ЕМ-алгоритм

Александр Дьяконов

План

- Gaussian Mixture Model (GMM)
- EM-алгоритм
- Генеративные модели
- Обоснование EM

Gaussian Mixture Model (GMM)

распределение данных $p(x)=\sum_{t=1}^{k}\pi_t\,\mathrm{norm}(x\,|\,\mu_t,\Sigma_t)$

$$\sum_{t=1}^{k}\pi_t=1,\ \pi_t\geq 0$$

цель – определить $\{\pi_t,\mu_t,\Sigma_t\}_{t=1}^{k}$

Понятно, какая генерация точек соответствует такому распределению

Проблема ММП:

$$\sum_{i=1}^{m}\log\left(\sum_{t=1}^{k}\pi_t\,\mathrm{norm}(x_i\,|\,\mu_t,\Sigma_t)\right)\to\max$$

всё сокращается только при k=1

Gaussian Mixture Model (GMM)

GMM – универсальный аппроксиматор плотности

(если можно делать много гауссиан)

Решаем задачу нечёткой кластеризации в частном случае «разделение смеси гауссиан»

проблемы оптимизации

- невыпуклость (как всегда)
- должна быть инвариантность к перестановкам

можно применять SGD, трюк: $\Sigma_t = M_t M_t^{\mathrm{T}}$

чтобы матрица была положительно определённой

но всё равно м.б. проблемы https://arxiv.org/pdf/1506.07677.pdf

Обучение GMM

$$\boxed{\sum_{i=1}^{m} \log\left(\sum_{t=1}^{k} \pi_t \operatorname{norm}(x_i \mid \mu_t, \Sigma_t)\right) \to \max}$$

0) **случайная инициализация параметров:** $\{\pi_t, \mu_t, \Sigma_t\}_{t=1}^{k}$

1) **Повторять до сходимости**

1.1 – Е-шаг) по текущим параметрам вычислить:

$$\gamma_{it} = \frac{\pi_t \operatorname{norm}(x_i \mid \mu_t, \Sigma_t)}{\sum_j \pi_j \operatorname{norm}(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)}$$

~ вероятность i-й объект в t-м кластере

1.2 – М-шаг) по γ_{it} пересчитать параметры кластеров

$$m_t = \sum_{i=1}^{m} \gamma_{it}$$

объёмы

$$\mu_t = \frac{1}{m_t} \sum_{i=1}^{m} \gamma_{it} x_i$$

центры

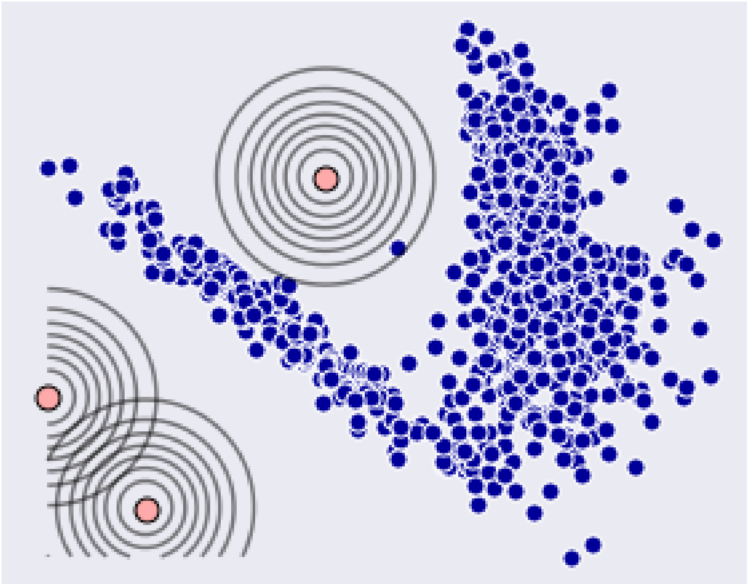
$$\Sigma_t = \frac{1}{m_t} \sum_{i=1}^{m} \gamma_{it} (x_i - \mu_t)(x_i - \mu_t)^{\mathrm{T}}$$

формы

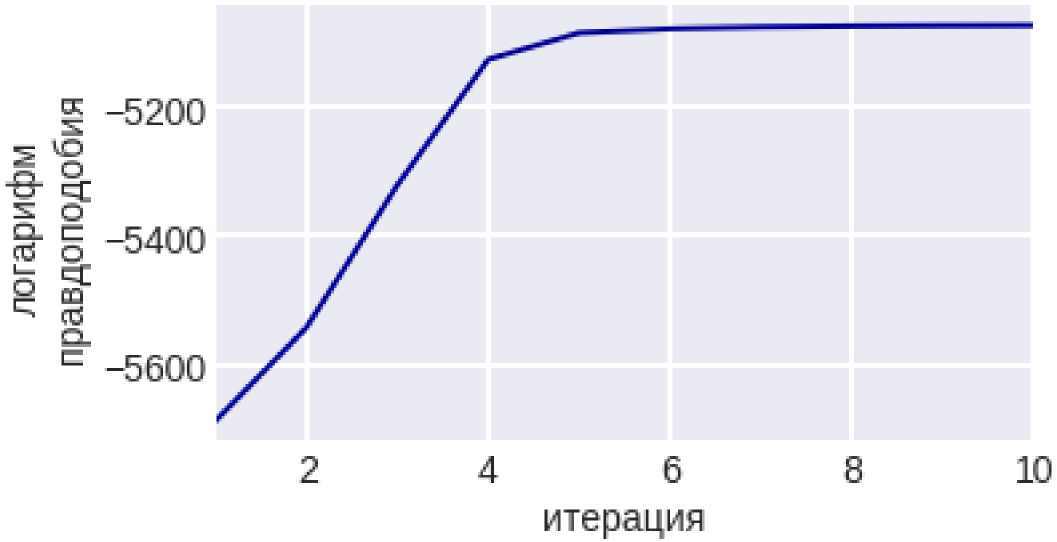
$$\pi_t = \frac{m_t}{m}$$

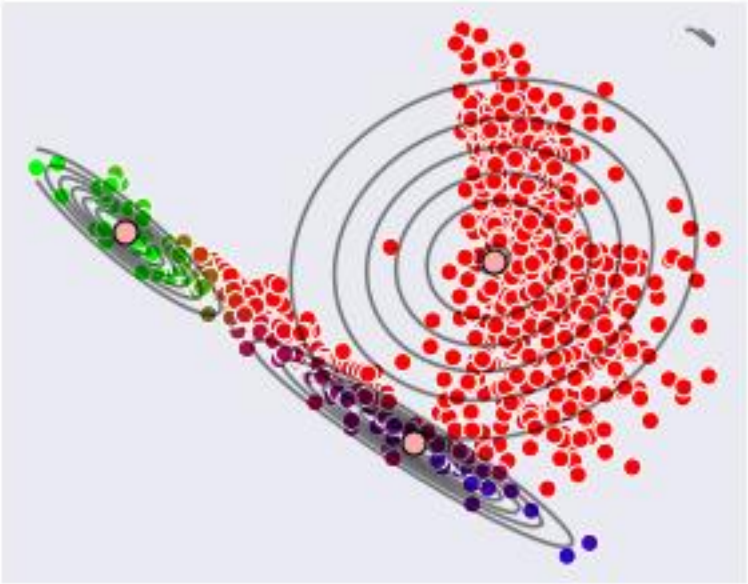
вероятности

ЕМ: эксперименты

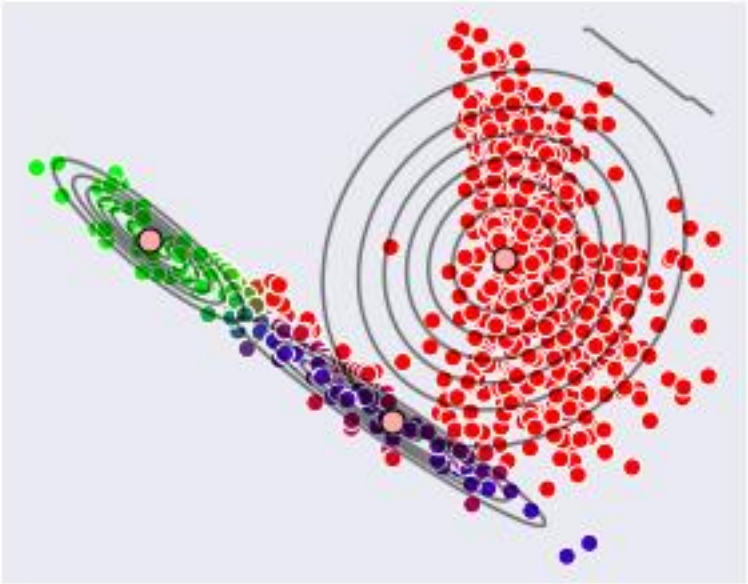


начальное приближение

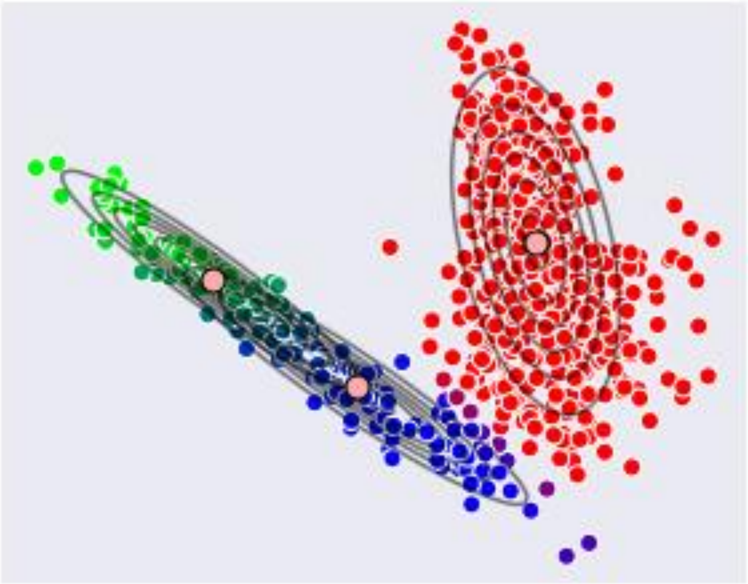




итерация 1

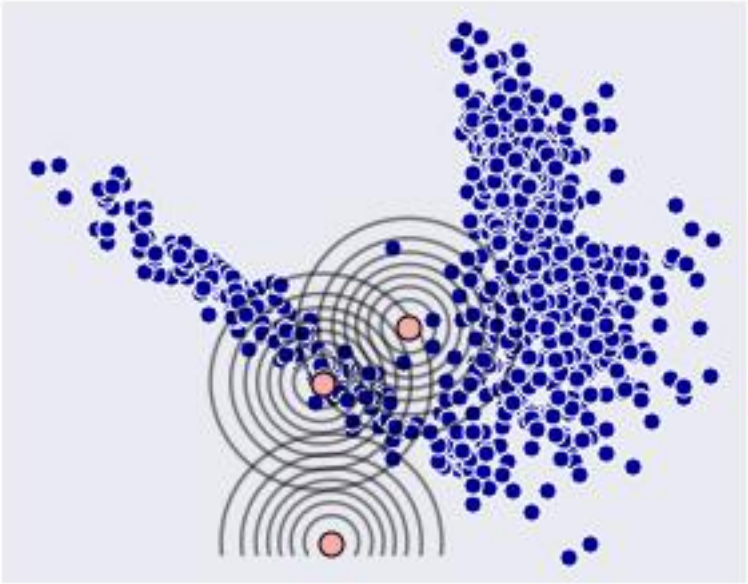


итерация 2

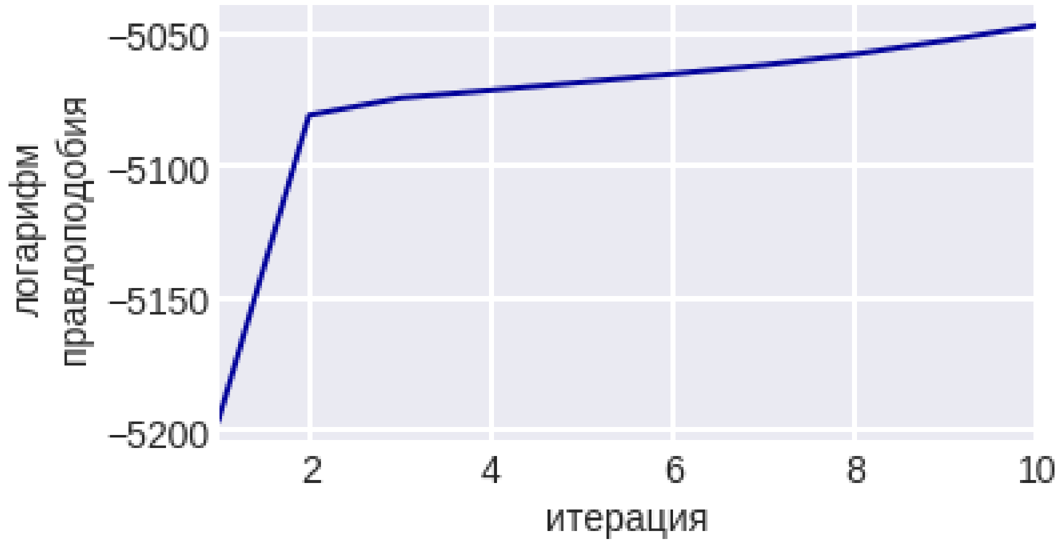


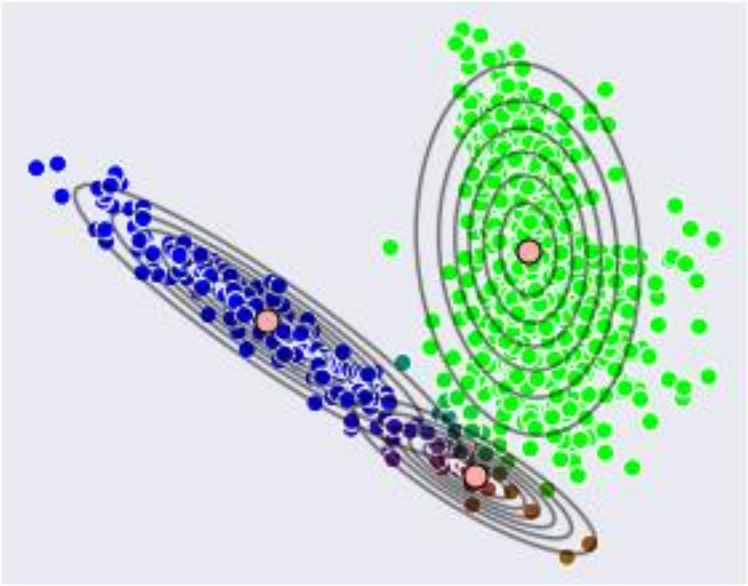
итерация 10

ЕМ: эксперименты

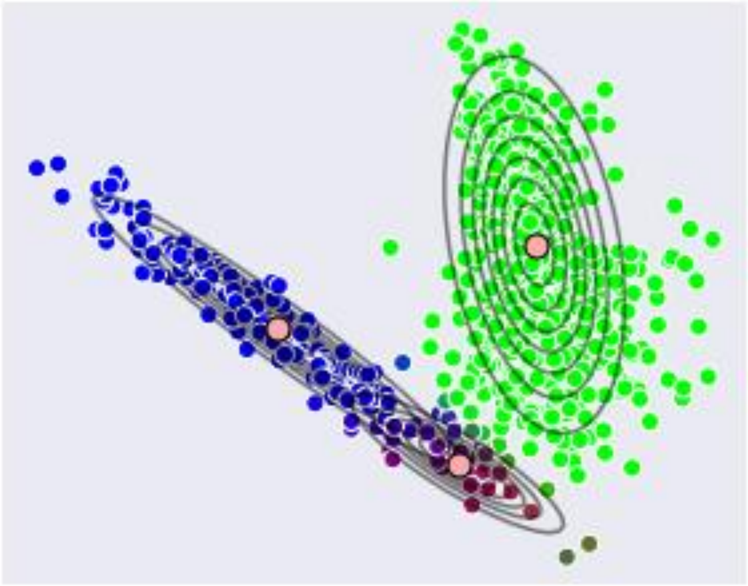


начальное приближение

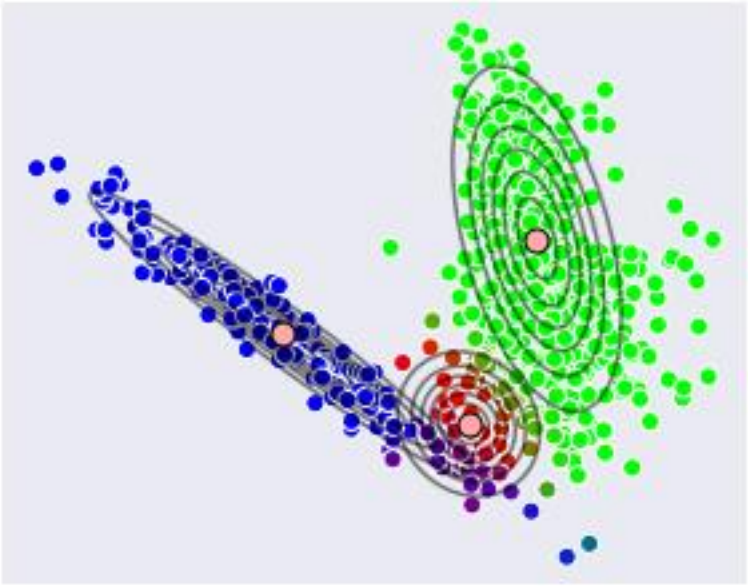




итерация 1

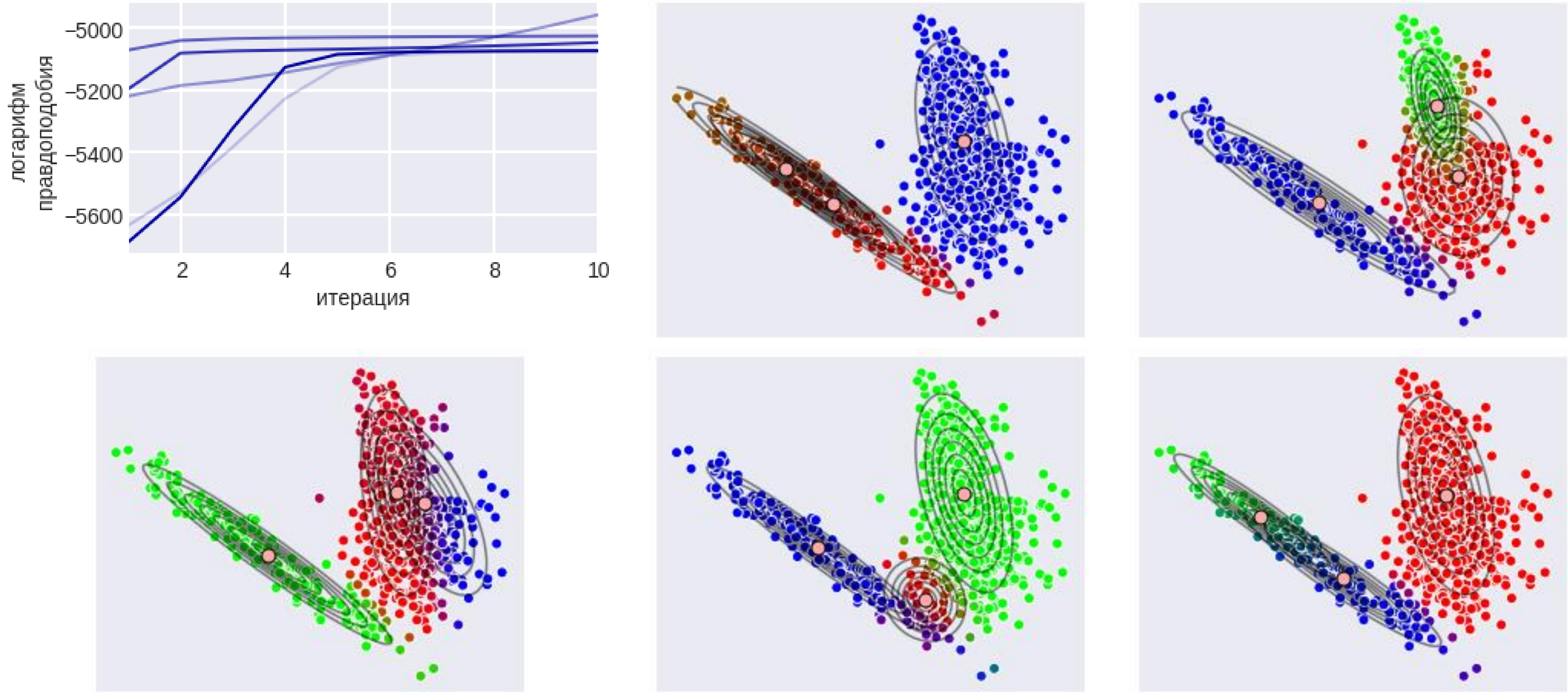


итерация 2

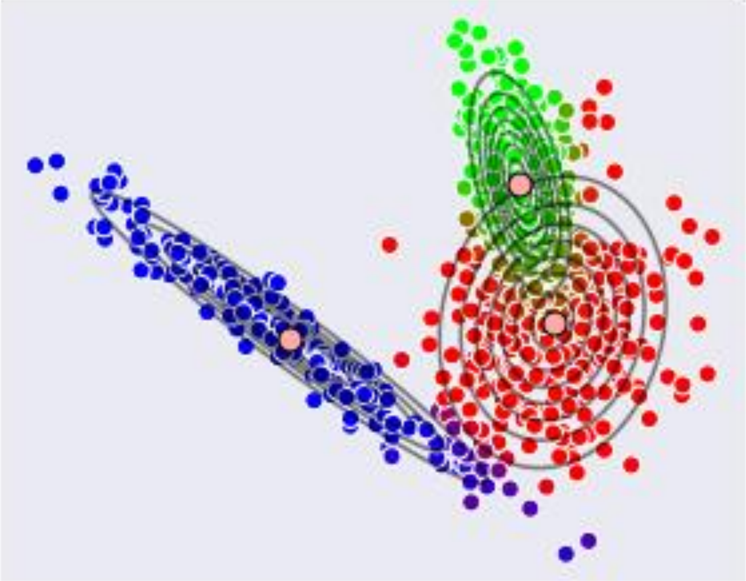


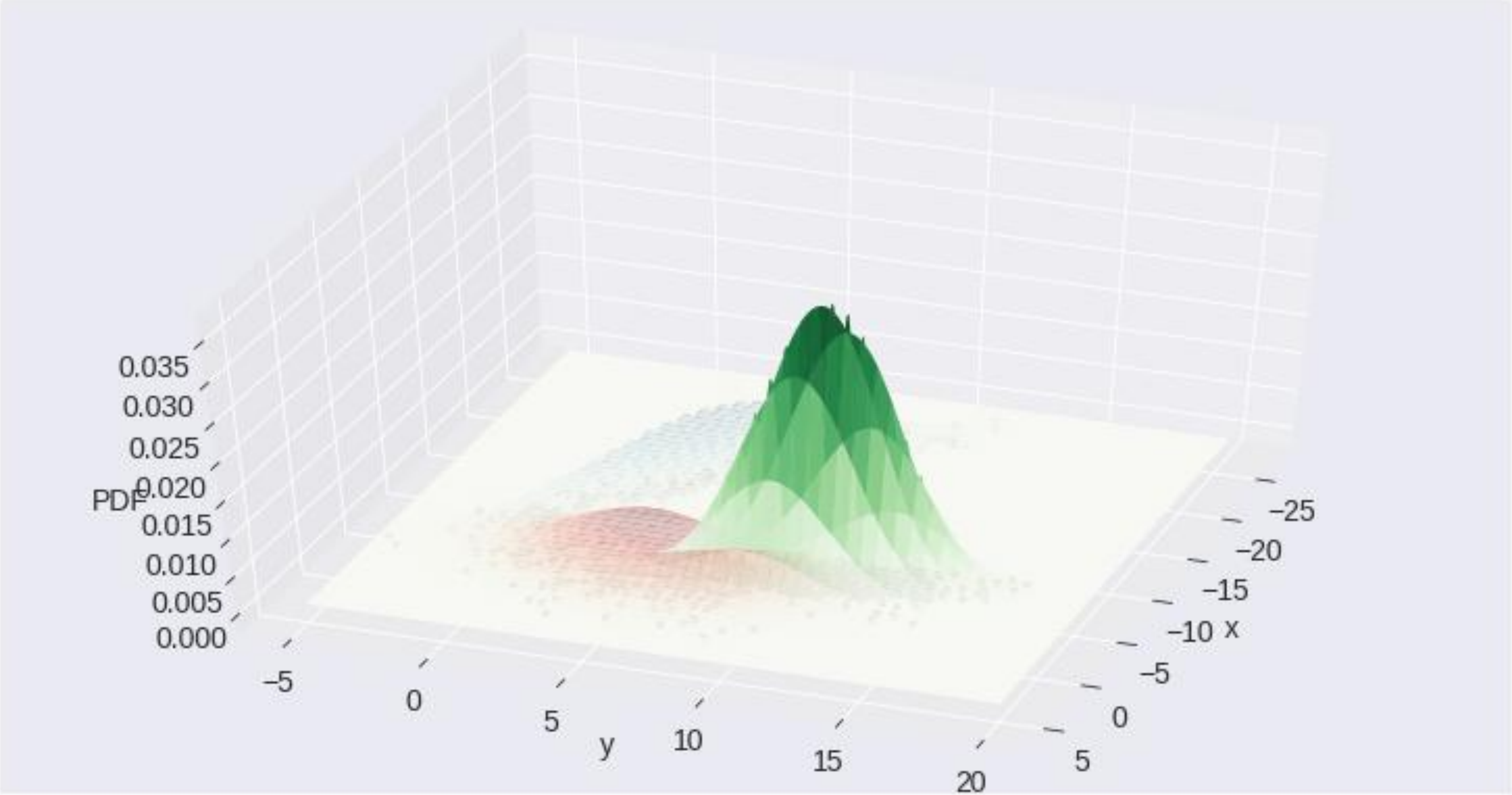
итерация 10

ЕМ: разные результаты работы алгоритма



ЕМ: результат





лучшее правдоподобие

– можно не угадать с числом гауссиан

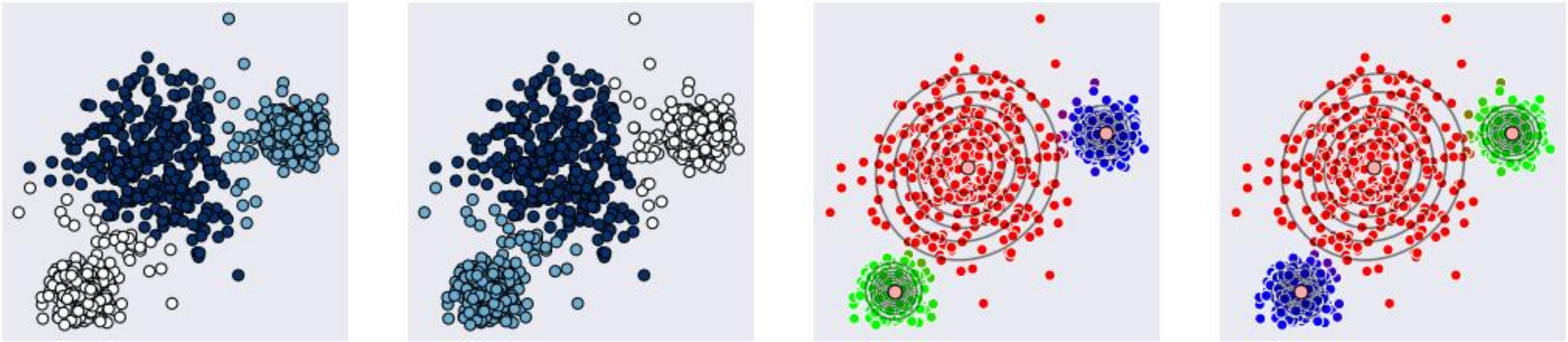
Связь GMM и k-means

наш ЕМ-алгоритм превращается в soft-k-means,
неявно возникает расстояние Махалонобиса, когда

- **распределения нормальные**
- **кластеры равновероятны (equal priors)**
- **ковариационные матрицы** $\Sigma_t = \varepsilon I$

- **если чёткая кластеризация (на Е-шаге), то в k-means**

слева – k-means (плохо с разными по размерам кластерами), справа – GMM



Минутка кода

`sklearn.mixture.GaussianMixture`

`n_components` – **число компонент (1)**

`covariance_type` – **формы,** `full` – **у каждой компоненты своя ковариационная матрица,** `tied` – **одна матрица на всех,** `diag` – **у каждой компоненты своя диагональная матрица,** `spherical` – **у каждой компоненты своя дисперсия**

`tol` – **порог для остановки**

`reg_covar` – **добавка к диагоналям матриц ковариаций**

`max_iter` – **число итераций**

`n_init` – **число инициализаций (рестартов 1)**

`init_params` – **как делать инициализацию** `kmeans` **или** `random`

`weights_init` – **ручная инициализация (веса объектам по компонентам)**

`means_init` – **ручная инициализация средних**

`precisions_init` – **ручная инициализация обратных матриц ковариации**

`random_state` –

`warm_start` –

`verbose` –

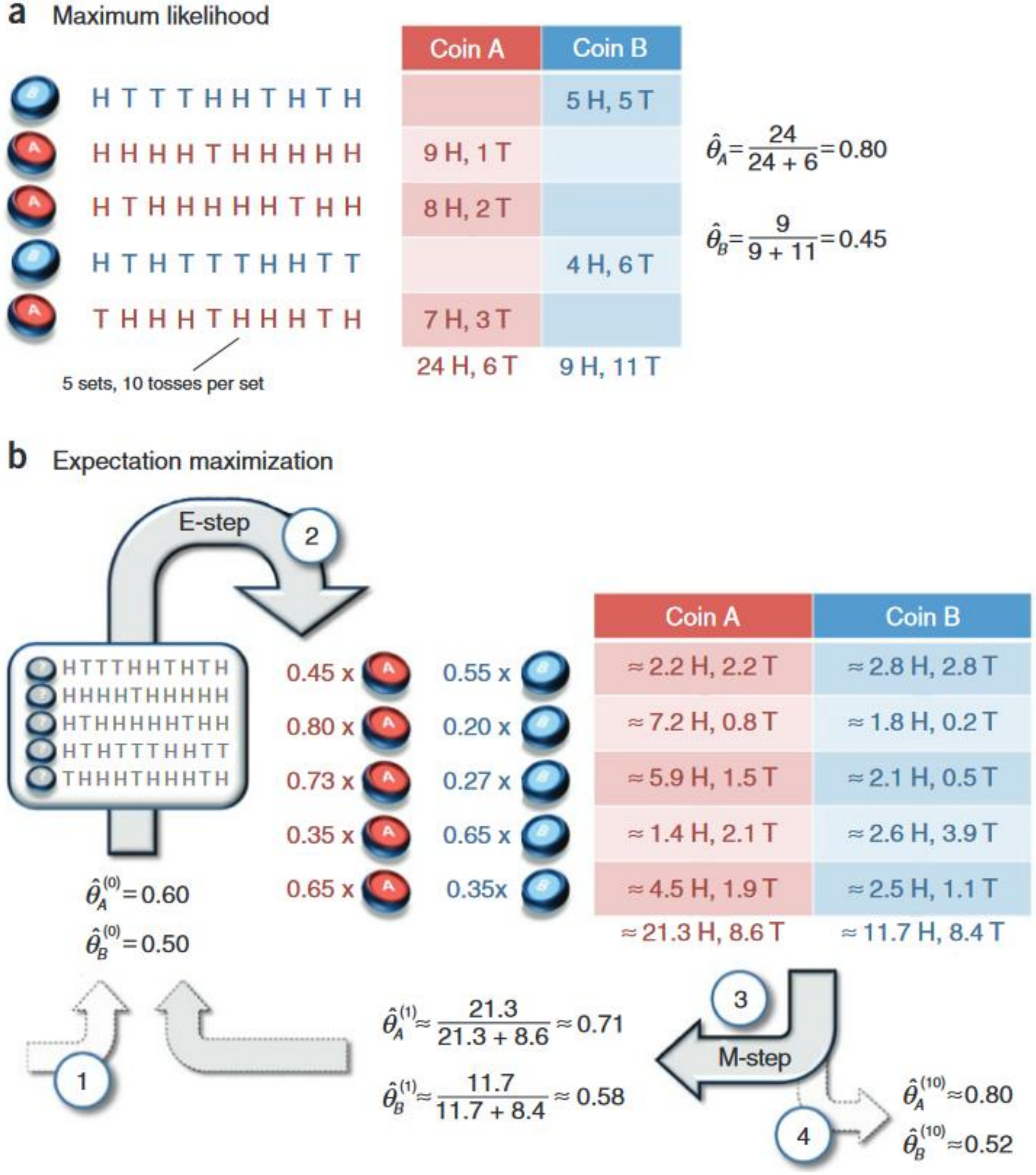
`verbose_interval` –

GMM – итоги

+ быстрый алгоритм
+ понятная геометрия
+ естественное обобщение k-means
более универсальный

– конкретный вид распределений
в своих популярных реализациях
– число компонент задаётся вручную
можно проверить адекватность на отложенной выборке

Пример ЕМ-алгоритма в простой модельной задаче



Пример ЕМ-алгоритма в простой модельной задаче

Есть две нечестные монеты, 5 экспериментов с ними:
выбирается одна монета (P=0.5), подбрасывается 10 раз
Задача: оценить вероятности выпадения орлов у монет

Пусть сначала оценки: $p_A = 0.6$, $p_B = 0.55$

Е-шаг

Рассмотрим серию S = «HTTTHHTHTH» = 5H + 5T

для монеты A вероятность серии $\sim p_A^5(1-p_A)^5 \approx 0.0008$

для монеты B вероятность серии $\sim p_B^5(1-p_B)^5 \approx 0.001$

вероятность, что первая серия получена монетой A

$$P(S \leftarrow A) = \frac{p_A^5(1-p_A)^5}{p_A^5(1-p_A)^5 + p_B^5(1-p_B)^5} \approx 0.44$$

Пример ЕМ-алгоритма в простой модельной задаче

М-шаг – пересчитываем вероятности выпадения орла:

$$p_A = \frac{P(S_1 \leftarrow A)\cdot \#H_1 + P(S_2 \leftarrow A)\cdot \#H_2 + \ldots}{P(S_1 \leftarrow A)\cdot \#(H+T)_1 + P(S_2 \leftarrow A)\cdot \#(H+T)_2 + \ldots}$$

$$p_A = \frac{0.44\cdot 5 + \ldots}{0.44\cdot 10 + \ldots}$$

$$p_B = \frac{P(S_1 \leftarrow B)\cdot \#H_1 + P(S_2 \leftarrow B)\cdot \#H_2 + \ldots}{P(S_1 \leftarrow B)\cdot \#(H+T)_1 + P(S_2 \leftarrow B)\cdot \#(H+T)_2 + \ldots}$$

– взвешенная модификация MLE для уточнения параметров

здесь $\#(H+T)_t$ **– число бросков в** t**-й серии** S_t

$\#H_t$ **– число орлов в ней**

взято из... https://www.nature.com/articles/nbt1406?pagewanted=all

Генеративные модели

Пусть данные $\{x_1, \ldots, x_m\}$ порождаются следующим образом:

1) генерируется $z_t \sim p(z \mid \varphi)$

2) генерируется $x_t \sim p(x \mid z_t, \theta)$

x **– наблюдаемая переменная (observed variable)**

z **– латентная переменная (hidden variable)**

Latent Variable Model – вероятностная модель, в которой не все переменные наблюдаются

Ненаблюдаемые переменные:
латентные / скрытые (latent / hidden) variables

Генеративные модели

$$z_t \sim p(z \mid \varphi) \to x_t \sim p(x \mid z_t, \theta)$$

Learning problem – найти параметры распределений

Inference problem – использовать

что такое в генеративных моделях плотность:

$$p(x) = \sum_z p(x, z) = \sum_z p(x \mid z) p(z)$$

напоминает нам GMM

$$p(x \mid \theta, \varphi) = \sum_z p(x \mid z, \theta) p(z \mid \varphi)$$

при выборе параметров $\varphi = \pi$, $\theta = (\mu, \Sigma)$

Генеративные модели

логарифм правдоподобия

$$\sum_x \log p(x \mid \theta, \varphi) = \sum_x \log\left(\sum_z p(x \mid z, \theta)\, p(z \mid \varphi)\right)$$

справа – incomplete log likelihood

трудность применения MLE/MAP – максимизировать правдоподобие затруднительно:

Поэтому метод – EM, его идея:

вместо суммирования по всем z пытаемся

для каждого x_t угадать, какое z_t ему соответствует,

если бы знали

$$\sum_t \log p(x_t \mid z_t, \theta)\, p(z_t \mid \varphi) = \sum_t \log p(x_t \mid z_t, \theta) + \sum_t \log p(z_t \mid \varphi) \to \max$$

находим параметры θ, φ, потом используем их чтобы снова угадать z_t и так по циклу

тонкость – дальше – взвешенное правдоподобие

Обоснование ЕМ (в общем виде)

Смесь произвольных распределений

$$p(x)=\sum_j \pi_j p(x\,|\,\Theta_j),\ \sum_{t=1}^{k}\pi_t=1,\ \pi_t\geq 0$$

чтобы не работать с правдоподобием,

вводим скрытые переменные и выписываем полное правдоподобие

$$\prod_x\prod_z p(x,z\,|\,\ldots)=\prod_i\prod_j \pi_j^{z_{ij}}\,p(x_i\,|\,\Theta_j)^{z_{ij}}$$

здесь бинарные скрытые переменные описывают принадлежность к компонентам

$$z_{ij}=I[x_i\sim p(x\,|\,\Theta_j)]$$

для каждого x **определён** $z=(z_1,\ldots,z_k)$

$$\underbrace{\mathbf{P}(z_{ij}=1)}_{\gamma_{ij}}=\mathbf{P}(z_j=1\,|\,x_i)=\frac{\mathbf{P}(z_j=1)\,p(x_i\,|\,z_j=1)}{\sum_t \mathbf{P}(z_t=1)\,p(x_i\,|\,z_t=1)}=\frac{\pi_j p(x_i\,|\,\Theta_j)}{\sum_t \pi_t p(x_i\,|\,\Theta_t)}$$

Обоснование ЕМ

Чем лучше полное правдоподобие...

$$\log \prod_i \prod_j \pi_j^{z_{ij}} p(x_i \mid \Theta_j)^{z_{ij}} = \sum_i \sum_j z_{ij} \left(\log \pi_j + \log p(x_i \mid \Theta_j) \right)$$

здесь логарифм и сумма поменялись местами

теперь возьмём матожидание

(мы не знаем латентных переменных, но давайте посмотрим на МО)

$$\mathbf{E}_z \sum_i \sum_j z_{ij} \left(\log \pi_j + \log p(x_i \mid \Theta_j) \right) = \sum_i \sum_j \gamma_{ij} \left(\log \pi_j + \log p(x_i \mid \Theta_j) \right)$$

в распределении Бернулли матожидание совпадает с вероятностью

здесь мы использовали какое-то значение Θ_j

теперь будем оптимизировать полученное взвешенное правдоподобие

Обоснование ЕМ что выяснили...

$$\boxed{\gamma_{ij} = \frac{\pi_j p(x_i \mid \Theta_j)}{\sum_t \pi_t p(x_i \mid \Theta_t)}}$$

оценка принадлежности

$$J = \sum_i \sum_j \gamma_{ij} \left(\log \pi_j + \log p(x_i \mid \Theta_j) \right) \to \max$$

оптимизация взвешенного правдоподобия

Оптимизация условная:

$$\frac{\partial}{\partial \pi_t} \left[J - \lambda \left(\sum_j \pi_j - 1 \right) \right] = \sum_i \frac{\gamma_{it}}{\pi_t} - \lambda = 0$$

$$\pi_j = \sum_i \frac{\gamma_{ij}}{\lambda}$$

учитывая условия нормировки: $$\boxed{\pi_t = \frac{\sum_i \gamma_{it}}{\sum_j \sum_i \gamma_{ij}} = \frac{1}{m} \underbrace{\sum_i \gamma_{it}}_{\equiv m_t} = \frac{m_t}{m}}$$

до сих пор не было предположений относительно распределений

Обоснование ЕМ – для гауссиан

$$J = \sum_i \sum_j \gamma_{ij} \left(\log \pi_j + \log \underbrace{p(x_i \mid \Theta_j)}_{\mathrm{norm}(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)} \right) \to \max$$

$$J \propto \sum_i \sum_j \gamma_{ij} (x_i - \mu_j)^{\mathrm{T}} \Sigma_j^{-1} (x_i - \mu_j)$$

дифференцируем по параметру (тут безусловная оптимизация) и =0

$$\sum_i \gamma_{it} \Sigma_t^{-1} (x_i - \mu_t) = 0$$

$$\sum_i \gamma_{it} x_i = \sum_i \gamma_{it} \mu_t$$

$$\boxed{\mu_t = \frac{\sum_i \gamma_{it} x_i}{\sum_i \gamma_{it}} = \frac{1}{m_t} \sum_i \gamma_{it} x_i}$$

в рамках обосновали все формулы пересчёта в ЕМ

(аналогично с матрицами ковариаций – не будем)

Обоснование ЕМ – для распределения Бернулли

$$J = \sum_i \sum_j \gamma_{ij} \left(\log \pi_j + \log \underbrace{p(x_i \mid \Theta_j)}_{\mathrm{Bernoulli}(x_i|\mu_j)} \right) \to \max$$

$$J \propto \sum_i \sum_j \gamma_{ij} \log(\mu_j^{x_i} (1-\mu_j)^{1-x_i}) = \sum_i \sum_j \gamma_{ij} (x_i \log \mu_j + (1-x_i) \log(1-\mu_j))$$

дифференцируем по параметру (тут безусловная оптимизация) и =0

$$\sum_i \left(\gamma_{ij} \frac{x_i}{\mu_j} - \gamma_{ij} \frac{(1-x_i)}{(1-\mu_j)} \right) = 0$$

$$\frac{\sum_i \gamma_{ij} x_i}{\mu_j} = \frac{\sum_i \gamma_{ij} x_i (1-x_i)}{1-\mu_j}$$

$$\boxed{\mu_j = \frac{\sum_i \gamma_{ij} x_i}{\sum_i \gamma_{ij}} = \frac{1}{m_t} \sum_i \gamma_{ij} x_i}$$

такая же формула

ЕМ-алгоритм

+ для любых смесей распределений, а дальше – общий подход – универсальная идея
– но надо их знать априорно

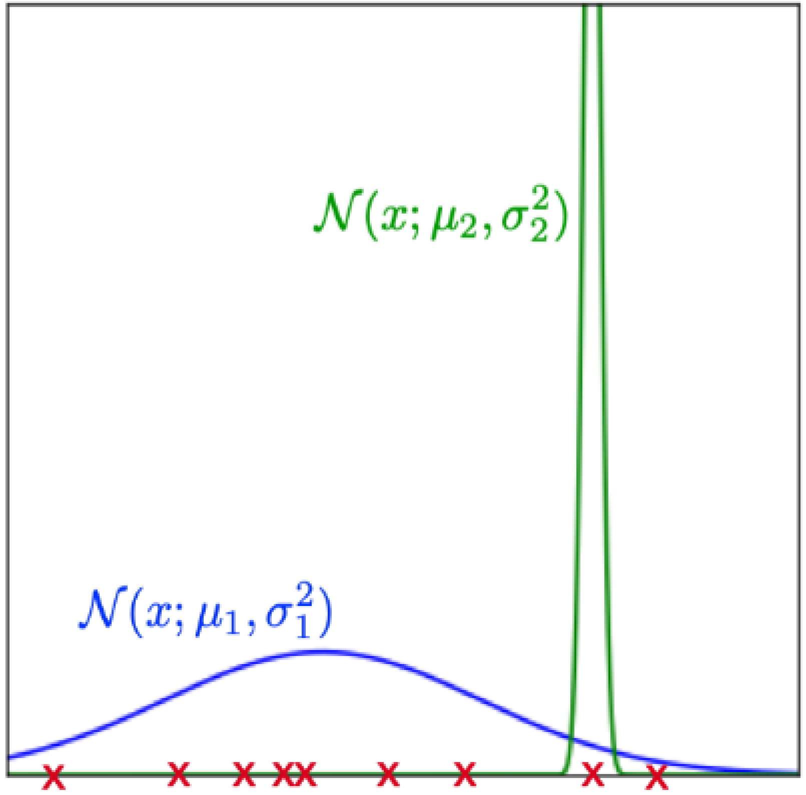
+ получаем оценки вероятностей (интерпретация)
+ можно брать инициализацию из k-means
в отличии от него – произвольная форма и вероятность кластеров

– не всегда задача корректна (кластер с маленькой дисперсией в центре точки выборки сколь угодно увеличивает правдоподобие)
это называется сингулярность – см кн. Бишопа

+ шаги организованы так, что не уменьшается правдоподобие

– по свойствам похож на k-means
– тоже сильно зависит от инициализации
– тоже задаётся число компонент (можно по значению правдоподобия настраивать)
– не всегда практичный

Сингулярность



Дальше дополнительный материал

Нижняя оценка Marginal Log-Likelihood (Evidence)

стандартный приём в ML:

$$\log \prod_i p(x_i \mid \underbrace{\theta, \varphi}_{\Theta}) = \sum_i \log p(x_i \mid \Theta) =$$

$$= \sum_i \log \left(\sum_j \frac{p(x_i, z = j \mid \Theta) q_j}{q_j} \right) \geq \sum_i \sum_j q_j \log \frac{p(x_i, z = j \mid \Theta)}{q_j}$$

здесь *z* принимает дискретные значения

$\geq$ **– воспользовались неравенством Йенсена (Jensen) для выпуклых функций**

$$f(\mathbf{E}[x]) \geq \mathbf{E}[f(x)]$$

q **– произвольное распределение на значениях *z***

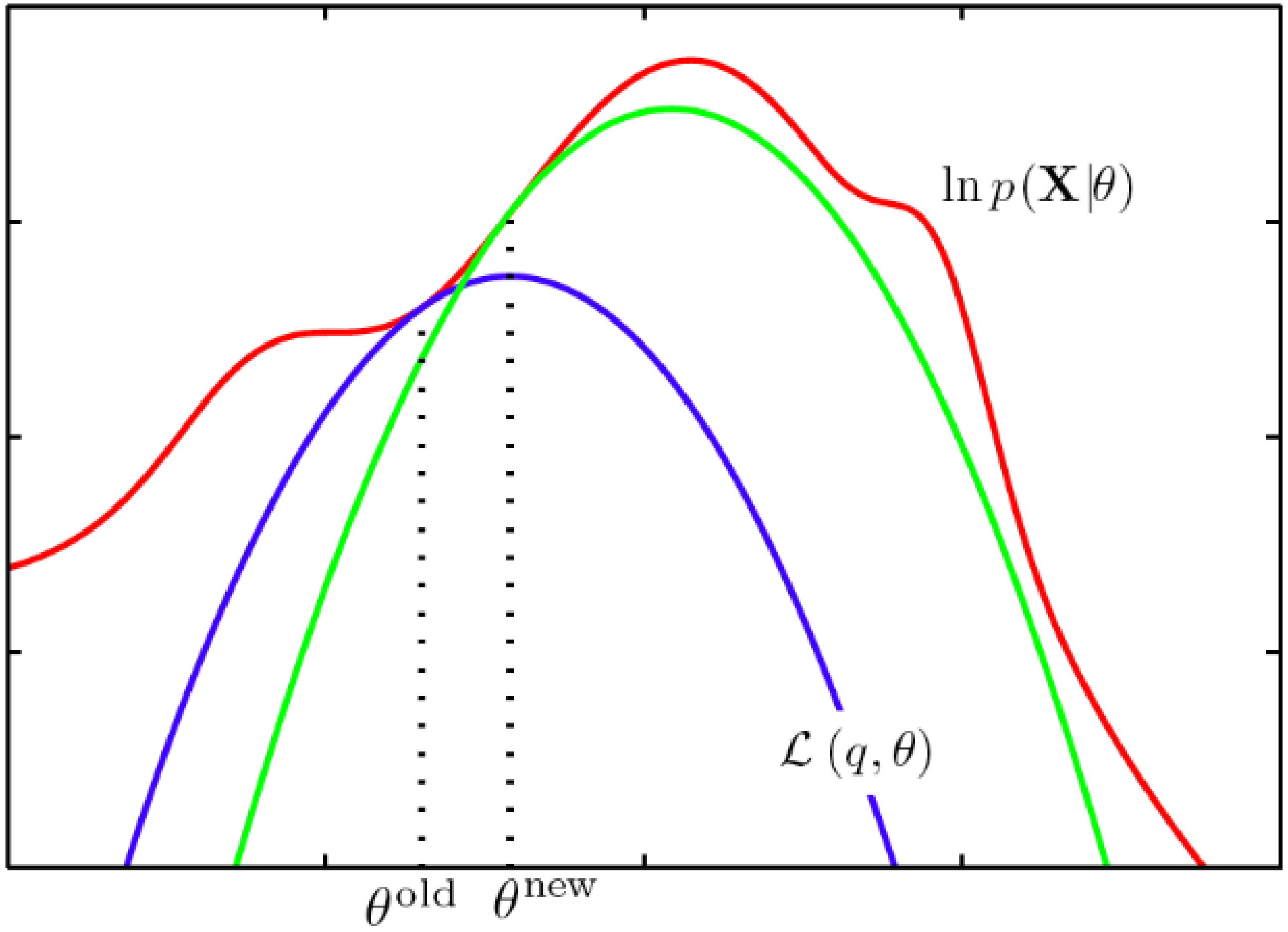
можно максимизировать правую часть – ELBO – evidence lower bound – оценку левой

Нижняя оценка Marginal Log-Likelihood (Evidence)

MLE: $$\hat{\Theta}_{\mathrm{MLE}} = \arg\max \sum_i \log p(x_i \mid \Theta)$$

EM: $$\hat{\Theta}_{\mathrm{EM}} = \arg\max \sum_i \sum_j q_j \log \frac{p(x_i, z = j \mid \Theta)}{q_j}$$

Нижняя оценка Marginal Log-Likelihood (Evidence)



ЕМ вычисляет ELBO для текущих параметров и максимизирует её для получения новых параметров

Bishop Pattern recognition and machine learning, Figure 9.14

ЕМ «на верхнем уровне»

0. Инициализация параметров Θ

1. Повторять до сходимости

1.1. Выбор

$$q \leftarrow \arg\max_q \sum_i \sum_j q_j \log \frac{p(x_i, z=j \mid \Theta)}{q_j}$$

доказывается (см. дальше), что для *i* $q = p(z \mid x_i, \Theta)$

обратим внимание, что *q* – распределение значений *z*

1.2. Выбор

$$\Theta \leftarrow \arg\max_\Theta \sum_i \sum_j q_j \log \frac{p(x_i, z=j \mid \Theta)}{q_j}$$

Есть теорема о сходимости при необременительных условиях

Florin Vaida «Parameter Convergence for EM and MM Algorithms» // Statistica Sinica, 2005, http://www3.stat.sinica.edu.tw/statistica/oldpdf/a15n316.pdf

Кстати, связь с KL-дивергенцией

$$\sum_z q(z)\log\frac{p(x,z\,|\,\Theta)}{q(z)}=\sum_z q(z)\log\frac{p(z\,|\,x,\Theta)\,p(x\,|\,\Theta)}{q(z)}=$$

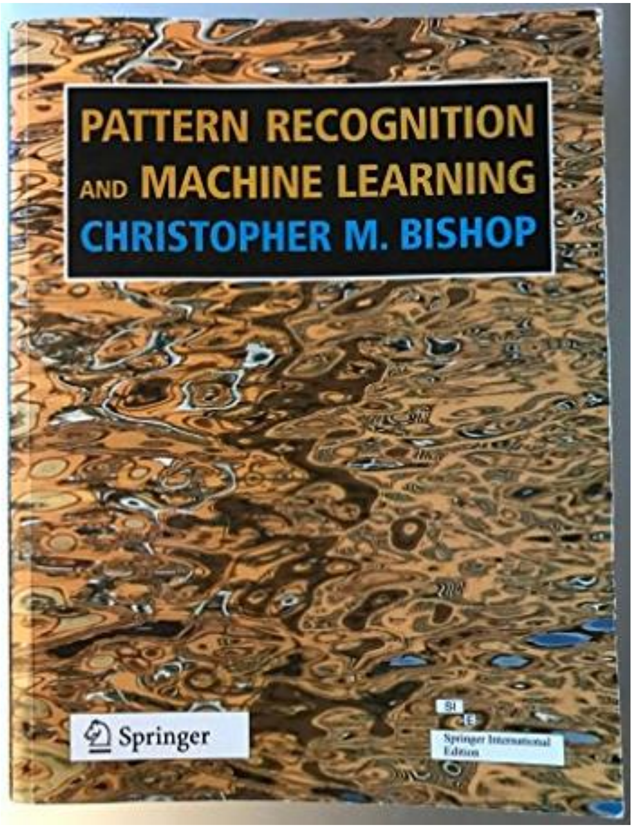
$$=\sum_z q(z)\log\frac{p(z\,|\,x,\Theta)}{q(z)}+\sum_z q(z)\log p(x\,|\,\Theta)=$$

$$=-\mathrm{KL}[q(z),p(z\,|\,x,\Theta)]+\log p(x\,|\,\Theta)$$

вот почему там оптимальный выбор $q=p(z\,|\,x_i,\Theta)$

Ссылки

Bishop C. M. Pattern recognition and machine learning. – Springer, 2006



Неплохие курсы с объяснением EM-алгоритма

http://www.cs.toronto.edu/~rgrosse/teaching.html