E}_q \log\left(\frac{q(S_{(t)}^{(m)})}{p(S_{(t)}^{(m)}|Y_{(t)})}\right) \\ &= \mathrm{KL}(q\|\hat{q}) \end{aligned} \tag{15}$$

Où KL est la divergence de Kullback-Leiber. Cette quantité est positive et vaut zéro seulement si $q = \hat{q}$. On veut donc minimiser cette divergence. Sans contrainte on retrouve $\hat{q}$ (E-STEP exacte). Maintenant ajoutons la contrainte que tous les états sont indépendants. q est alors de la forme :

$$q(S_{(t)}^{(m)}) = \prod_{t=0}^{T}\prod_{m=1}^{M}\prod_{k=1}^{K}\left(\theta_{t,k}^{m}\right)^{S_{t,k}^{m}} \tag{16}$$

Avec :

$$\forall (t,m) \in [\![0,T]\!] \times [\![1,M]\!],\ \sum_{k=1}^{K}\theta_{t,k}^{m} = 1 \tag{17}$$

On va alors opérer une descente de gradient coordonnée par coordonnée. JUSTIFICATION. La distance de Kullback-Leiber est de la forme suivante (on note $\theta_t^m = (\theta_{t,k}^m)_{k\in[\![1,K]\!]}$ et la fonction logarithme sur un vecteur correspond au logarithme sur chacune des coordonnées) :

$$\begin{aligned}
\mathrm{KL}(q\|\hat{q}) = &\sum_{t=0}^{T}\sum_{m=1}^{M} {}^t\theta_t^m \log(\theta_t^m) + \\
\frac{1}{2}\sum_{t=0}^{T}&\left({}^tY_t C^{-1} Y_t - 2\sum_{m=1}^{M} {}^tY_t C^{-1} W^m \theta_t^m + \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1,n\neq m}^{M} \mathrm{Tr}\left({}^tW^m C^{-1} W^n \theta_t^n {}^t\theta_t^m\right) + \sum_{m=1}^{M}\mathrm{Tr}\left({}^tW^m C^{-1} W^m \mathrm{diag}(\theta_t^m)\right)\right) \\
&- \sum_{m=1}^{M} {}^t\theta_1^m \log(\Pi^m) - \sum_{t=1}^{T}\sum_{m=1}^{M}\mathrm{Tr}\left({}^t\theta_{t-1}^m \theta_t^m \log(A^m)\right) - \log(Z_q) - \log(Z_{\hat{q}})
\end{aligned} \tag{18}$$

Où diag est l'opérateur qui a un vecteur associe la matrice dont les coefficients diagonaux sont les composantes du vecteur et Z_q et $Z_{\hat{q}}$ les normalisations des probabilités q et $\hat{q}$. On dérive par rapport à θ_t^m et on obtient :

$$\frac{\partial KL}{\partial \theta_t^m} = \log(\theta_t^m) - {}^tW^m C^{-1} Y_t + \mathop{}_{n=1,n\neq m}^{M} {}^tW^m C^{-1} W^n \theta_t^n + \frac{1}{2}\Delta^m - \log(A^m)\theta_{t-1}^m - {}^t\log(A^m)\theta_{t+1}^m + c \tag{19}$$

Où Δ^m est le vecteur des coefficients diagonaux de ${}^TW^m C^{-1} W^m$ et c un vecteur colinéaire à $(1,\dots,1)$. Il est à noter que cette équation n'est valable que pour $t \in [\![1, T-1]\!]$. En égalant à 0 et en isolant θ_t^m on obtient :

$$\begin{cases}
\widehat{\theta_0^m} \propto \exp\left({}^tW^m C^{-1} Y_0 - \sum_{n=1,n\neq m}^{M} {}^tW^m C^{-1} W^n \theta_0^n - \frac{1}{2}\Delta^m + {}^t\log(A^m)\theta_1^m + \log(\Pi^m)\right) \\
\forall t \in [\![1, T-1]\!],\ \widehat{\theta_t^m} \propto \exp\left({}^tW^m C^{-1} Y_t - \sum_{n=1,n\neq m}^{M} {}^tW^m C^{-1} W^n \theta_t^n - \frac{1}{2}\Delta^m + \log(A^m)\theta_{t-1}^m + {}^t\log(A^m)\theta_{t+1}^m\right) \\
\widehat{\theta_T^m} \propto \exp\left({}^tW^m C^{-1} Y_T - \sum_{n=1,n\neq m}^{M} {}^tW^m C^{-1} W^n \theta_T^n - \frac{1}{2}\Delta^m + \log(A^m)\theta_{T-1}^m\right)
\end{cases} \tag{20}$$

il convient de remarquer que ces équations sont des relations de proportionnalité et non de véritables égalités. Ici on applique l'algorithme de descente coordonnée par coordonnée sous contrainte. On projette donc à chaque étape de minimisation sur la sous-variété définie par les contraintes. Autrement dit, on fixe la constante de proportionnalité de telle sorte à ce que θ_t^m soit une mesure de probabilité. Les nombres que l'on manipule peuvent être très petits (proches de l'erreur machine). Pour éviter ce problème on fait tous les calculs en considérant le logarithme de θ_t^m. On passe à l'exponentielle pour la dernière étape seulement.

3.4 Approche variationnelle structurée

On présente enfin une dernière approche, l'approche variationnelle structurée qui permet de prendre en compte la structure de Factorial HMM qui avait été perdu dans l'approche complètement factorisée. Ce nouveau modèle se nomme *structured mean field*. Au lieu de considérer les variables cachées toutes indépendantes on considère M chaînes de Markov indépendantes. Le modèle devient alors :

$$q(S_{(t)}^{(m)}) = \frac{1}{Z_q}\prod_{m=1}^{M}\prod_{k=1}^{K}\left(h_{1,k}^m \Pi_k^m\right)^{S_{0,k}^m}\prod_{t=1}^{T}\prod_{k_1=1}^{K}\left(h_{t,k_1}^m \prod_{k_2=1}^{K}\left(A_{k_2,k_1}^m\right)^{S_{t-1,k_2}^m}\right)^{S_{t,k_1}^m} \tag{21}$$

On remarque que cette probabilité peut très facilement s'écrire sous la forme d'une famille exponentielle de probabilités. DONNER CARAC. On peut reprendre les calculs effectués précédemment et on obtient :

$$\mathrm{KL}(q\|\hat{q}) = \sum_{t=0}^{T}\sum_{m=1}^{M}\langle S_t^m\rangle \log(h_t^m) + \frac{1}{2}\sum_{t=0}^{T}\left({}^tY_tC^{-1}Y_t - 2\sum_{m=1}^{M}{}^tY_tC^{-1}W^m\langle S_t^m\rangle + \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1,n\neq m}^{M}\mathrm{Tr}\left({}^tW^mC^{-1}W^n\langle S_t^n\rangle^t\langle S_t^m\rangle\right)\right.$$
$$\left.+\sum_{m=1}^{M}\mathrm{Tr}\left({}^tW^mC^{-1}W^n\mathrm{diag}(\langle S_t^m\rangle)\right)\right) - \log(Z_q) - \log(Z) \tag{22}$$

Il est important de signaler que les espérances calculées dans les crochets le sont vis à vis de la mesure de probabilité q. Puisqu'on a une famille exponentielle on sait que :

$$\frac{\partial \log(Z_q)}{\partial \log h_t^m} = \langle S_t^m\rangle \tag{23}$$

Donc l'étape de dérivation par rapport à $\log(h_\tau^)$ donne :

$$\frac{\partial \mathrm{KL}}{\partial \log(h_\tau^l} = \langle S_t^l\rangle + \sum_{t=0}^{T}\sum_{m=1}^{M}\left(\log(h_t^m) - {}^tW^mC^{-1}Y_t + \sum_{n=1,n\neq m}^{M}{}^tW^mC^{-1}W^n\langle S_t^n\rangle + \frac{1}{2}\Delta^m\right)\frac{\partial\langle S_t^m\rangle}{\partial \log(h_\tau^m}) - \langle S_\tau^l\rangle \tag{24}$$

Où Δ^m est défini comme dans le modèle complètement factorisé. On obtient donc, en annulant le terme à l'intérieur de la somme :

$$\forall t \in [\![0, T]\!],\ \hat{h_t^m} = \exp\left({}^tW^mC^{-1}\left(Y_t - \sum_{n=1,n\neq m}^{M}W^n\right) - \frac{1}{2}\Delta^m\langle S_t^n\rangle\right) \tag{25}$$

Formulons quelques remarques. Dans l'approche MEAN-FIELD, les différentes quantités étaient approchées coordonnée par coordonnée. Ici, ce couplage est caché dans les espérances $\langle S_t^n\rangle$ qui doivent être calculées avec un algorithme de type *message-passing*. Dans le modèle précédent ces quantités étaient très simples à calculer et les interdépendances apparaissaient via les matrices de transition. Il est à préciser qu'ici les quantités A^m et Π^m n'apparaissent plus. Cela est dû à la forme du modèle. On donne les formes des messages à faire passer durant l'algorithme en commençant par les messages *forward* :

$$\begin{cases} \mu_{0\to 1}^m(S_1^m) = \sum_{S_0^m} h_{0,S_0^m}\Pi_{S_0^m}^m A^m(S_0^m, S_1^m) \\ \forall t \in [\![1, T-1]\!],\ \mu_{t\to t+1}^m(S_{t+1}^m) = \sum_{S_t^m} h_{t,S_t^m}A_{S_t^m,S_{t+1}^m}^m \mu_{t-1\to t}(S_t^m) \end{cases} \tag{26}$$

On donne ensuite la forme des messages *backward* :

$$\begin{cases} \mu_{T\to T-1}^m(S_{T-1}^m) = \sum_{S_T^m} h_{T,S_T^m}A^m(S_{T-1}^m, S_T^m) \\ \forall t \in [\![1, T-1]\!],\ \mu_{t\to t-1}^m(S_{t-1}^m) = \sum_{S_t^m} h_{t,S_t^m}A_{S_{t-1}^m,S_t^m}^m \mu_{t+1\to t}(S_t^m) \end{cases} \tag{27}$$

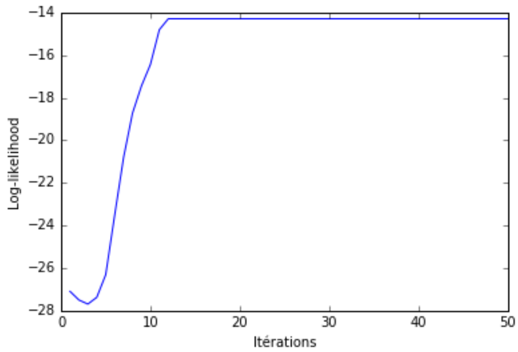
4 Résultats

On présente ici les résultats de l'implémentation de ces différents modèles. On va d'abord présenter l'évolution de la log-vraisemblance au cours de l'algorithme EM.

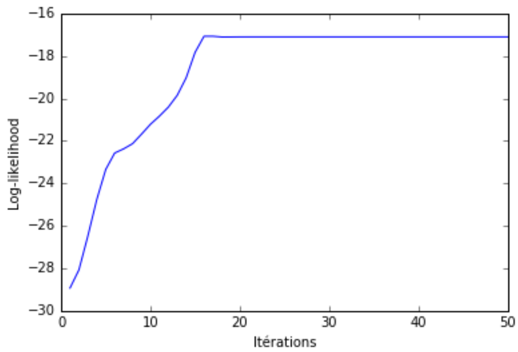
4.1 Évolution de la log-vraisemblance

4.1.1 Inférence exacte

Pour tester nos différentes implémentations on trace l'évolution de la log-vraisemblance au cours des itérations de EM. Celle-ci doit être strictement croissante. Les tests ont été effectués avec une mesure de probabilité initiale choisie aléatoirement, une matrice d'influence des variables cachées sur les variables observées choisie aléatoirement et une matrice de transition choisie aléatoirement. Le nombre d'états est fixé à $K = 2$ pour ce test. Le nombre de chaînes superposées est fixé à $M = 3$. L'espace des variables observées est de dimension $D = 2$ et le nombre d'observations est fixé à $T = 10$. Pour l'inférence exacte on teste deux possibilités. Dans un premier temps on se place dans le cadre HMM connu avec un espace d'états de taille K^M.



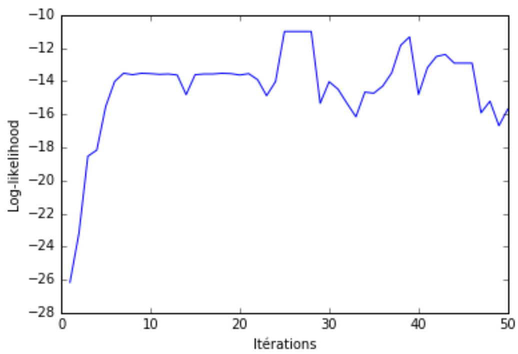
On teste ensuite l'inférence exacte pour le modèle FACTORIAL HMM.



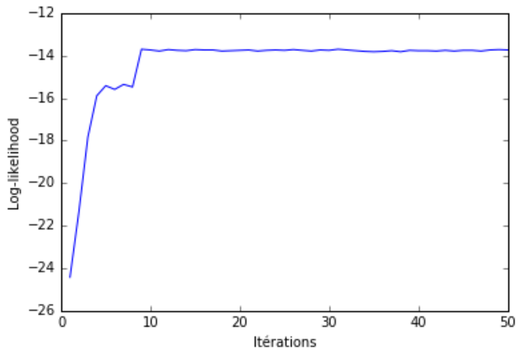
Dans les deux cas on observe une stricte croissance de la log-vraisemblance

4.1.2 Échantillonnage de Gibbs

Dans [1] les auteurs utilisent l'échantillonnage de Gibbs en ne considérant pas de période de *burning*, aucun échantillon n'est rejeté. Les auteurs justifient cette approche par leur volonté de comparer les approches variationnelles avec un échantillonnage de Gibbs même loin de la convergence (cet échantillonnage est appelé échantillonnage de Gibbs impatient). Les tests d'apprentissage sont toujours effectués avec les mêmes paramètres aléatoires. Ici on observe l'évolution de la log-vraisemblance avec l'approche décrite dans l'article [1]. L'étape de *burning* n'est pas prise en compte et aucun échantillon n'est rejeté. Ici le nombre d'échantillons est posé à $N_s = N_r = 10$ où N_r est le nombre d'échantillons créé et N_s le nombre d'échantillons conservé.



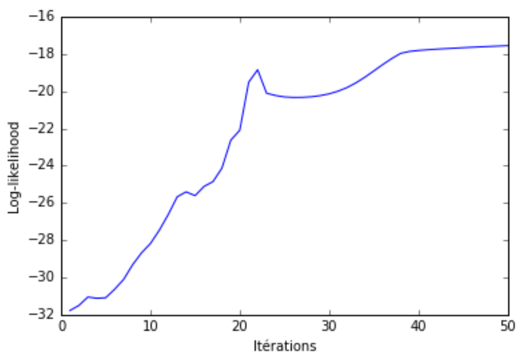
Bien qu'on observe une tendance croissante et une stabilisation de la log-vraisemblance on conserve une grande variabilité. Une solution pour tenter d'échantillonner de manière correcte et donc de mieux vérifier la propriété de croissance est d'introduire du *burning* dans l'échantillonnage de Gibbs. Ici, on a créé $N_r = 30$ échantillons et on en conserve $N_s = 10$.



On constate que les propriétés de croissance sont meilleures (même si des oscillations restent présentes). Néanmoins, on paye cher l'augmentation du nombre d'échantillons créés puisque l'algorithme devient bien plus lent que l'inférence exacte (avec notre nombre d'états et la taille de l'espace d'états, il est évident que si K et M sont plus grands cet échantillonnage restera plus rapide que l'inférence exacte). Or le but de l'échantillonnage de Gibbs est justement d'éviter d'avoir à passer par une inférence exacte assez lente pour des valeurs élevées de M et K.

4.1.3 Approche variationnelle complètement factorisée

Comme décrit précédemment une autre approche du problème consiste à ne pas essayer d'échantillonner selon la mesure $p(S_{(t)}^{(m)}|Y_{(t)})$ mais selon une mesure de probabilité qui s'en approche soumise à des contraintes. La contrainte retenue dans le modèle MEAN-FIELD est l'indépendance entre les variables cachées. On rappelle brièvement qu'il convient ensuite de minimiser la divergence de Kullback-Lieber entre la probabilité $p(S_{(t)}^{(m)}|Y_{(t)})$ et les probabilités qui se factorisent dans ce nouveau graphe. La minimisation de cette divergence se fait de manière itérative en opérant une descente selon chaque coordonnée. Les auteurs de [1] remarque que la convergence est très rapide ($N_{it} < 10$ avec N_{it} le nombre d'itérations. On observe l'évolution suivante pour la log-vraisemblance avec $n_{it} = 5$.



Le fait que cette log-vraisemblance ne soit pas strictement croissante est justifiée par le fait que la log-vraisemblance est ici une log-vraisemblance approchée puisque la mesure de probabilité considérée n'est plus $p(S_{(t)}^{(m)}|Y_{(t)})$.

Références

[1] Zoubin Ghahramani and Michael I Jordan. Factorial hidden markov models. *Machine learning*, 29(2-3) :245–273, 1997.

[2] CF Jeff Wu. On the convergence properties of the em algorithm. *The Annals of statistics*, pages 95–103, 1983.