КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

Сергей Николенко

TRA Robotics — Санкт-Петербург
7 июня 2018 г.

Random facts:

- 7 июня 1692 г. крупное землетрясение на Ямайке вызвало цунами, почти полностью уничтожившее Порт-Ройал, главную пиратскую базу в Карибском море, с чего начался закат пиратства в Вест-Индии
- 7 июня 1939 г. на экраны вышел фильм Роома «Эскадрилья №5» («Война начинается»), который рассказывал о грядущей войне СССР с фашистской Германией; через несколько дней фильм был снят из проката, чтобы не раздражать Гитлера, и вскоре действительно подписали акт Молотова — Риббентропа
- 7 июня 1965 г. Sony представила первый домашний видеомагнитофон — CV-2000 по цене $995

Кластеризация

Суть лекции

- *Кластеризация* — типичная задача обучения без учителя: задача классификации объектов одной природы в несколько групп так, чтобы объекты в одной группе обладали одним и тем же свойством.
- Под свойством обычно понимается близость друг к другу относительно выбранной метрики.

Чуть более формально

- Есть набор тестовых примеров $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ и функция расстояния между примерами ρ.
- Требуется разбить X на непересекающиеся подмножества (кластеры) так, чтобы каждое подмножество состояло из похожих объектов, а объекты разных подмножеств существенно различались.

Идея

- Есть точки $x_1, x_2, \dots, x_n$ в пространстве. Нужно кластеризовать.
- Считаем каждую точку кластером. Затем ближайшие точки объединяем, далее считаем единым кластером. Затем повторяем.
- Получается дерево.

Алгоритм

`HierarchyCluster`$(X = \{x_1, \dots, x_n\})$

- Инициализируем $C = X$, $G = X$.
- Пока в C больше одного элемента:
  - Выбираем два элемента C c_1 и c_2, расстояние между которыми минимально.
  - Добавляем в G вершину c_1c_2, соединяем её с вершинами c_1 и c_2.
  - $C := C \cup \{c_1c_2\}\ \ \{c_1, c_2\}$.
- Выдаём G.

Результат

- В итоге получается дерево кластеров, из которого потом можно выбрать кластеризацию с требуемой степенью детализации (обрезать на том или ином максимальном расстоянии).
- Всё ли понятно?

Результат

- В итоге получается дерево кластеров, из которого потом можно выбрать кластеризацию с требуемой степенью детализации (обрезать на том или ином максимальном расстоянии).
- Всё ли понятно?
- Остаётся вопрос: как подсчитывать расстояние между кластерами?

Single-link vs. complete-link

- *Single-link* алгоритмы считают *минимум* из возможных расстояний между парами объектов, находящихся в кластере.
- *Complete-link* алгоритмы считают *максимум* из этих расстояний
- Какие особенности будут у single-link и complete-link алгоритмов? Чем они будут отличаться?

Очевидный алгоритм

- Нарисуем полный граф с весами, равными расстоянию между объектами.
- Выберем некий предопределённый порог расстояния r и выбросим все рёбра длиннее r.
- Компоненты связности полученного графа — это наши кластеры.

Минимальное остовное дерево

- Минимальное остовное дерево — дерево, содержащее все вершины (связного) графа и имеющее минимальный суммарный вес своих рёбер.
- Алгоритм Краскала (Kruskal): выбираем на каждом шаге ребро с минимальным весом, если оно соединяет два дерева, добавляем, если нет, пропускаем.
- Алгоритм Борувки (Boruvka).

Кластеризация

- Как использовать минимальное остовное дерево для кластеризации?

Кластеризация

- Как использовать минимальное остовное дерево для кластеризации?
- Построить минимальное остовное дерево, а потом выкидывать из него рёбра максимального веса.
- Сколько рёбер выбросим, столько кластеров получим.

DBSCAN

- Идея: кластер – это зона высокой плотности точек, отделённая от других кластеров зонами низкой плотности.
- Алгоритм: выделяем *core samples*, которые сэмплируются в зонах высокой плотности (т.е. есть по крайней мере n соседей, других точек на расстоянии $\leq \epsilon$).
- Затем последовательно объединяем core samples, которые оказываются соседями друг друга.
- Точки, которые не являются ничьими соседями, — это выбросы.

Birch

- Идея: строим дерево (CF-tree, от clustering feature), которое содержит краткие описания кластеров и поддерживает апдейты.
- $\mathrm{CF}_i = \{N_i, \mathrm{LS}_i, \mathrm{SS}_i\}$: число точек в кластере CF_i, $\mathrm{LS}_i = \sum_{\mathbf{x} \in \mathrm{CF}_i} x_i$ (linear sum), $\mathrm{SS}_i = \sum_{\mathbf{x} \in \mathrm{CF}_i} x_i^2$ (sum of squares).
- Этого достаточно для того, чтобы подсчитать разумные расстояния между кластерами.
- А также для того, чтобы слить два кластера: CF_i аддитивны.

Birch

- CF-дерево состоит из CF_i; оно похоже на B-дерево, сбалансировано по высоте. Кластеры – листья дерева, над ними “суперкластеры”.
- Добавляем новый кластер, рекурсивно вставляя его в дерево; если от этого число элементов в листе становится слишком большим (параметр), лист разбивается на два.
- А когда дерево построено, можно запустить ещё одну кластеризацию (любым другим методом) на полученных “мини-кластерах”.

Алгоритм EM и кластеризация

Постановка задачи

- Часто возникает ситуация, когда в имеющихся данных некоторые переменные присутствуют, а некоторые — отсутствуют.
- Даны результаты сэмплирования распределения вероятностей с несколькими параметрами, из которых известны не все.

Постановка задачи

- Эти неизвестные параметры тоже расцениваются как случайные величины.
- Задача — найти наиболее вероятную гипотезу, то есть ту гипотезу h, которая максимизирует

$$E[\ln p(D|h)].$$

Частный случай

Построим один из простейших примеров применения алгоритма EM. Пусть случайная переменная x сэмплируется из суммы двух нормальных распределений. Дисперсии даны (одинаковые), нужно найти только средние μ_1, μ_2.

Два распределения

- Теперь нельзя понять, какие x_i были порождены каким распределением — классический пример *скрытых переменных*.
- Один тестовый пример полностью описывается как тройка $\langle x_i, z_{i1}, z_{i2} \rangle$, где $z_{ij} = 1$ iff x_i был сгенерирован j-м распределением.

Суть алгоритма EM

- Сгенерировать какую-нибудь гипотезу $h = (\mu_1, \mu_2)$.
- Пока не дойдем до локального максимума:
  - Вычислить ожидание $E(z_{ij})$ в предположении текущей гипотезы (E–шаг).
  - Вычислить новую гипотезу $h' = (\mu'_1, \mu'_2)$, предполагая, что z_{ij} принимают значения $E(z_{ij})$ (M–шаг).

В примере с гауссианами

В примере с гауссианами:

$$E(z_{ij}) = \frac{p(x = x_i | \mu = \mu_j)}{p(x = x_i | \mu = \mu_1) + p(x = x_i | \mu = \mu_2)} = \\ = \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_j)^2}}{e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_1)^2} + e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_2)^2}}.$$

Мы подсчитываем эти ожидания, а потом подправляем гипотезу:

$$\mu_j \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} E(z_{ij}) x_i.$$

Обоснование алгоритма EM

- Дадим формальное обоснование алгоритма EM.
- Мы решаем задачу максимизации правдоподобия по данным $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_N\}$.

$$L(\theta \mid \mathcal{X}) = p(\mathcal{X} \mid \theta) = \prod p(x_i \mid \theta)$$

  или, что то же самое, максимизации $\ell(\theta \mid \mathcal{X}) = \log L(\theta \mid \mathcal{X})$.
- EM может помочь, если этот максимум трудно найти аналитически.

Обоснование алгоритма EM

- Давайте предположим, что в данных есть *скрытые компоненты*, такие, что если бы мы их знали, задача была бы проще.
- Замечание: совершенно не обязательно эти компоненты должны иметь какой-то физический смысл. :) Может быть, так просто удобнее.
- В любом случае, получается набор данных $\mathcal{Z} = (\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ с совместной плотностью

$$p(z \mid \theta) = p(x, y \mid \theta) = p(y \mid x, \theta)p(x \mid \theta).$$

- Получается полное правдоподобие $L(\theta \mid \mathcal{Z}) = p(\mathcal{X}, \mathcal{Y} \mid \theta)$. Это случайная величина (т.к. $\mathcal{Y}$ неизвестно).

Обоснование алгоритма EM

- Заметим, что настоящее правдоподобие $L(\theta) = E_{\mathbf{Y}}\left[p(\mathcal{X}, \mathcal{Y} \mid \theta) \mid \mathcal{X}, \theta\right]$.
- E-шаг алгоритма EM вычисляет условное ожидание (логарифма) полного правдоподобия при условии $\mathcal{X}$ и текущих оценок параметров θ_n:

$$Q(\theta, \theta_n) = E\left[\log p(\mathcal{X}, \mathcal{Y} \mid \theta) \mid \mathcal{X}, \theta_n\right].$$

- Здесь θ_n – текущие оценки, а θ – неизвестные значения (которые мы хотим получить в конечном счёте); т.е. $Q(\theta, \theta_n)$ – это функция от θ.

Обоснование алгоритма EM

- E-шаг алгоритма EM вычисляет условное ожидание (логарифма) полного правдоподобия при условии $\mathcal{X}$ и текущих оценок параметров θ:

$$Q(\theta, \theta_n) = E\left[\log p(\mathcal{X}, \mathcal{Y} \mid \theta) \mid \mathcal{X}, \theta_n\right].$$

- Условное ожидание – это

$$E\left[\log p(\mathcal{X}, \mathcal{Y} \mid \theta) \mid \mathcal{X}, \theta_n\right] = \int_y \log p(\mathcal{X}, y \mid \theta) p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \mathrm{d}y,$$

  где $p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)$ – маргинальное распределение скрытых компонентов данных.
- EM лучше всего применять, когда это выражение легко подсчитать, может быть, даже аналитически.
- Вместо $p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)$ можно подставить $p(y, \mathcal{X} \mid \theta_n) = p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) p(\mathcal{X} \mid \theta_n)$, от этого ничего не изменится.

Обоснование алгоритма EM

- В итоге после E-шага алгоритма EM мы получаем функцию $Q(\theta, \theta_n)$.
- На M-шаге мы максимизируем

$$\theta_{n+1} = \arg\max_{\theta} Q(\theta, \theta_n).$$

- Затем повторяем процедуру до сходимости.
- В принципе, достаточно просто находить θ_{n+1}, для которого $Q(\theta_{n+1}, \theta_n) > Q(\theta_n, \theta_n)$ – Generalized EM.
- Осталось понять, что значит $Q(\theta, \theta_n)$ и почему всё это работает.

Обоснование алгоритма EM

- Мы хотели перейти от θ_n к θ, для которого $\ell(\theta) > \ell(\theta_n)$.

$$\ell(\theta) - \ell(\theta_n) =$$

$$= \log\left(\int_y p(\mathcal{X} \mid y, \theta) p(y \mid \theta) \mathrm{d}y\right) - \log p(\mathcal{X} \mid \theta_n) =$$

$$= \log\left(\int_y p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \frac{p(\mathcal{X} \mid y, \theta) p(y \mid \theta)}{p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)} \mathrm{d}y\right) - \log p(\mathcal{X} \mid \theta_n) \geq$$

$$\geq \int_y p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \log\left(\frac{p(\mathcal{X} \mid y, \theta) p(y \mid \theta)}{p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)}\right) \mathrm{d}y - \log p(\mathcal{X} \mid \theta_n) =$$

$$= \int_y p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \log\left(\frac{p(\mathcal{X} \mid y, \theta) p(y \mid \theta)}{p(\mathcal{X} \mid \theta_n) p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)}\right) \mathrm{d}y.$$

Обоснование алгоритма EM

- Получили

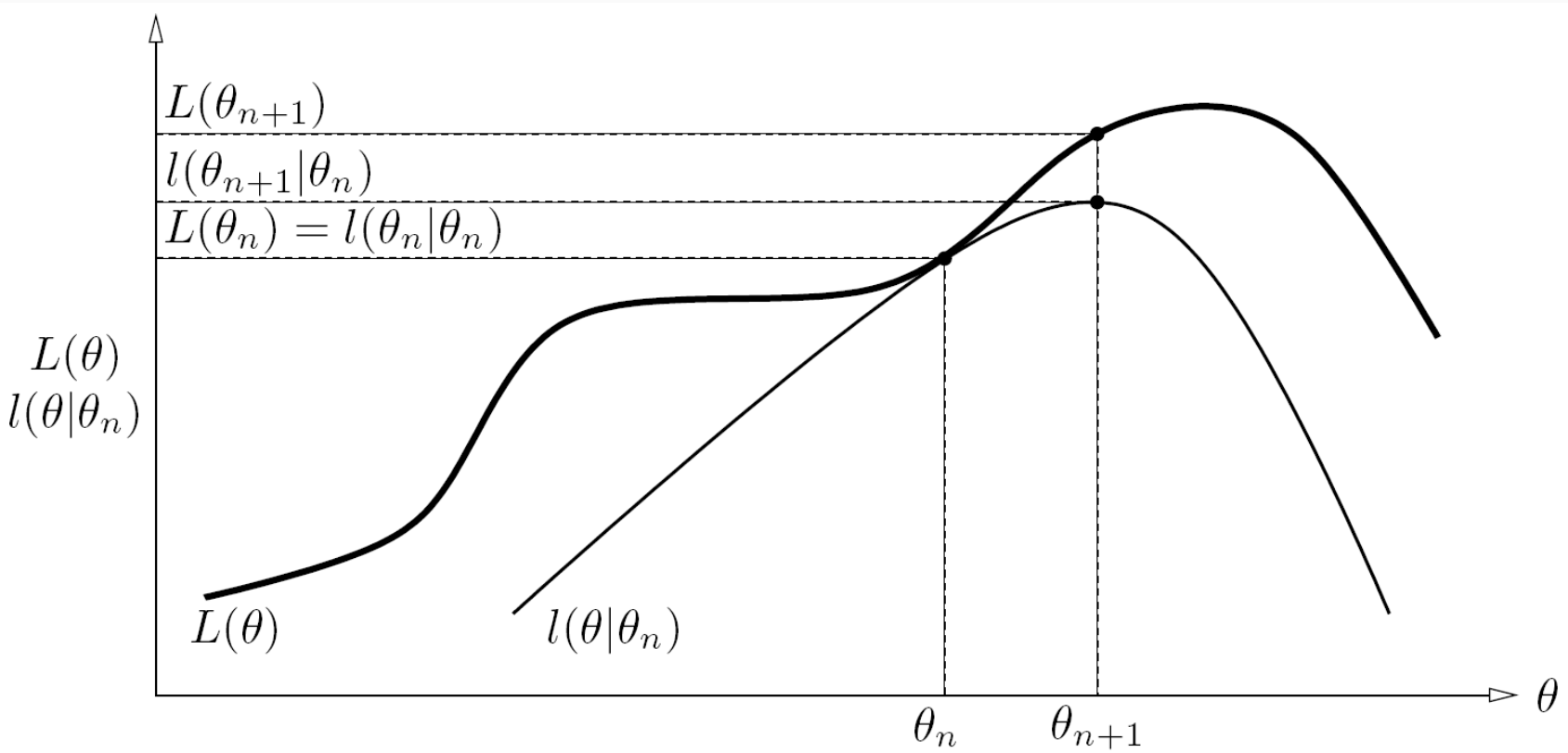
$$\ell(\theta) \geq l(\theta, \theta_n) =$$
$$= \ell(\theta_n) + \int_y p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \log \left(\frac{p(\mathcal{X} \mid y, \theta) p(y \mid \theta)}{p(\mathcal{X} \mid \theta_n) p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)} \right) \mathrm{d}y.$$

Упражнение. Докажите, что $l(\theta_n, \theta_n) = \ell(\theta_n)$.

Обоснование алгоритма EM

- Иначе говоря, мы нашли нижнюю оценку на $\ell(\theta)$ везде, касание происходит в точке θ_n.
- Т.е. мы нашли нижнюю оценку для правдоподобия и смещаемся в точку, где она максимальна (или хотя бы больше текущей).
- Такая общая схема называется *MM-алгоритм* (minorization-maximization). Мы к ним, возможно, ещё вернёмся.

Обоснование алгоритма EM



Обоснование алгоритма EM

- Осталось только понять, что максимизировать можно Q.

$$\theta_{n+1} = \arg\max_\theta l(\theta, \theta_n) = \arg\max_\theta \{\ell(\theta_n) + \\ + \int_y f(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \log \left(\frac{p(\mathcal{X} \mid y, \theta) f(y \mid \theta)}{p(\mathcal{X} \mid \theta_n) f(y \mid \mathcal{X}, \theta_n)} \right) \mathrm{d}y \Bigg\} = \\ = \arg\max_\theta \left\{ \int_y p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \log \left(p(\mathcal{X} \mid y, \theta) p(y \mid \theta) \right) \mathrm{d}y \right\} = \\ = \arg\max_\theta \left\{ \int_y p(y \mid \mathcal{X}, \theta_n) \log p(\mathcal{X}, y \mid \theta) \mathrm{d}y \right\} = \\ = \arg\max_\theta \{Q(\theta, \theta_n)\},$$

а остальное от θ не зависит. Вот и получился EM.

Мысли?

- Какие есть мысли о применении алгоритма EM к задачам кластеризации?

Гипотезы

- Чтобы воспользоваться статистическим алгоритмом, нужно сформулировать гипотезы о распределении данных.
- *Гипотеза о природе данных*: тестовые примеры появляются случайно и независимо, согласно вероятностному распределению, равному смеси распределений кластеров

$$p(x) = \sum_{c \in C} w_c p_c(x), \quad \sum_{c \in C} w_c = 1,$$

где w_c — вероятность появления объектов из кластера c, p_c — плотность распределения кластера c.

Гипотезы cont'd

- Остается вопрос: какими предположить распределения p_c?

Гипотезы cont'd

- Остается вопрос: какими предположить распределения p_c?
- Часто берут сферические гауссианы, но это не слишком гибкий вариант: кластер может быть вытянут в ту или иную сторону.

Гипотезы cont'd

- Остается вопрос: какими предположить распределения p_c?
- Часто берут сферические гауссианы, но это не слишком гибкий вариант: кластер может быть вытянут в ту или иную сторону.
- Мы будем брать эллиптические гауссианы.
- *Гипотеза* 2: Каждый кластер c описывается d–мерной гауссовской плотностью с центром $\mu_c = \{\mu_{c1}, \dots, \mu_{cd}\}$ и диагональной матрицей ковариаций $\Sigma_c = \mathrm{diag}(\sigma_{c1}^2, \dots, \sigma_{c2}^2)$ (т.е. по каждой координате своя дисперсия).

Постановка задачи и общий вид алгоритма

- В этих предположениях получается в точности задача разделения смеси вероятностных распределений. Для этого и нужен EM–алгоритм.
- Каждый тестовый пример описывается своими координатами $(f_1(x), \dots, f_n(x))$.
- Скрытые переменные в данном случае — вероятности g_{ic} того, что объект x_i принадлежит кластеру $c \in C$.

Идея алгоритма

- E–шаг: по формуле Байеса вычисляются скрытые переменные g_{ic}:

Идея алгоритма

- E–шаг: по формуле Байеса вычисляются скрытые переменные g_{ic}:

$$g_{ic} = \frac{w_c p_c(x_i)}{\sum_{c' \in C} w_{c'} p_{c'}(x_i)}.$$

Идея алгоритма

- E–шаг: по формуле Байеса вычисляются скрытые переменные g_{ic}:

$$g_{ic} = \frac{w_c p_c(x_i)}{\sum_{c' \in C} w_{c'} p_{c'}(x_i)}.$$

- M–шаг: с использованием g_{ic} уточняются параметры кластеров w, μ, σ:

Идея алгоритма

- E–шаг: по формуле Байеса вычисляются скрытые переменные g_{ic}:

$$g_{ic} = \frac{w_c p_c(x_i)}{\sum_{c' \in C} w_{c'} p_{c'}(x_i)}.$$

- M–шаг: с использованием g_{ic} уточняются параметры кластеров w, μ, σ:

$$w_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_{ic},$$

Идея алгоритма

- E–шаг: по формуле Байеса вычисляются скрытые переменные g_{ic}:

$$g_{ic} = \frac{w_c p_c(x_i)}{\sum_{c' \in C} w_{c'} p_{c'}(x_i)}.$$

- M–шаг: с использованием g_{ic} уточняются параметры кластеров w, μ, σ:

$$w_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_{ic}, \quad \mu_{cj} = \frac{1}{n w_c} \sum_{i=1}^{n} g_{ic} f_j(x_i),$$

Идея алгоритма

- E–шаг: по формуле Байеса вычисляются скрытые переменные g_{ic}:

$$g_{ic} = \frac{w_c p_c(x_i)}{\sum_{c' \in C} w_{c'} p_{c'}(x_i)}.$$

- M–шаг: с использованием g_{ic} уточняются параметры кластеров w, μ, σ:

$$w_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_{ic}, \quad \mu_{cj} = \frac{1}{n w_c} \sum_{i=1}^{n} g_{ic} f_j(x_i),$$

$$\sigma_{cj}^2 = \frac{1}{n w_c} \sum_{i=1}^{n} g_{ic} \left(f_j(x_i) - \mu_{cj} \right)^2.$$

Алгоритм

`EMCluster`$(X, |C|)$:

- Инициализировать $|C|$ кластеров; начальное приближение:
  $w_c := 1/|C|$, $\mu_c :=$ случайный x_i,
  $\sigma_{cj}^2 := \frac{1}{n|C|}\sum_{i=1}^{n}\left(f_j(x_i) - \mu_{cj}\right)^2$.
- Пока принадлежность кластерам не перестанет изменяться:
  - E–шаг: $g_{ic} := \frac{w_c p_c(x_i)}{\sum_{c' \in C} w_{c'} p_{c'}(x_i)}$.
  - M–шаг: $w_c = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g_{ic}$, $\mu_{cj} = \frac{1}{n w_c}\sum_{i=1}^{n} g_{ic} f_j(x_i)$,

$$\sigma_{cj}^2 = \frac{1}{n w_c}\sum_{i=1}^{n} g_{ic}\left(f_j(x_i) - \mu_{cj}\right)^2.$$

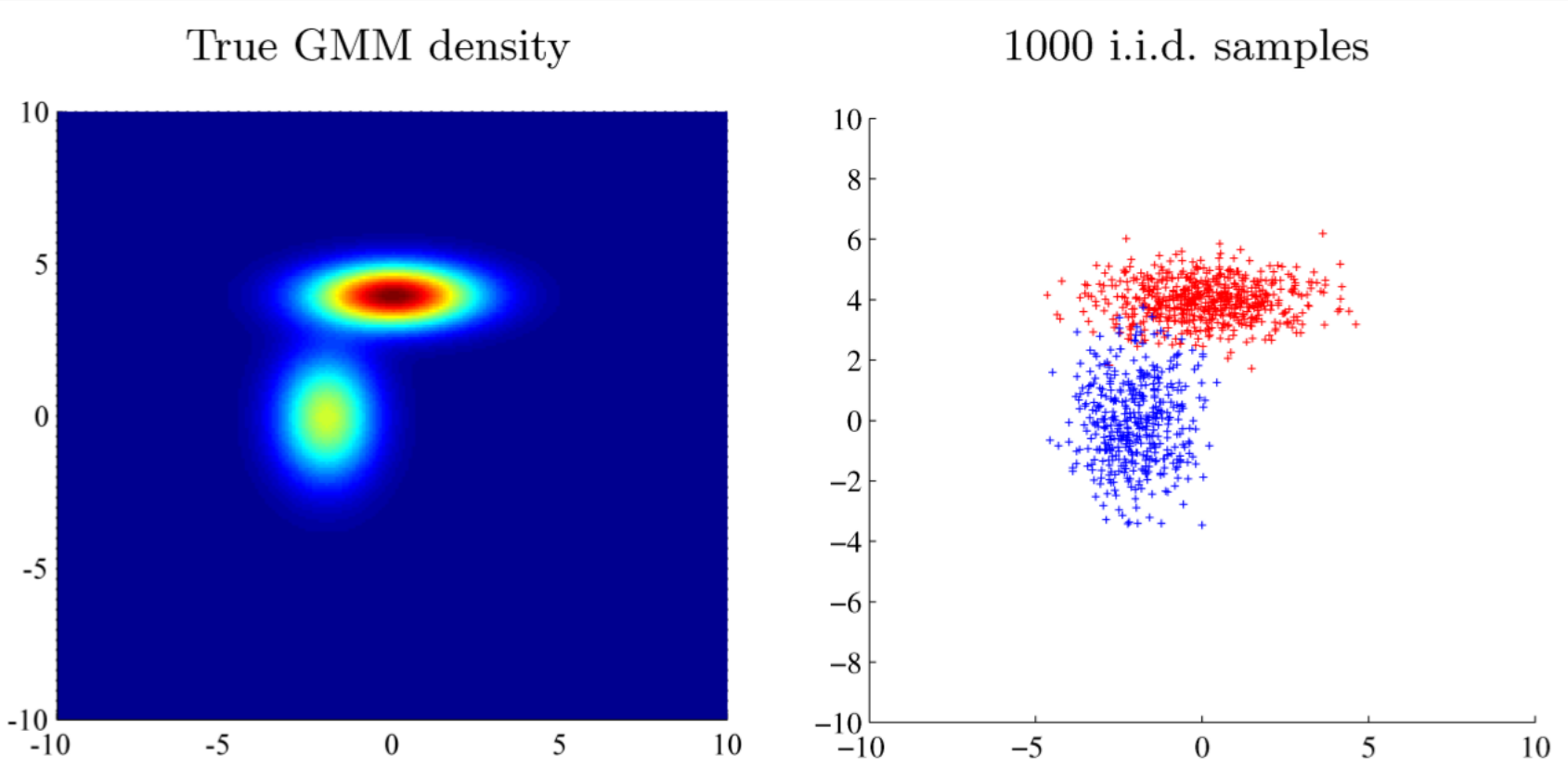
  - Определить принадлежность x_i к кластерам:

$$\mathrm{clust}_i := \arg\max_{c \in C} g_{ic}.$$

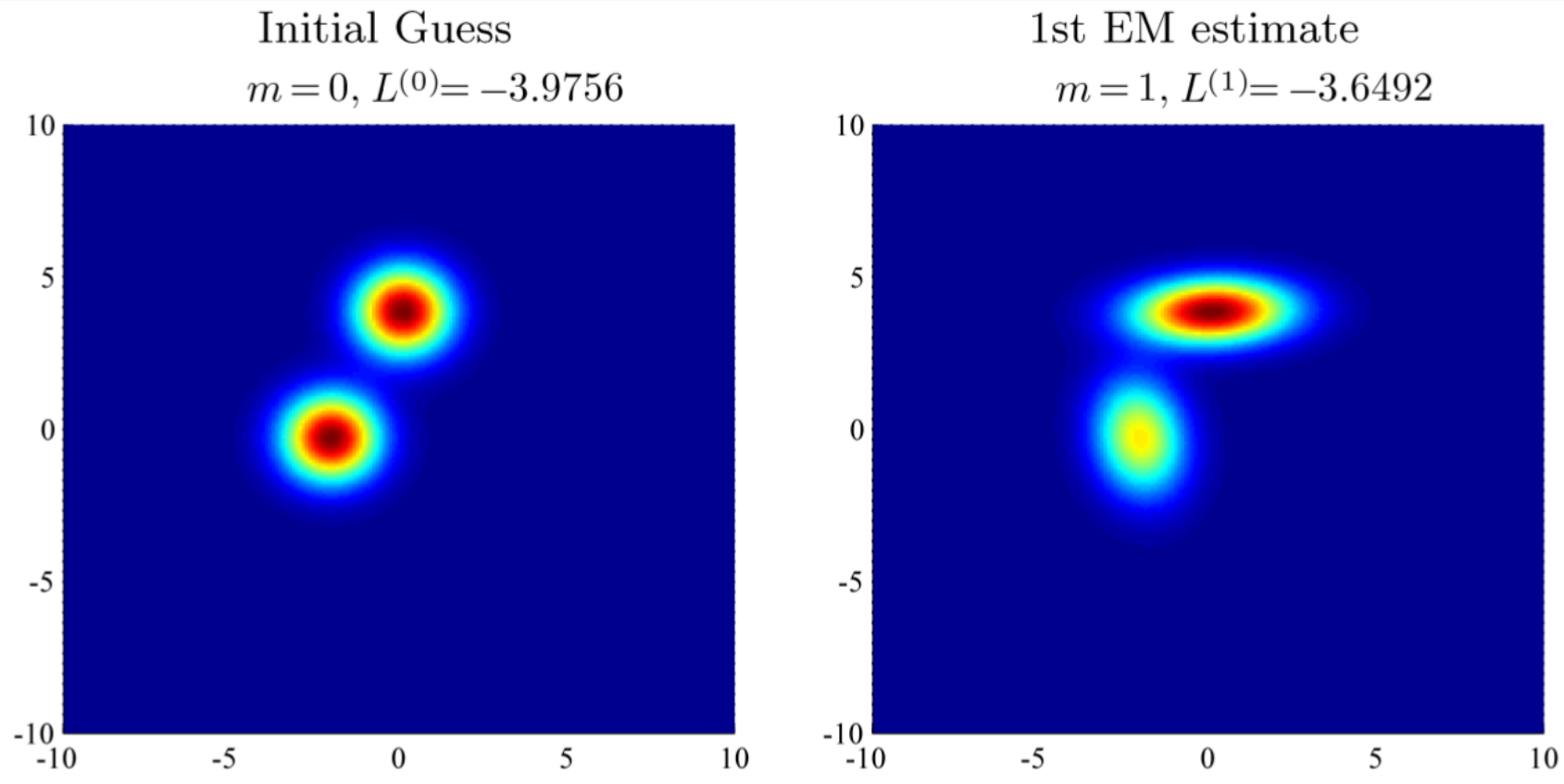
Упражнение

Упражнение. Докажите, что E-шаг и M-шаг действительно в данном случае так выглядят.

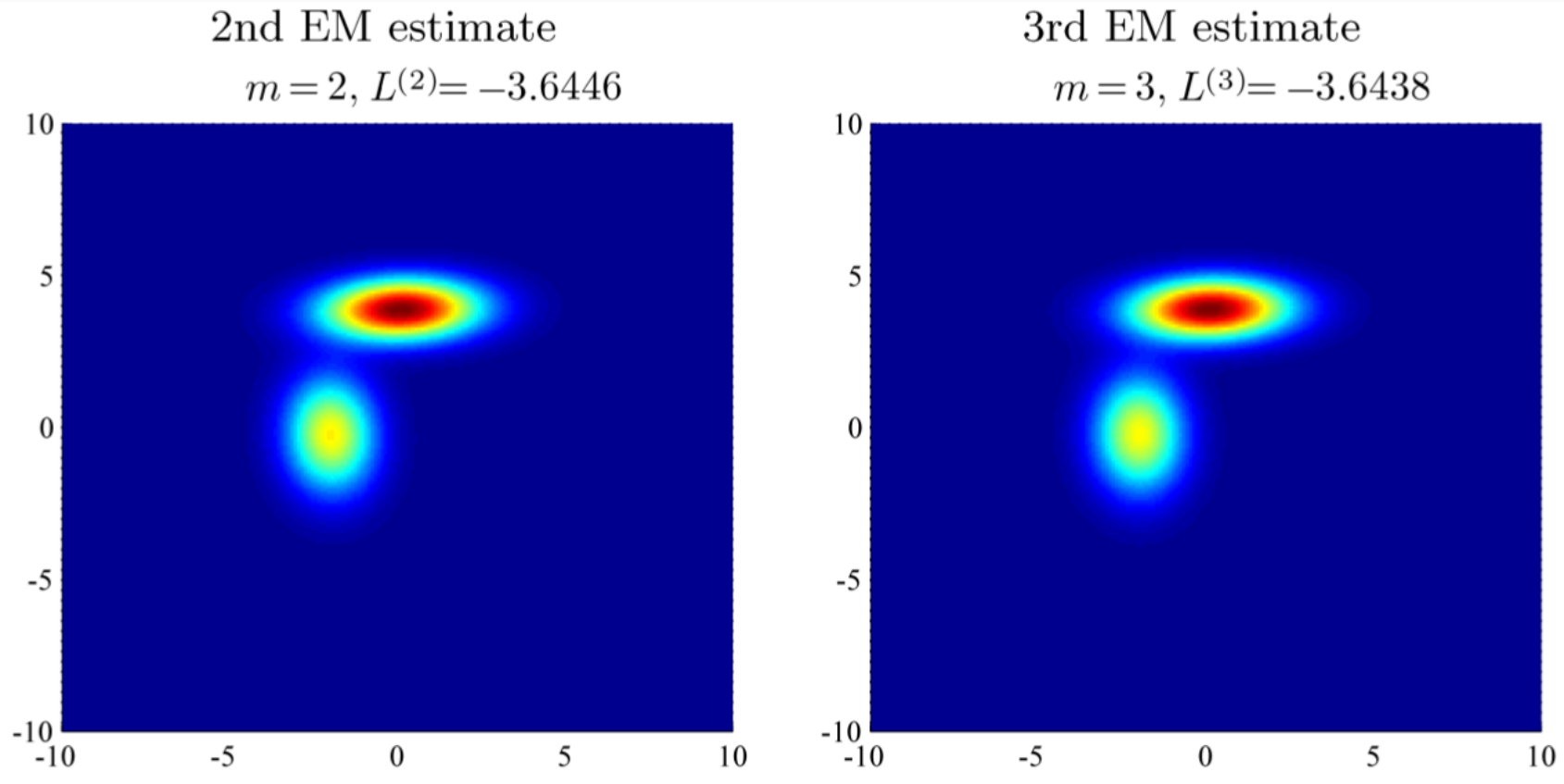
Пример


True GMM density
1000 i.i.d. samples
10
5
0
-5
-10
-10
-5
0
5
10
10
8
6
4
2
0
−2
−4
−6
−8
−10
−10
−5
0
5
10

Пример


Initial Guess
$m = 0$, $L^{(0)} = -3.9756$
1st EM estimate
$m = 1$, $L^{(1)} = -3.6492$
10
5
0
-5
-10
-10
-5
0
5
10

Пример


2nd EM estimate
$m = 2,\ L^{(2)} = -3.6446$
3rd EM estimate
$m = 3,\ L^{(3)} = -3.6438$
10
5
0
-5
-10
-10
-5
0
5
10

Проблема

- Остается проблема: нужно задавать количество кластеров.

Суть алгоритма k--средних

- Один из самых известных алгоритмов кластеризации – алгоритм k-средних – это фактически упрощение алгоритма EM.
- Разница в том, что мы не считаем вероятности принадлежности кластерам, а жестко приписываем каждый объект одному кластеру.
- Кроме того, в алгоритме k–средних форма кластеров не настраивается (но это не так важно).

Цель

- Цель алгоритма k–средних — минимизировать меру ошибки

$$E(X, C) = \sum_{i=1}^{n} ||x_i - \mu_i||^2,$$

  где μ_i — ближайший к x_i центр кластера.
- Т.е. мы не относим точки к кластерам, а двигаем центры, а принадлежность точек определяется автоматически.

Алгоритм неформально

- Идея та же, что в EM:
  - Проинициализировать.
  - Классифицировать точки по ближайшему к ним центру кластера.
  - Перевычислить каждый из центров.
  - Если ничего не изменилось, остановиться, если изменилось — повторить.

Алгоритм

`kMeans`$(X, |C|)$:

- Инициализировать центры $|C|$ кластеров $\mu_1, \dots, \mu_{|C|}$.
- Пока принадлежность кластерам не перестанет изменяться:
  - Определить принадлежность x_i к кластерам:

$$\mathrm{clust}_i := \arg\min_{c \in C} \rho(x_i, \mu_c).$$

  - Определить новое положение центров кластеров:

$$\mu_c := \frac{\sum_{\mathrm{clust}_i = c} f_j(x_i)}{\sum_{\mathrm{clust}_i = c} 1}.$$

Semi--supervised clustering

- И EM, и k–means хорошо обобщаются на случай частично обученных кластеров.
- То есть про часть точек уже известно, какому кластеру они принадлежат.
- Как это учесть?

Semi--supervised clustering

- Чтобы учесть информацию о точке x_i, достаточно для EM положить скрытую переменную g_{ic} равной тому кластеру, которому нужно, с вероятностью 1, а остальным — с вероятностью 0, и не пересчитывать.
- Для k–means то же самое, но для clust_i.

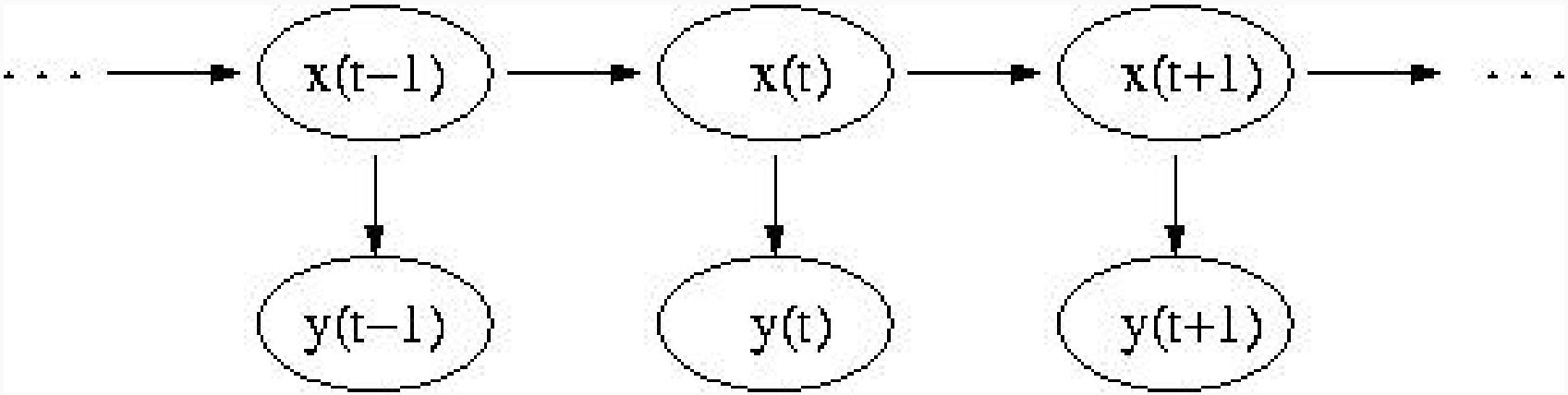
Скрытые марковские модели: основное

Марковские цепи

- Марковская цепь задаётся начальным распределением вероятностей $p^0(x)$ и вероятностями перехода $T(x'; x)$.
- $T(x'; x)$ — это распределение следующего элемента цепи в зависимости от следующего; распределение на $(t+1)$–м шаге равно
$$p^{t+1}(x') = \int T(x'; x) p^t(x) dx.$$
- В дискретном случае $T(x'; x)$ — это матрица вероятностей $p(x' = i | x = j)$.

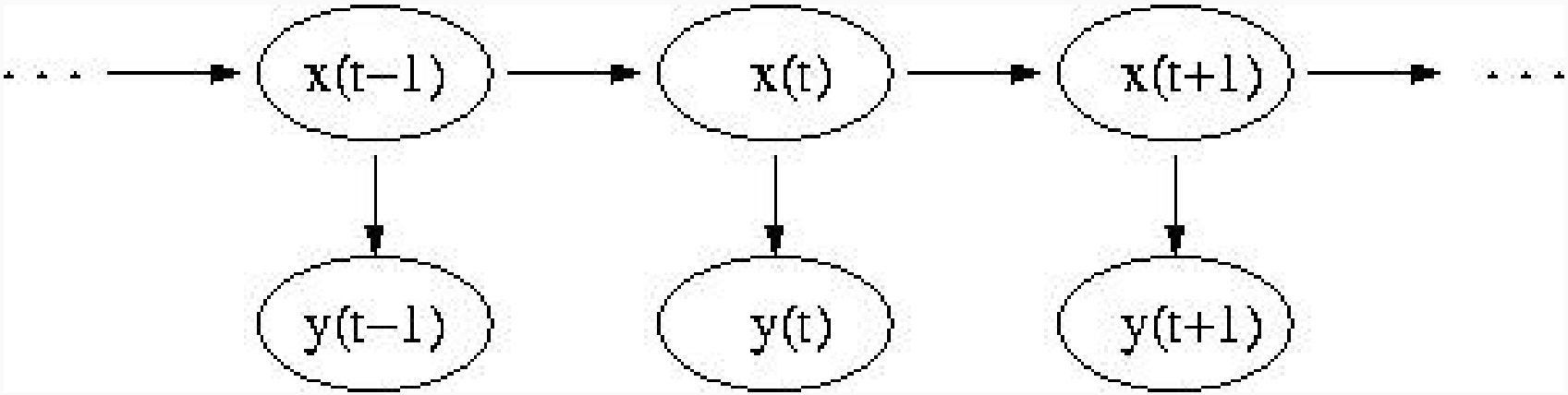
Дискретные марковские цепи

- Мы будем находиться в дискретном случае.
- Марковская модель — это когда мы можем наблюдать какие-то функции от марковского процесса.



Дискретные марковские цепи

- Здесь $x(t)$ — сам процесс (модель), а $y(t)$ — то, что мы наблюдаем.
- Задача — определить скрытые параметры процесса.



Дискретные марковские цепи

- Главное свойство — следующее состояние не зависит от истории, только от предыдущего состояния.

$$p(x(t) = x_j | x(t-1) = x_{j_{t-1}}, \dots, x(1) = x_{j_1}) = \\ = p(x(t) = x_j | x(t-1) = x_{j_{t-1}}).$$

- Более того, эти вероятности $a_{ij} = p(x(t) = x_j | x(t-1) = x_i)$ ещё и от времени t не зависят.
- Эти вероятности и составляют матрицу перехода $A = (a_{ij})$.

Вероятности перехода

- Естественные свойства:
- $a_{ij} \geq 0$.
- $\sum_j a_{ij} = 1$.

Прямая задача

- Естественная задача: с какой вероятностью выпадет та или иная последовательность событий?
- Т.е. найти нужно для последовательности $Q = q_{i_1} \dots q_{i_k}$

$$p(Q|\text{модель}) = p(q_{i_1})p(q_{i_2}|q_{i_1}) \dots p(q_{i_k}|q_{i_{k-1}}).$$

- Казалось бы, это тривиально.
- Что же сложного в реальных задачах?

Скрытые марковские модели

- А сложно то, что никто нам не скажет, что модель должна быть именно такой.
- И, кроме того, мы обычно наблюдаем не $x(t)$, т.е. реальные состояния модели, а $y(t)$, т.е. некоторую функцию от них (данные).
- Пример: распознавание речи.

Задачи скрытых марковских моделей

- Первая: найти вероятность последовательности наблюдений в данной модели.
- Вторая: найти «оптимальную» последовательность состояний при условии данной модели и данной последовательности наблюдений.
- Третья: найти наиболее правдоподобную модель (параметры модели).

Состояния и наблюдаемые

- $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ — множество состояний.
- $V = \{v_1, \dots, v_m\}$ — алфавит, из которого мы выбираем наблюдаемые y (множество значений y).
- q_t — состояние во время t, y_t — наблюдаемая во время t.

Распределения

- $a_{ij} = p(q_{t+1} = x_j | q_t = x_i)$ — вероятность перехода из i в j.
- $b_j(k) = p(v_k | x_j)$ — вероятность получить данные v_k в состоянии j.
- Начальное распределение $\pi = \{\pi_j\}$, $\pi_j = p(q_1 = x_j)$.
- Данные будем обозначать через $D = d_1 \dots d_T$ (последовательность наблюдаемых, d_i принимают значения из V).

Комментарий

- Проще говоря, вот как работает HMM (hidden Markov model).
- Выберем начальное состояние x_1 по распределению π.
- По t от 1 до T:
  - Выберем наблюдаемую d_t по распределению $p(v_k|x_j)$.
  - Выберем следующее состояние по распределению $p(q_{t+1} = x_j|q_t = x_i)$.
- Таким алгоритмом можно выбрать случайную последовательность наблюдаемых.

Задачи

- Теперь можно формализовать постановку задач.
- Первая задача: по данной модели $\lambda = (A, B, \pi)$ и последовательности D найти $p(D|\lambda)$. Фактически, это нужно для того, чтобы оценить, насколько хорошо модель подходит к данным.
- Вторая задача: по данной модели λ и последовательности D найти «оптимальную» последовательность состояний $Q = q_1 \dots q_T$. Как и раньше, будет два решения: «побитовое» и общее.
- Третья задача: оптимизировать параметры модели $\lambda = (A, B, \pi)$ так, чтобы максимизировать $p(D|\lambda)$ при данном D (найти модель максимального правдоподобия). Эта задача — главная, в ней и заключается обучение скрытых марковских моделей.

Постановка первой задачи

- Формально, первая задача выглядит так. Нужно найти

$$p(D|\lambda) = \sum_{Q} p(D|Q,\lambda)p(D|\lambda) =$$

$$= \sum_{q_1,\dots,q_T} b_{q_1}(d_1)\dots b_{q_T}(d_T)\pi_{q_1}a_{q_1q_2}\dots a_{q_{T-1}q_T}.$$

- Ничего не напоминает?

Суть решения первой задачи

- Правильно, это такая же задача маргинализации, как мы решаем всё время.
- Мы воспользуемся так называемой forward–backward procedure, по сути — динамическим программированием на решётке.
- Будем последовательно вычислять промежуточные величины вида

$$\alpha_t(i) = p(d_1 \dots d_t, q_t = x_i | \lambda),$$

т.е. искомые вероятности, но ещё с учётом текущего состояния.

Решение первой задачи

- Инициализируем $\alpha_1(i) = \pi_i b_i(d_1)$.
- Шаг индукции:

$$\alpha_{t+1}(j) = \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha_t(i) a_{ij}\right] b_j(d_{t+1}).$$

- После того как дойдём до шага T, подсчитаем то, что нам нужно:

$$p(D|\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_T(i).$$

- Фактически, это только прямой проход, обратный нам здесь не понадобился.
- Что вычислял бы обратный проход?

Обратный проход

- Он вычислял бы условные вероятности $\beta_t(i) = p(d_{t+1} \dots d_T | q_t = x_i, \lambda)$.
- Их можно вычислить, проинициализировав $\beta_T(i) = 1$, а затем по индукции:

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_j(d_{t+1}) \beta_{t+1}(j).$$

- Это нам пригодится чуть позже, при решении второй и третьей задачи.

Два варианта второй задачи

- Как мы уже упоминали, возможны два варианта.
- Первый: решать «побитово», отвечая на вопрос «какое наиболее вероятное состояние во время j?».
- Второй: решать задачу «какая наиболее вероятная последовательность состояний?».

Побитовое решение

- Рассмотрим вспомогательные переменные

$$\gamma_t(i) = p(q_t = x_i | D, \lambda).$$

- Наша задача – найти

$$q_t = \arg\max_{1 \le i \le n} \gamma_t(i), \quad 1 \le t \le T.$$

- Как это сделать?

Побитовое решение

- Выражаем через α и β:

$$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{p(D|\lambda)} = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{i=1}^{n} \alpha_t(i)\beta_t(i)}.$$

- На знаменатель можно не обращать внимания — нам нужен $\arg\max$.

Решение относительно последовательности

- Чтобы ответить на вопрос о наиболее вероятной последовательности, мы будем использовать так называемый *алгоритм Витерби* (то есть, по сути, то же самое динамическое программирование).
- Наши вспомогательные переменные — это

$$\delta_t(i) = \max_{q_1,\dots,q_{t-1}} p\left(q_1 q_2 \dots q_t = x_i, d_1 d_2 \dots d_t | \lambda\right).$$

Решение относительно последовательности

- Т.е. $\delta_t(i)$ — максимальная вероятность достичь состояния x_i на шаге t среди всех путей с заданными наблюдаемыми.
- По индукции:

$$\delta_{t+1}(j) = \left[\max_i \delta_t(i) a_{ij}\right] b_j(d_{t+1}).$$

- И надо ещё запоминать аргументы, а не только значения; для этого будет массив $\psi_t(j)$.

Решение относительно последовательности: алгоритм

- Проинициализируем $\delta_1(i) = \pi_i b_i(d_1)$, $\psi_1(i) = []$.
- Индукция:

$$\delta_t(j) = \max_{1 \le i \le n} \left[\delta_{t-1}(i) a_{ij}\right] b_j(d_t),$$

$$\psi_t(j) = \arg\max_{1 \le i \le n} \left[\delta_{t-1}(i) a_{ij}\right].$$

- Когда дойдём до шага T, финальный шаг:

$$p^* = \max_{1 \le i \le n} \delta_T(i), \qquad q_T^* = \arg\max_{1 \le i \le n} \delta_T(i).$$

- И вычислим последовательность: $q_t^* = \psi_{t+1}(q_{t+1}^*)$.

Общая суть третьей задачи

- Аналитически найти глобальный максимум $p(D|\lambda)$ у нас никак не получится.
- Зато мы рассмотрим итеративную процедуру (по сути — градиентный подъём), которая приведёт к локальному максимуму.
- Это называется алгоритм Баума–Велха (Baum–Welch algorithm). Он является на самом деле частным случаем алгоритма EM.

Вспомогательные переменные

- Теперь нашими вспомогательными переменными будут вероятности того, что мы во время t в состоянии x_i, а во время $t+1$ — в состоянии x_j:

$$\xi_t(i,j) = p(q_t = x_i, q_{t+1} = x_j | D, \lambda).$$

- Если переписать через уже знакомые переменные:

$$\xi_t(i,j) = \frac{\alpha_t(i) a_{ij} b_j(d_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}{p(D|\lambda)} = \frac{\alpha_t(i) a_{ij} b_j(d_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}{\sum_i \sum_j \alpha_t(i) a_{ij} b_j(d_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}.$$

- Отметим также, что $\gamma_t(i) = \sum_j \xi_t(i,j)$.

Идея

- $\sum_t \gamma_t(i)$ — это ожидаемое количество переходов из состояния x_i, а $\sum_t \xi_t(i,j)$ — из x_i в x_j.
- Теперь на шаге M мы будем переоценивать вероятности:

$$\bar{\pi}_i = \text{ожидаемая частота в } x_i \text{ на шаге } 1 = \gamma_1(i),$$

$$\bar{a}_{ij} = \frac{\text{к-во переходов из } x_i \text{ в } x_j}{\text{к-во переходов из } x_i} = \frac{\sum_t \xi_t(i,j)}{\sum_t \gamma_t(i)}.$$

$$\bar{b}_j(k) = \frac{\text{к-во появлений в } x_i \text{ и наблюдений } v_k}{\text{к-во появлений в } x_i} = \frac{\sum_{t:d_t=v_k} \gamma_t(i)}{\sum_t \gamma_t(i)}.$$

- EM-алгоритм приведёт к цели: начать с $\lambda = (A, B, \pi)$, подсчитать $\bar{\lambda} = (\bar{A}, \bar{B}, \bar{\pi})$, снова пересчитать параметры и т.д.

Расстояние Кульбака--Лейблера

- Kullback–Leibler distance (divergence) — это информационно-теоретическая мера того, насколько далеки распределения друг от друга.

$$D_{KL}(p_1, p_2) = \sum_x p_1(x) \log \frac{p_1(x)}{p_2(x)}.$$

- Известно, что это расстояние всегда неотрицательно, равно нулю iff $p_1 \equiv p_2$.

Применительно к HMM

- Мы определим

$$p_1(Q) = \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(D|\lambda)}, \quad p_2(Q) = \frac{p(Q, D|\lambda')}{p(D|\lambda')}.$$

- Тогда p_1 и p_2 — распределения, и расстояние Kullback–Leibler:

$$0 \leq D_{LK}(\lambda, \lambda') = \sum_Q \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(D|\lambda)} \log \frac{p(Q, D|\lambda)p(D|\lambda')}{p(Q, D|\lambda')p(D|\lambda)} =$$

$$= \log \frac{p(D|\lambda')}{p(D|\lambda)} + \sum_Q \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(D|\lambda)} \log \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(Q, D|\lambda')}.$$

Вспомогательная функция

- Введём вспомогательную функцию

$$Q(\lambda, \lambda') = \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log p(Q|D, \lambda').$$

- Тогда из неравенства следует, что

$$\frac{Q(\lambda, \lambda') - Q(\lambda, \lambda)}{p(D|\lambda)} \leq \log \frac{p(D|\lambda')}{p(D|\lambda)}.$$

- Т.е., если $Q(\lambda, \lambda') > Q(\lambda, \lambda)$, то $p(D|\lambda') > p(D|\lambda)$.
- Т.е., если мы максимизируем $Q(\lambda, \lambda')$ по λ', мы тем самым будем двигаться в нужную сторону.

Функция Q

- Нужно максимизировать $Q(\lambda, \lambda')$. Перепишем:

$$Q(\lambda, \lambda') = \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log p(Q|D, \lambda') =$$

$$= \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log \pi_{q_1} \prod_t a_{q_{t-1} q_t} b_{q_t}(d_t) =$$

$$= \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log \pi_{q_1} + \sum_Q p(Q|D, \lambda) \sum_t \log a_{q_{t-1} q_t} b_{q_t}(d_t).$$

- Последнее выражение легко дифференцировать по a_{ij}, $b_i(k)$ и π_i, добавлять соответствующие множители Лагранжа и решать. Получится именно пересчёт по алгоритму Баума–Велха (проверьте!).

Специальные виды марковских моделей

Непрерывные плотности наблюдаемых

- У нас были дискретные наблюдаемые с вероятностями $B = (b_j(k))$.
- Но в реальной жизни всё сложнее: зачастую мы наблюдаем непрерывные сигналы, а не дискретные величины, и дискретизовать их или плохо, или неудобно.
- При этом саму цепь можно оставить дискретной, т.е. перейти к непрерывным $b_j(D)$.

Специальный вид плотности

- Не для всех плотностей найдены алгоритмы пересчёта (обобщения алгоритма Баума–Велха).
- Наиболее общий результат верен, когда $b_j(D)$ можно представить в виде

$$b_j(D) = \sum_{m=1}^{M} c_{jm} \mathcal{P}(D, \mu_{jm}, \sigma_{jm}),$$

  где c_{jm} — коэффициенты смеси ($\sum_m c_{jm} = 1$), а $\mathcal{P}$ — выпуклое распределение со средним μ и вариацией σ (гауссиан подойдёт).
- К счастью, такой конструкцией можно приблизить любое непрерывное распределение, поэтому это можно широко применять.

Вспомогательные переменные

- $\gamma_t(j, m)$ — вероятность быть в состоянии j во время t, причём за D отвечает m–й компонент смеси.
- Формально говоря,

$$\gamma_t(j, m) = \left[\frac{\alpha_t(j)\beta_t(j)}{\sum_{j=1}^{N} \alpha_t(j)\beta_t(j)} \right] \left[\frac{c_{jm}\mathcal{P}(d_t, \mu_{jm}, \sigma_{jm})}{\sum_{m=1}^{M} c_{jm}\mathcal{P}(d_t, \mu_{jm}, \sigma_{jm})} \right].$$

- Если $M = 1$, то это уже известные нам $\gamma_t(j)$.

Алгоритм для этого случая

- Нужно научиться пересчитывать $b_j(D)$, т.е. пересчитывать c_{jm}, μ_{jm} и σ_{jm}.
- Это делается так:

$$\bar{c}_{jm} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m)}{\sum_{t=1}^{T} \sum_{m=1}^{M} \gamma_t(j,m)},$$

$$\bar{\mu}_{jm} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m) \cdot d_t}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m)},$$

$$\bar{\sigma}_{jm} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m) \cdot (d_t - \mu_{jm})(d_t - \mu_{jm})^t}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m)}.$$

Проблема

- Как моделировать продолжительность нахождения в том или ином состоянии?
- В дискретном случае вероятность пробыть в состоянии i d шагов:

$$p_i(d) = a_{ii}^{d-1}(1 - a_{ii}).$$

- Однако для большинства физических сигналов такое экспоненциальное распределение не соответствует действительности. Мы бы хотели явно задавать плотность пребывания в данном состоянии.
- Т.е. вместо коэффициентов перехода в себя a_{ii} — явное задание распределения $p_i(d)$.

Вспомогательные переменные

- Введём переменные

$$\alpha_t(i) = p(d_1 \dots d_t, x_i \text{ заканчивается во время } t|\lambda).$$

- Всего за первые t шагов посещено r состояний $q_1 \dots q_r$, и мы там оставались $d_1, \dots, d_r$. Т.е. ограничения:

$$q_r = x_i, \qquad \sum_{s=1}^{r} d_s = t.$$

Вычисление $\alpha_t(i)$

- Тогда получается

$$\alpha_t(i) = \sum_q \sum_d \pi_{q_1} p_{q_1}(d_1) p(d_1 d_2 \dots d_{d_1} | q_1)$$
$$a_{q_1 q_2} p_{q_2}(d_2) p(d_{d_1+1} \dots d_{d_1+d_2} | q_2) \dots$$
$$\dots a_{q_{r-1} q_r} p_{q_r}(d_r) p(d_{d_1+\dots+d_{r-1}+1} \dots d_t | q_r).$$

Вычисление $\alpha_t(i)$

- По индукции

$$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{d=1}^{D} \alpha_{t-d}(j) a_{ij} p_j(d) \prod_{s=t-d+1}^{t} b_j(d_s),$$

  где D — максимальная остановка в любом из состояний.

- Тогда, как и раньше,

$$p(d|\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_T(i).$$

Вспомогательные переменные

- Для пересчёта потребуются ещё три переменные:

$$\alpha_t^*(i) = p(d_1 \dots d_t, x_i \text{ начинается во время } t+1|\lambda),$$

$$\beta_t(i) = p(d_{t+1} \dots d_T|x_i \text{ заканчивается во время } t, \lambda),$$

$$\beta_t^*(i) = p(d_{t+1} \dots d_T|x_i \text{ начинается во время } t+1, \lambda).$$

Вспомогательные переменные

- Соотношения между ними:

$$\alpha_t^*(j) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_t(i) a_{ij},$$

$$\alpha_t(i) = \sum_{d=1}^{D} \alpha_{t-d}^*(i) p_i(d) \prod_{s=t-d+1}^{t} b_i(d_s),$$

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \beta_t^*(j),$$

$$\beta_t^*(i) = \sum_{d=1}^{D} \beta_{t+d}(i) p_i(d) \prod_{s=t+1}^{t+d} b_i(d_s).$$

Формулы пересчёта

- Приведём формулы пересчёта.
- π_i — просто вероятность того, что x_i был первым состоянием:

$$\hat{\pi}_i = \frac{\pi_i \beta_0^*(i)}{p(d|\lambda)}.$$

- a_{ij} — та же формула, что обычно, только вместе с α есть ещё и β, которая говорит, что новое состояние начинается на следующем шаге:

$$\hat{a}_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \alpha_t(i) a_{ij} \beta_t^*(j)}{\sum_{k=1}^{n} \sum_{t=1}^{T} \alpha_t(i) a_{ik} \beta_t^*(k)}.$$

Формулы пересчёта

- $b_i(k)$ — отношение ожидания количества событий $d_t = v_k$ в состоянии x_i к ожиданию количества любого v_j в состоянии x_i:

$$\hat{b}_i(k) = \frac{\sum_{t=1, d_t=v_k}^{T} \left(\sum_{\tau<t} \alpha^*_\tau(i)\beta^*_\tau(i) - \sum_{\tau<t} \alpha_\tau(i)\beta_\tau(i) \right)}{\sum_{k=1}^{m} \sum_{t=1, d_t=v_k}^{T} \left(\sum_{\tau<t} \alpha^*_\tau(i)\beta^*_\tau(i) - \sum_{\tau<t} \alpha_\tau(i)\beta_\tau(i) \right)}.$$

- $p_i(d)$ — отношение ожидания количества раз, которые x_i случилось с продолжительностью d, к количеству раз, которые x_i вообще случалось:

$$\hat{p}_i(d) = \frac{\sum_{t=1}^{T} \alpha^*_t(i) p_i(d) \beta_{t+d}(i) \prod_{s=t+1}^{t+d} b_i(d_s)}{\sum_{d=1}^{D} \sum_{t=1}^{T} \alpha^*_t(i) p_i(d) \beta_{t+d}(i) \prod_{s=t+1}^{t+d} b_i(d_s)}.$$

За и против

- Такой подход очень полезен, когда $p_i(d)$ далеко от экспоненциального.
- Однако он сильно увеличивает вычислительную сложность (в D^2 раз).
- И, кроме того, становится гораздо больше параметров, т.е. нужно, вообще говоря, больше данных, чтобы эти параметры надёжно оценить.

Параметрическая продолжительность состояния

- Чтобы уменьшить количество параметров, можно иногда считать, что $p_i(d)$ — классическое распределение с не слишком большим количеством параметров.
- Например, $p_i(d)$ может быть равномерным, или нормальным ($p_i(d) = \mathcal{N}(d, \mu_i, \sigma_i^2)$), или гамма–распределением:

$$p_i(d) = \frac{\eta_i^{\nu_i} d^{\nu_i - 1} e^{-\eta_i d}}{\Gamma(\nu_i)}.$$

Спасибо!

Спасибо за внимание!