Навчання без вчителя. Комп'ютерне завдання

Святослав Хмелевський, ФІ-82

27 вересня 2021 р.

Завдання: Припустимо, що бінарні зображення моделюються матрицею незалежних випадкових величин, що мають розподіл Бернуллі з невідомими (та в загальному випадку різними) параметрами p_{xy} для кожного пікселя $\langle x, y\rangle$. Побудуйте та реалізуйте ЕМ-алгоритм для кластеризації двох класів зображень з MNIST або EMNIST.

Розв'язок: Короткий опис алгоритму.

1. Ініціалізація:
   1.1 На вхід подаються ймовірності $\mathrm{P}^0(k|x^{(l)})$,
   $k \in K,\ x^{(l)} \in \overline{x},\ l = \overline{1, n}$.
   1.2 $t = 0$.
2. Основний цикл:
   2.1 $\mathrm{P}^{t+1}(k) = \dfrac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}{\sum\limits_{l=1}^{n} \sum\limits_{k' \in K} \mathrm{P}^t(k'|x^{(l)})},\ k \in K.$
   2.2 $P^{t+1}_{X|K} \in \operatorname*{argmax}\limits_{P^t_{X|K} \in \pi} \sum\limits_{l=1}^{n} \sum\limits_{k \in K} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) \ln \prod\limits_{i,j=1}^{28} \mathrm{P}^t_{X|K}(x^{(l)}_{ij}|k),$
   $\pi = \{(B(p^{(0)}_{11}), \ldots, B(p^{(1)}_{2828})):\ p^{(k)}_{ij} \in [0,1],\ i,j = \overline{1,28},\ k \in K\}.$
   2.3 $\mathrm{P}^{t+1}(k|x^{(l)}) = \dfrac{\mathrm{P}^{t+1}(x^{(l)}|k)\mathrm{P}^{t+1}(k)}{\sum\limits_{k' \in K} \mathrm{P}^{t+1}(x^{(l)}|k')\mathrm{P}^{t+1}(k')},\ k \in K,\ x^{(l)} \in \overline{x},\ l = \overline{1,n}.$
   2.4 Якщо умова зупинки не виконується, то $t \leftarrow t+1$ і перехід до 2.1.
   В іншому випадку, робота алгоритму завершена.

Більш детально розглянемо окремі кроки алгоритму.

2.1 $$\mathrm{P}^{t+1}(k) = \frac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}{\sum\limits_{l=1}^{n} \sum\limits_{k' \in K} \mathrm{P}^t(k'|x^{(l)})} = \mathrm{P}^{t+1}(k) = \frac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}{n}, \ k \in K.$$

2.2 Розв'яжемо наступну оптимізаційну задачу.

$$\sum_{l=1}^{n} \sum_{k \in K} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) \ln \prod_{i,j=1}^{28} \mathrm{P}^t_{X|K}(x^{(l)}_{ij}|k) \ \rightarrow \max_{P_{X|K} \in \pi},$$

$$\pi = \{(B(p^{(0)}_{11}), \ldots, B(p^{(1)}_{2828})) : \ p^{(k)}_{ij} \in [0,1], \ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K\}.$$

Врахуємо, що $\mathrm{P}^t_{X|K}(x^{(l)}_{ij}|k) = (p^{(k)}_{ij})^{x^{(l)}_{ij}} (1 - p^{(k)}_{ij})^{(1 - x^{(l)}_{ij})}$,
$l = \overline{1,n}, \ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K$, а також властивості логарифму.

$$\sum_{l=1}^{n} \sum_{k \in K} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) \sum_{i,j=1}^{28} (x^{(l)}_{ij} \ln p^{(k)}_{ij} + (1 - x^{(l)}_{ij}) \ln(1 - p^{(k)}_{ij})) \ \rightarrow \max_{\substack{p^{(k)}_{ij} \in [0,1], \\ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K}}$$

При цьому цю задачу можна розбити на 1568 окремих задач.

$$\sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})(x^{(l)}_{ij} \ln p^{(k)}_{ij} + (1 - x^{(l)}_{ij}) \ln(1 - p^{(k)}_{ij})) \ \rightarrow \max_{p^{(k)}_{ij} \in [0,1]}, \ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K.$$

Знайдемо спочатку похідну.

$$\frac{\partial}{\partial p^{(k)}_{ij}} \sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})(x^{(l)}_{ij} \ln p^{(k)}_{ij} + (1 - x^{(l)}_{ij}) \ln(1 - p^{(k)}_{ij})) =$$
$$= \sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) \left(\frac{x^{(l)}_{ij}}{p^{(k)}_{ij}} - \frac{1 - x^{(l)}_{ij}}{1 - p^{(k)}_{ij}} \right), \ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K.$$

Отриману систему прирівняємо до нуля і знайдемо розв'язок.

$$\sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) \left(\frac{x^{(l)}_{ij}}{p^{(k)}_{ij}} - \frac{1 - x^{(l)}_{ij}}{1 - p^{(k)}_{ij}} \right) = 0$$
$$\sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) x^{(l)}_{ij} (1 - p^{(k)}_{ij}) = \sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})(1 - x^{(l)}_{ij}) p^{(k)}_{ij}$$
$$\sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) x^{(l)}_{ij} = \sum_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) p^{(k)}_{ij}$$
$$p^{(k)}_{ij} = \frac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) x^{(l)}_{ij}}{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}, \ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K.$$

Окремо розглянемо ситуацію, коли $p^{(k)}_{ij} = 0, \ i,j = \overline{1,28}, \ k \in K$.

$p_{ij}^{(k)} = 0 \implies (1 - x_{ij}^{(l)}) \ln(1 - p_{ij}^{(k)}) = 0,\ x_{ij}^{(l)} \ln p_{ij}^{(k)} = 0$ при $x_{ij}^{(l)} = 0$,

що повністю узгоджується з ситуацією, коли $p_{ij}^{(k)} = \dfrac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) x_{ij}^{(l)}}{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}$.

Аналогічно при $p_{ij}^{(k)} = 1,\ i,j = \overline{1,28},\ k \in K$.

$p_{ij}^{(k)} = 1 \implies x_{ij}^{(l)} \ln p_{ij}^{(k)} = 0,\ (1 - x_{ij}^{(l)}) \ln(1 - p_{ij}^{(k)}) = 0$ при $x_{ij}^{(l)} = 1$,

що повністю узгоджується з ситуацією, коли $p_{ij}^{(k)} = \dfrac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) x_{ij}^{(l)}}{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}$.

Треба зауважити, що ми вважаємо, що $0^0 = 1$ і відповідно $0 \ln 0 = 0$.

2.3 $\mathrm{P}^{t+1}(k|x^{(l)}) = \dfrac{\mathrm{P}^{t+1}(x^{(l)}|k)\mathrm{P}^{t+1}(k)}{\sum\limits_{k' \in K} \mathrm{P}^{t+1}(x^{(l)}|k')\mathrm{P}^{t+1}(k')} =$

$$= \frac{\prod\limits_{i,j=1}^{28} (p_{ij}^{(k)})^{x_{ij}^{(l)}} (1 - p_{ij}^{(k)})^{(1 - x_{ij}^{(l)})} \mathrm{P}^{t+1}(k)}{\sum\limits_{k' \in K} \prod\limits_{i,j=1}^{28} (p_{ij}^{(k')})^{x_{ij}^{(l)}} (1 - p_{ij}^{(k')})^{(1 - x_{ij}^{(l)})} \mathrm{P}^{t+1}(k')} =$$

$$= \frac{1}{1 + \prod\limits_{i,j=1}^{28} \left(\dfrac{p_{ij}^{(1-k)}}{p_{ij}^{(k)}} \right)^{x_{ij}^{(l)}} \left(\dfrac{1 - p_{ij}^{(1-k)}}{1 - p_{ij}^{(k)}} \right)^{(1 - x_{ij}^{(l)})} \dfrac{\mathrm{P}^{t+1}(1-k)}{\mathrm{P}^{t+1}(k)}},$$

$k \in K,\ x^{(l)} \in \overline{x},\ l = \overline{1,n}$.

Весь алгоритм буде мати наступний вигляд.

1. Ініціалізація:
   1.1 На вхід подаються ймовірності $\mathrm{P}^0(k|x^{(l)})$, $k \in K,\ x^{(l)} \in \overline{x},\ l = \overline{1,n}$.
   1.2 $t = 0$.
2. Основний цикл:
   2.1 $\mathrm{P}^{t+1}(k) = \dfrac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})}{n},\ k \in K$.
   2.2 $p_{ij}^{(k)} = \dfrac{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)}) x_{ij}^{(l)}}{\sum\limits_{l=1}^{n} \mathrm{P}^t(k|x^{(l)})},\ i,j = \overline{1,28},\ k \in K$.

2.3 $$\mathrm{P}^{t+1}(k|x^{(l)}) = \frac{1}{1 + \prod\limits_{i,j=1}^{28} \left(\frac{p_{ij}^{(1-k)}}{p_{ij}^{(k)}}\right)^{x_{ij}^{(l)}} \left(\frac{1-p_{ij}^{(1-k)}}{1-p_{ij}^{(k)}}\right)^{(1-x_{ij}^{(l)})} \frac{\mathrm{P}^{t+1}(1-k)}{\mathrm{P}^{t+1}(k)}},$$
$k \in K,\ x^{(l)} \in \overline{x},\ l = \overline{1,n}.$

2.4 Якщо умова зупинки не виконується, то $t \leftarrow t+1$ і перехід до 2.1. В іншому випадку, робота алгоритму завершена.