

Dipartimento di Informatica

Università di Verona

A.A. 2014-15

Teoria e Tecniche del Riconoscimento

**Stima dei parametri:
approccio Maximum Likelihood,
approccio Bayesiano,
Expectation-Maximization**

Introduzione

- Per creare un classificatore ottimale che utilizzi la regola di decisione Bayesiana è necessario conoscere:
 - Le *probabilità a priori* $P(\omega_i)$
 - Le *densità condizionali* $p(\mathbf{x} | \omega_i)$
- Le performance di un classificatore dipendono fortemente dalla bontà di queste componenti
- ***NON SI HANNO PRATICAMENTE MAI TUTTE QUESTE INFORMAZIONI!***

- Più spesso, si hanno unicamente:
 - Una *vaga conoscenza del problema*, da cui estrarre vaghe probabilità a priori.
 - *Alcuni pattern particolarmente rappresentativi, training data*, usati per *addestrare* il classificatore (spesso troppo pochi!)
- La stima delle probabilità a priori di solito non risulta particolarmente difficoltosa.
- La stima delle densità condizionali è più complessa.

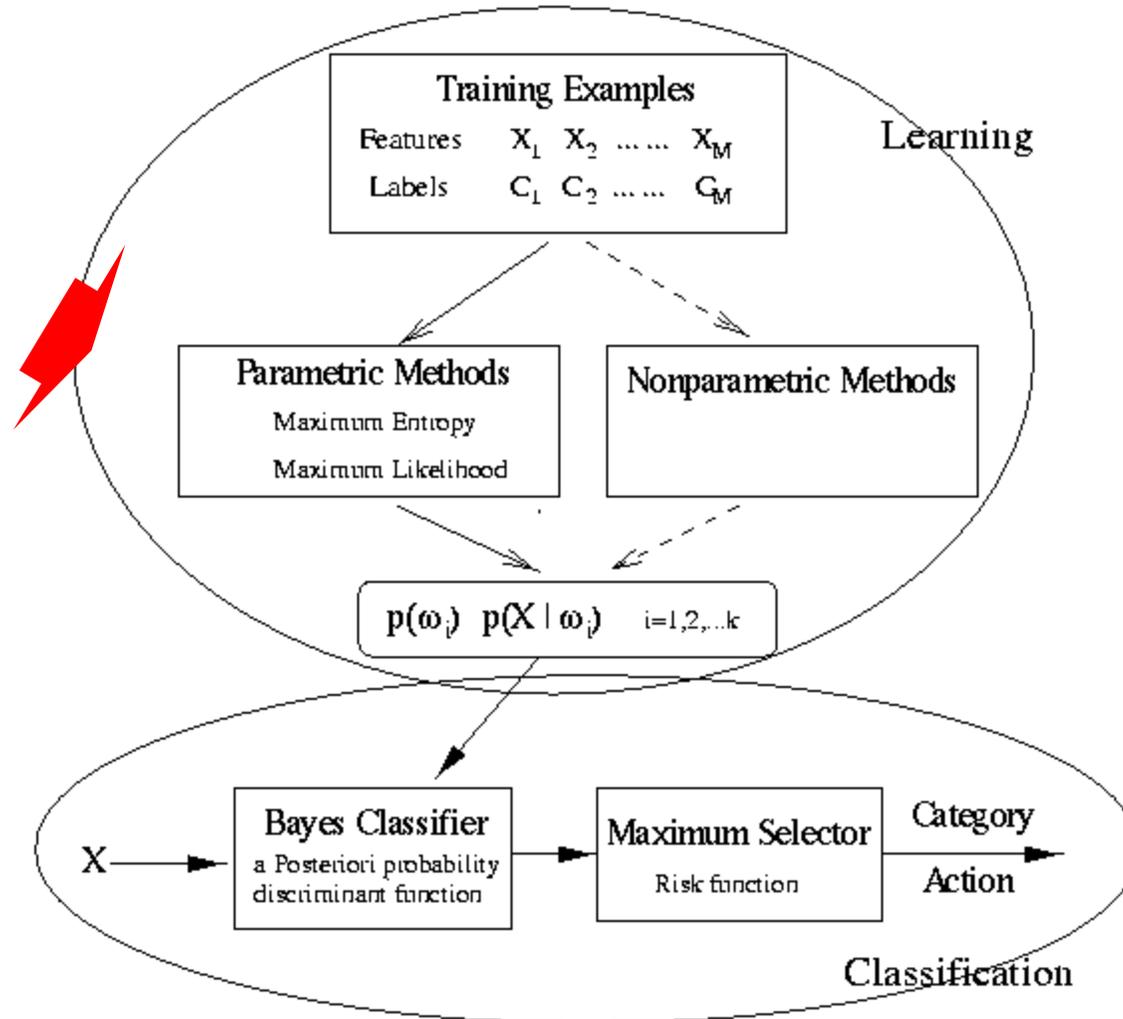
- Assunto che la conoscenza, benché approssimativa, delle densità a priori non presenta problemi, per quanto riguarda le densità condizionali le problematiche si possono suddividere in:
 1. *Stimare la funzione sconosciuta* $p(\mathbf{x} | \omega_j)$
 2. *Stimare i parametri sconosciuti della funzione conosciuta* $p(\mathbf{x} | \omega_j)$

Per es., stimare il vettore $\boldsymbol{\theta}_j = (\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)$ se
 $p(\mathbf{x} | \omega_j) \approx N(\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)$

Stima dei parametri

- Il secondo punto risulta di gran lunga più semplice (sebbene complesso!), e rappresenta un problema classico nella statistica.
- Trasferito nella *pattern recognition*, un approccio è quello di
 - 1) stimare i parametri dai dati di training
 - 2) usare le stime risultanti come se fossero valori veri
 - 3) utilizzare infine la teoria di decisione Bayesiana per usare un classificatore

Uno sguardo d'insieme



Stima dei parametri – Probabilità a priori

- Supponiamo di avere un insieme di n dati di training in cui ad ogni pattern è assegnata un'etichetta d'identità (ossia conosco per certo a quale stato ω_j appartiene il pattern k -esimo)
- ➔ *problema di learning dei parametri supervisionato*

- Allora

$$P(\omega_i) = \frac{n_i}{n}$$

dove n_i è il numero di campioni con etichetta ω_i

Stima dei parametri – Class conditional

- Supponiamo di avere c set di campioni D_1, D_2, \dots, D_c tracciati indipendentemente in accordo alla densità $p(\mathbf{x}|\omega_j)$
 - Assumiamo che $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ abbia forma parametrica conosciuta
- Il problema di stima dei parametri consiste nello stimare i parametri che definiscono $p(\mathbf{x}|\omega_j)$
- Per semplificare il problema, assumiamo inoltre che:
 - i campioni appartenenti al set D_i non danno informazioni relative ai parametri di $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ se $i \neq j$.

Stima dei parametri – Due approcci

- Specificatamente, il problema può essere formulato come:
 - Dato un set di training $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$
 - $p(x|\omega)$ è determinata da θ , che è un vettore rappresentante i parametri necessari
(p.e., $\theta = (\mu, \Sigma)$ se $p(x | \omega) \approx N(\mu, \Sigma)$)
 - Vogliamo trovare il migliore θ usando il set di training.
- Esistono due approcci
 - Stima **Maximum-likelihood (ML)**
 - Stima **parametrica Bayesiana**

Stima dei parametri – Due approcci (2)

- Approccio Maximum Likelihood
 - I parametri sono *quantità fissate* ma sconosciute
 - La migliore stima dei loro valori è quella che *massimizza la probabilità di ottenere i dati di training*
- Approccio Bayesiano
 - I parametri sono *variabili aleatorie* aventi determinate probabilità a priori
 - Le osservazioni dei dati di training trasformano queste probabilità in probabilità a posteriori

Stima dei parametri – Due approcci (3)

- Aggiungendo campioni di training il risultato è di rifinire meglio la forma delle densità a posteriori, causando un innalzamento di esse in corrispondenza dei veri valori dei parametri (fenomeno di *Bayesian Learning*).
- I risultati dei due approcci, benché proceduralmente diversi, sono qualitativamente simili.

Approccio *Maximum Likelihood*

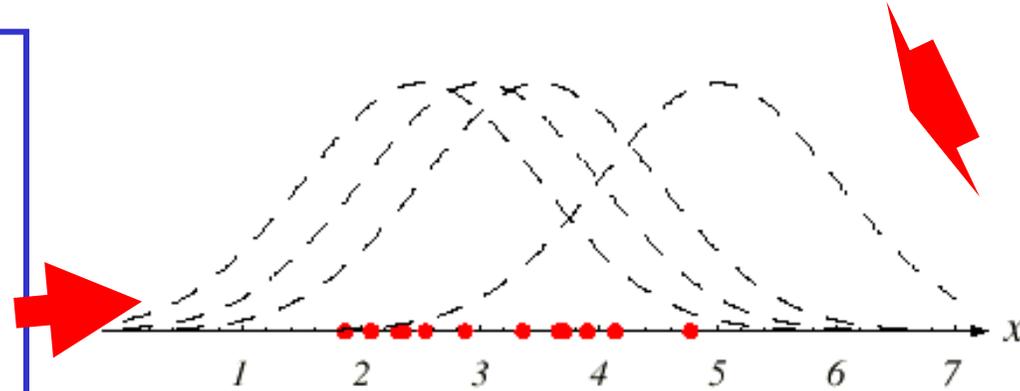
- In forza dell'ipotesi di partenza del problema, poiché i pattern del set \mathbf{D} sono i.i.d., abbiamo che:

$$p(\mathbf{D} | \boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^n p(x_k | \boldsymbol{\theta})$$

- Vista come funzione di $\boldsymbol{\theta}$, $p(\mathbf{D}|\boldsymbol{\theta})$ viene chiamata *likelihood* di $\boldsymbol{\theta}$ rispetto al set di campioni \mathbf{D} .
- La stima di Maximum Likelihood di $\boldsymbol{\theta}$ è, per definizione, il valore $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ che massimizza $p(\mathbf{D}|\boldsymbol{\theta})$;
- Ricordiamo l'assunzione che $\boldsymbol{\theta}$ è fissato ma sconosciuto

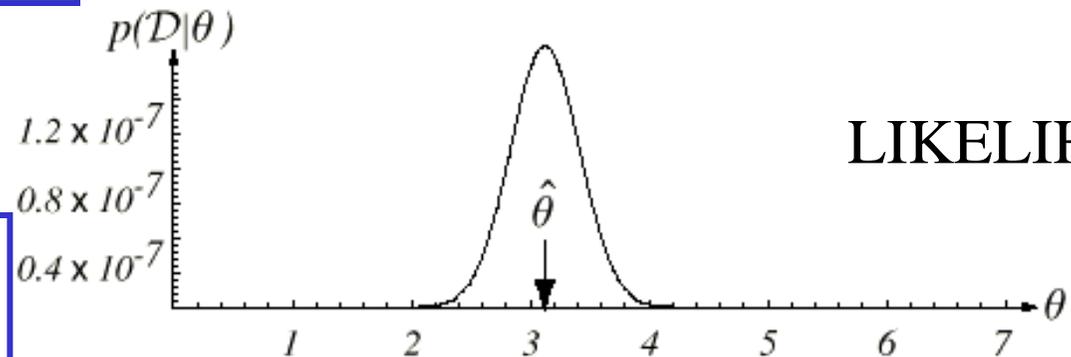
Approccio Maximum Likelihood (2)

Punti di training 1-D
assunti generati da una
densità gaussiana di
varianza fissata ma
media sconosciuta

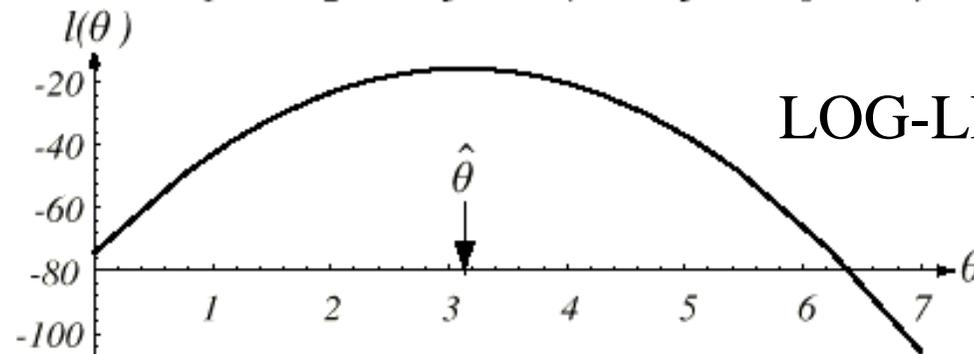


4 delle
infinite
possibili
gaussiane

NB: La likelihood
 $p(D|\theta)$ è funzione di
 θ , mentre la densità
condizionale $p(x|\theta)$
funzione di x



LIKELIHOOD



LOG-LIKELIHOOD

Approccio Maximum Likelihood (3)

- Se il numero di parametri da stimare è p , sia $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1 \dots \theta_p)^t$ e

$$\nabla \boldsymbol{\theta} \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \theta_p} \end{bmatrix}$$

- Per scopi analitici risulta più semplice lavorare con il logaritmo della likelihood.
- Definiamo quindi $l(\boldsymbol{\theta})$ come *funzione di log-likelihood*

$$l(\boldsymbol{\theta}) \equiv \ln p(D | \boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^n \ln p(x_k | \boldsymbol{\theta})$$

Approccio Maximum Likelihood (4)

- Lo scopo è di ottenere quindi il vettore

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} l(\boldsymbol{\theta})$$

in cui la dipendenza sul data set \mathbf{D} è implicita.

- Pertanto per ricavare il max:

$$l(\boldsymbol{\theta}) \equiv \ln p(\mathbf{D} | \boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^n \ln p(x_k | \boldsymbol{\theta})$$



$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} l(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^n \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \ln p(x_k | \boldsymbol{\theta})$$

da cui vogliamo ottenere $\nabla_{\boldsymbol{\theta}} l(\boldsymbol{\theta}) = 0$

Approccio Maximum Likelihood (5)

- Formalmente, una volta trovato il set di parametri che rende vera, è necessario controllare che la soluzione trovata sia effettivamente un massimo globale, piuttosto che un massimo locale o un flesso o peggio ancora un punto di minimo.
- Bisogna anche controllare cosa accade ai bordi degli estremi dello spazio dei parametri
- Applichiamo ora l'approccio ML ad alcuni casi specifici.

Maximum Likelihood: caso Gaussiano

- Consideriamo che i campioni siano generati da una popolazione normale multivariata di media $\boldsymbol{\mu}$ e covarianza $\boldsymbol{\Sigma}$.
- Per semplicità, consideriamo il caso in cui solo la media $\boldsymbol{\mu}$ sia sconosciuta. Consideriamo quindi il punto campione \mathbf{x}_k e troviamo:

$$\ln p(\mathbf{x}_k | \boldsymbol{\mu}) = -\frac{1}{2} \ln \left[(2\pi)^d |\boldsymbol{\Sigma}| \right] - \frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})$$



$$\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \ln p(\mathbf{x}_k | \boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})$$

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (2)

- Identificando $\boldsymbol{\theta}$ con $\boldsymbol{\mu}$ si deduce che la stima Maximum-Likelihood di $\boldsymbol{\mu}$ deve soddisfare la relazione:

$$\sum_{k=1}^n \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}) = 0$$

- Moltiplicando per $\boldsymbol{\Sigma}$ e riorganizzando la somma otteniamo

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbf{x}_k$$

che non è altro che la semplice *media* degli esempi di training, altresì indicata con $\hat{\boldsymbol{\mu}}_n$ per indicarne la dipendenza dalla numerosità del training set.

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (3)

- Consideriamo ora il caso più tipico in cui la distribuzione Gaussiana abbia media e covarianza ignote.
- Consideriamo prima il caso univariato $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2) = (\mu, \sigma^2)$
- Se si prende un singolo punto abbiamo

$$\ln p(x_k | \boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{2} \ln[2\pi\theta_2] - \frac{1}{2\theta_2} (x_k - \theta_1)^2$$

la cui derivata è

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} l = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \ln p(x_k | \boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta_2} (x_k - \theta_1) \\ -\frac{1}{2\theta_2} + \frac{(x_k - \theta_1)^2}{2\theta_2^2} \end{bmatrix}$$

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (4)

- Eguagliando a 0 e considerando tutti i punti si ottiene:

$$\sum_{k=1}^n \frac{1}{\hat{\theta}_2} (x_k - \hat{\theta}_1) = 0 \quad - \sum_{k=1}^n \frac{1}{\hat{\theta}_2} + \sum_{k=1}^n \frac{(x_k - \hat{\theta}_1)^2}{\hat{\theta}_2^2} = 0$$

dove $\hat{\theta}_1$ e $\hat{\theta}_2$ sono le stime ML per θ_1 e θ_2 .

- Sostituendo $\hat{\mu} = \hat{\theta}_1$ e $\hat{\sigma}^2 = \hat{\theta}_2$ si hanno le stime ML di media e varianza

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (x_k - \hat{\mu})^2$$

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (5)

- Il caso multivariato si tratta in maniera analoga con più conti. Il risultato è comunque:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbf{x}_k \quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}})(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}})^t$$

- Si noti tuttavia che la stima della covarianza è sbilanciata, i.e., il valore aspettato della varianza campione su tutti i possibili insiemi di dimensione n non è uguale alla vera varianza

$$E \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \right\} = \frac{n-1}{n} \sigma^2 \neq \sigma^2$$

Maximum-Likelihood: altri casi

- Esistono, oltre alla densità Gaussiana, anche altre famiglie di densità che costituiscono altrettante famiglie di parametri:

- *Distribuzione esponenziale*

$$p(x | \theta) = \begin{cases} \theta e^{-\theta x} & x \geq 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

- *Distribuzione uniforme*

$$p(x | \theta) = \begin{cases} 1/\theta & 0 \leq x \leq \theta \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

- *Distribuzione di Bernoulli multivariata*

Maximum-Likelihood – Modello d'errore

- In generale, se i modelli parametrici sono validi, il classificatore *maximum-likelihood* fornisce risultati eccellenti.
- Invece, se si usano famiglie parametriche scorrette, il classificatore produce forti errori
 - Questo accade anche se è nota la famiglia parametrica da usare, per esempio se si stima all'interno di una distribuzione gaussiana come parametro una varianza troppo larga.

Maximum-Likelihood – Modello d'errore (2)

- Di fatto *manca un modello d'errore che dia un voto alla parametrizzazione ottenuta.*
- Inoltre, per applicare la stima di Maximum-Likelihood, tutti i dati di training devono essere disponibili
 - Se vogliamo utilizzare nuovi dati di training, è necessario ricalcolare la procedura di stima Maximum-Likelihood.

Stima di Bayes

- A differenza dell'approccio ML, in cui supponiamo θ come fissato ma sconosciuto, *l'approccio di stima Bayesiana* dei parametri considera θ come **una variabile aleatoria**.
- In questo caso il set di dati di training D ci permette di *convertire una distribuzione a priori* $p(\theta)$ *su questa variabile in una densità di probabilità a posteriori* $p(\theta|D)$
$$p(\theta) \quad \rightarrow \quad p(\theta|D)$$
- Data la difficoltà dell'argomento, è necessario un passo indietro al concetto di classificazione Bayesiana

Approccio di stima Bayesiano – Idea centrale

- Il calcolo delle densità a posteriori $P(\omega_i|\mathbf{x})$ sta alla base della classificazione Bayesiana
- Per creare un classificatore ottimale che utilizzi la regola di decisione Bayesiana è necessario conoscere:
 - Le *probabilità a priori* $P(\omega_i)$
 - Le *densità condizionali* $p(\mathbf{x}|\omega_i)$
- Quando queste quantità sono sconosciute, bisogna ricorrere a tutte le informazioni a disposizione.

Approccio di stima Bayesiano – Idea centrale (2)

- Parte di queste informazioni può essere derivante da:
 - 1. Conoscenza a priori**
 - *Forma funzionale delle densità sconosciute*
 - *Intervallo dei valori dei parametri sconosciuti*
 - 2. Training set**
 - Sia D il *set totale di campioni*: il nostro compito si trasforma così nella stima di $P(\omega_i|\mathbf{x},D)$
- Da queste probabilità possiamo ottenere il classificatore Bayesiano.

Approccio di stima Bayesiano – Idea centrale (3)

- Dato il set di training D , la formula di Bayes diventa:

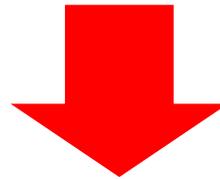
$$P(\omega_i | \mathbf{x}, D) = \frac{p(\mathbf{x} | \omega_i, D)P(\omega_i | D)}{\sum_{j=1}^c p(\mathbf{x} | \omega_j, D)P(\omega_j | D)}$$

- Assunzioni:
 - Ragionevolmente, $P(\omega_i | D) \Rightarrow P(\omega_i)$
 - Dato il caso di learning supervisionato il set D è partizionato in c set di campioni D_1, D_2, \dots, D_c con i campioni in D_i appartenenti a ω_i
 - I campioni appartenenti al set D_i non danno informazioni sui parametri di $p(\mathbf{x} | \omega_j, D)$ se $i \neq j$.

Approccio di stima Bayesiano – Idea centrale (4)

- Queste assunzioni portano a due conseguenze:
 1. Possiamo lavorare con ogni classe indipendentemente, ossia

$$P(\omega_i | \mathbf{x}, D) = \frac{p(\mathbf{x} | \omega_i, D) P(\omega_i | D)}{\sum_{j=1}^c p(\mathbf{x} | \omega_j, D) P(\omega_j | D)}$$

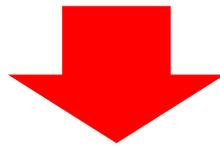


$$P(\omega_i | \mathbf{x}, D) = \frac{p(\mathbf{x} | \omega_i, D_i) P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^c p(\mathbf{x} | \omega_j, D_j) P(\omega_j)}$$

Approccio di stima Bayesiano – Idea centrale (5)

2. Poiché ogni classe può essere trattata indipendentemente, si possono evitare le distinzioni tra le classi e semplificare la notazione **riducendola a c diverse istanze dello stesso problema**, ossia:

$$P(\omega_i | \mathbf{x}, D) = \frac{p(\mathbf{x} | \omega_i, D_i) P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^c p(\mathbf{x} | \omega_j, D_j) P(\omega_j)}$$



$$p(\mathbf{x} | D)$$

Distribuzione dei parametri

- Quello che vogliamo fare è effettivamente osservare come viene ottenuta $p(\mathbf{x}|D)$ tramite l'ausilio di un modello di parametri *implicito* θ .
- Ragionevolmente, abbiamo

$$p(\mathbf{x} | D) = \int p(\mathbf{x}, \theta | D) d\theta$$

dove l'integrazione si estende su tutto lo spazio dei parametri

Distribuzione dei parametri

- Quindi

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x} | D) &= \int p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta} | D) d\boldsymbol{\theta} \\ &= \int p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta}, D) p(\boldsymbol{\theta} | D) d\boldsymbol{\theta} \end{aligned}$$

- Poichè, per ipotesi, la probabilità di \mathbf{x} è indipendente dai campioni di training D , dato $\boldsymbol{\theta}$,

$$p(\mathbf{x} | D) = \int p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta} | D) d\boldsymbol{\theta}$$

Distribuzione dei parametri

- L'equazione precedente lega esplicitamente la densità condizionale $p(\mathbf{x}|\mathbf{D})$ alla densità a posteriori $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{D})$ tramite il vettore sconosciuto di parametri $\boldsymbol{\theta}$.
- Se $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{D})$ si concentra fortemente su un valore, otteniamo una stima $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ del vettore più probabile, quindi

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{D}) \approx p(\mathbf{x} | \hat{\boldsymbol{\theta}})$$

- Ma questo approccio *permette di tenere conto dell'effetto di tutti gli altri modelli*, descritti dal valore della funzione integrale, *per tutti i possibili modelli*.

$$p(\mathbf{x} | D) = \int p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta} | D)d\boldsymbol{\theta}$$

Esempio: caso Gaussiano

$$p(\mathbf{x} | D) = \int p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta} | D)d\boldsymbol{\theta}$$

- Utilizziamo le tecniche di stima Bayesiana per calcolare la densità a posteriori $p(\boldsymbol{\theta} | D)$, e quindi la densità $p(\mathbf{x}|D)$ per il caso in cui $p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}) \equiv p(x | \mu) \approx N(\mu, \sigma^2)$ *in cui l'unica quantità sconosciuta è la media μ .*
- Devo quindi definire $p(\boldsymbol{\theta} | D) = p(\mu | D)$

Esempio: caso Gaussiano

- Con la regola di Bayes posso scrivere:

$$p(\mu | D) = \frac{p(D | \mu) p(\mu)}{\int p(D | \mu) p(\mu) d\mu}$$

**Densità
riprodotta**

PRIMO PASSO

$$p(\mu) \approx N(\mu_0, \sigma_0^2)$$

Prior coniugato

- in pratica μ_0 rappresenta la migliore scelta iniziale per il parametro μ , con σ_0^2 che ne misura l'incertezza.

Esempio: caso Gaussiano

NOTA: la scelta del prior è arbitraria, ma:

- deve essere fatta (il prior deve essere noto)
- di solito si sceglie un prior coniugato
 - prior che assicura che la forma della posterior $p(\mu/D)$ sia trattabile, cioè abbia la stessa forma della condizionale
 - Questo semplifica di molto l'analisi
 - Esempio: gaussiana per gaussiana, dirichlet per multinomiale

Esempio: caso Gaussiano

- Supponiamo di avere n campioni di training $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ e riscriviamo la densità riprodotta come

$$\begin{aligned} p(\mu | D) &= \frac{p(D | \mu) p(\mu)}{\int p(D | \mu) p(\mu) d\mu} \\ &= \alpha \prod_{k=1}^n p(x_k | \mu) p(\mu) \end{aligned}$$

dove α è un fattore di normalizzazione dipendente da D .

Esempio: caso Gaussiano

- L'equazione mostra come l'osservazione del set di esempi di training influenzi la nostra idea sul vero valore di μ ; essa relaziona la densità a priori $p(\mu)$ con la densità a posteriori $p(\mu/D)$.

SECONDO PASSO: Svolgendo i calcoli, ci si accorge che, grazie al prior normale, $p(\mu/D)$ risulta anch'essa normale, modificandosi in dipendenza del numero di campioni che formano il training set, evolvendosi in impulso di Dirac per $n \rightarrow \infty$ (fenomeno di Learning Bayesiano).

- Formalmente si giunge alle seguenti formule:

Esempio: caso Gaussiano

$$\begin{aligned} p(\mu|\mathcal{D}) &= \alpha \prod_{k=1}^n \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_k - \mu}{\sigma}\right)^2\right]}^{p(x_k|\mu)} \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu - \mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right]}^{p(\mu)} \\ &= \alpha' \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\sum_{k=1}^n \left(\frac{\mu - x_k}{\sigma}\right)^2 + \left(\frac{\mu - \mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right)\right] \\ &= \alpha'' \exp\left[-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_0^2}\right)\mu^2 - 2\left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{k=1}^n x_k + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)\mu\right]\right], \quad (29) \end{aligned}$$

Esempio: caso Gaussiano

$$p(\mu | D) = \frac{p(D | \mu) p(\mu)}{\int p(D | \mu) p(\mu) d\mu} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left\{-\frac{(\mu - \mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right\}$$

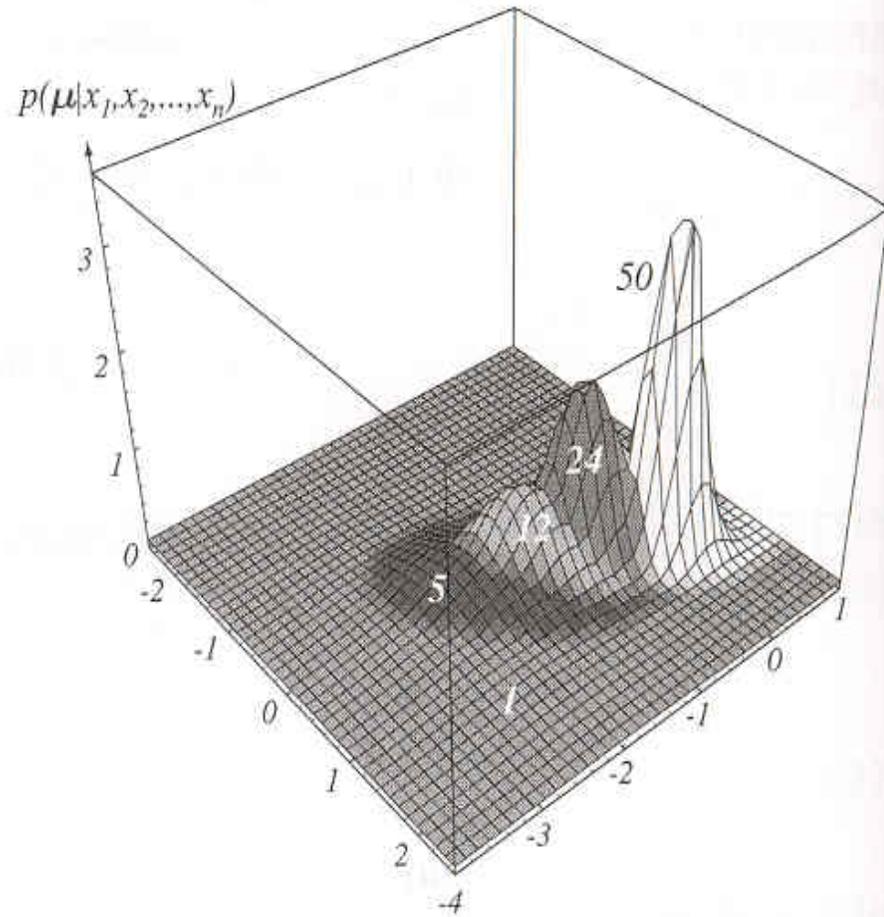
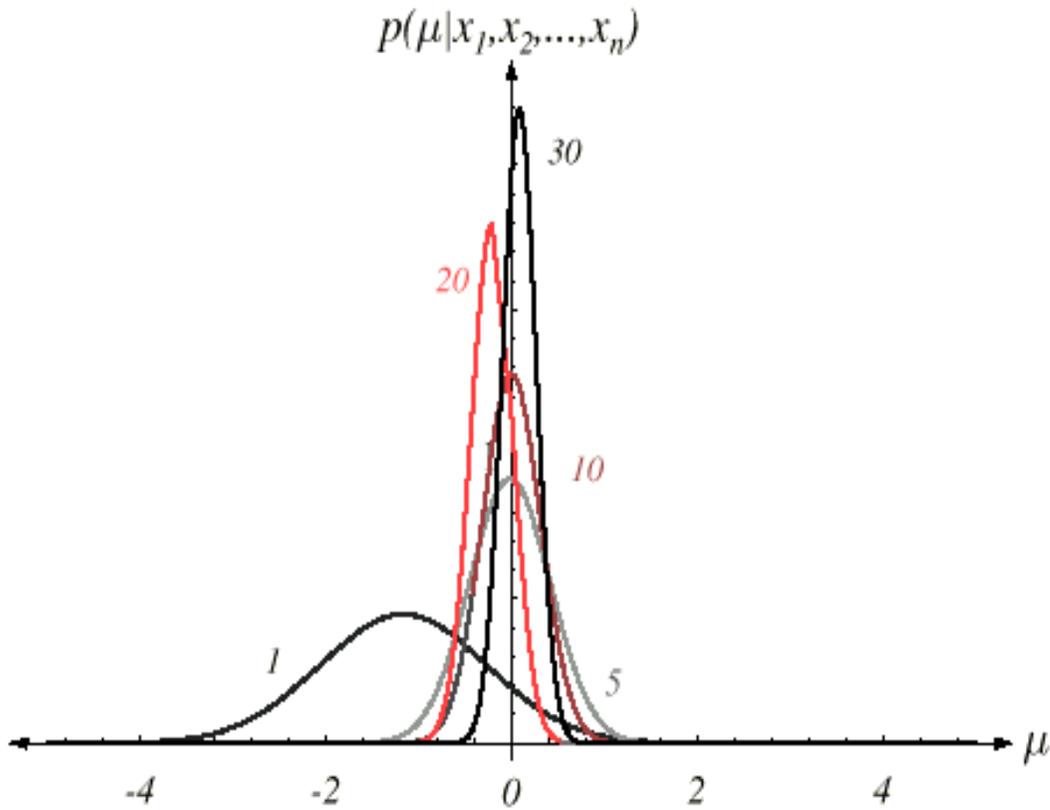
$$\text{dove } \mu_n = \frac{n\sigma_0^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k \right) + \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} \mu_0$$

$$\sigma_n^2 = \frac{\sigma_0^2 \sigma^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2}$$

μ_n rappresenta la nostra migliore scelta per μ dopo aver osservato n campioni.

σ_n^2 misura l'incertezza della nostra scelta.

Esempio: caso Gaussiano



Esempio: caso Gaussiano

TERZO PASSO: stima della densità condizionale $p(x|\mathcal{D})$

$$p(x|\mathcal{D}) = \int p(x|\mu)p(\mu|\mathcal{D}) d\mu$$

$$= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_n} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-\mu_n}{\sigma_n}\right)^2\right] d\mu$$

$$= \frac{1}{2\pi\sigma\sigma_n} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu_n)^2}{\sigma^2 + \sigma_n^2}\right] f(\sigma, \sigma_n), \quad (3)$$

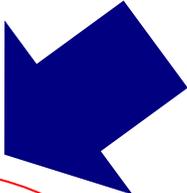
Esempio: caso Gaussiano

dove

$$f(\sigma, \sigma_n) = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{\sigma^2 + \sigma_n^2}{\sigma^2 \sigma_n^2} \left(\mu - \frac{\sigma_n^2 x + \sigma^2 \mu_n}{\sigma^2 + \sigma_n^2} \right)^2 \right] d\mu.$$

Esempio: caso Gaussiano

- Concludendo, la densità $p(\mathbf{x}/D)$ ($=P(\mathbf{x} | \omega_i, D)$) ottenuta è la densità condizionale desiderata


$$P(\omega_i | \mathbf{x}, D) = \frac{p(\mathbf{x} | \omega_i, D)P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^c p(\mathbf{x} | \omega_j, D)P(\omega_j)}$$

che assieme ai prior $P(\omega_i)$ produce le informazioni desiderate per il design del classificatore, al contrario dell'approccio ML che restituisce solo le stime puntuali $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$

Stima di Bayes: in generale

⇒ Riassumendo ed estendendole al caso generale, le formule principali viste sono:

$$p(\mathbf{x} | D) = \int p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta} | D) d\boldsymbol{\theta}$$

$$p(\mu | D) = \frac{p(D | \mu) p(\mu)}{\int p(D | \mu) p(\mu) d\mu} = \frac{p(D | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta})}{\int p(D | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}} = p(\boldsymbol{\theta} | D)$$

$$p(D | \boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k | \boldsymbol{\theta})$$

⇒ Si noti la somiglianza con l'approccio ML, con la differenza che qui non si cerca il max puntuale

Conclusioni: Bayes vs ML

- ML restituisce una stima puntuale $\hat{\Theta}$, l'approccio Bayesiano una distribuzione su θ (più ricca, tiene conto di tutti i possibili modelli)
- Bayes più accurato (in linea di principio), ML più fattibile in pratica
- Inoltre: ML, per un dataset abbastanza grande, produce risultati buoni
 - le stime risultano equivalenti per training set di cardinalità infinita (Al limite, $p(\theta|D)$ converge ad una funzione delta)

Conclusioni: Bayes vs ML

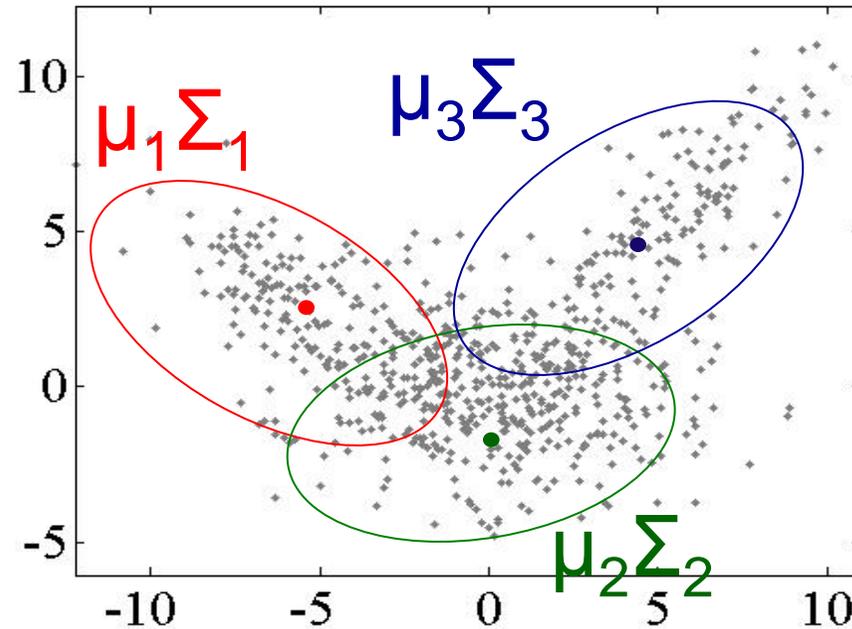
- In Bayes occorre stimare i prior $\hat{\Theta}$
- Praticamente, gli approcci sono differenti per vari motivi:
 - Complessità computazionale
 - Interpretabilità
 - Affidabilità delle informazioni a priori

Mapping slide-libro

- Cap.3 Duda until 3.4.2, 3.5.1



Expectation-Maximization



$$p(v^{(t)} | h^\theta) = \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$$



Introduction - Maximum Likelihood Estimation (MLE) problem

- INPUT:
 - A dataset of **observations** $v = \{v^{(t)}\}_{t=1\dots T}$
 - An *implicit* knowledge, i.e.
 - the dataset comes from a parametric random process
 - such random process has a known form (f.i. a mixture of Gaussians)
 - other (i.i.d. data, usually)
- OUTPUT:
 - the **set of parameters** h^θ that maximizes the *likelihood* $p(v|h^\theta)$ a.k.a. *objective function* $L(h^\theta)$



Introduction - MLE problem and EM solution

- Usually, the MLE is performed by **differentiating the likelihood** function with respect to the various parameters, and **solving for 0**

$$\frac{\partial \log p(v | h^\theta)}{\partial h_i^\theta} = 0 \quad i = 1 \dots I$$

- Sometimes, this solution is not feasible due to the **complex form of the likelihood**
- This is the situation in which the EM algorithm *helps*

Introduction - EM

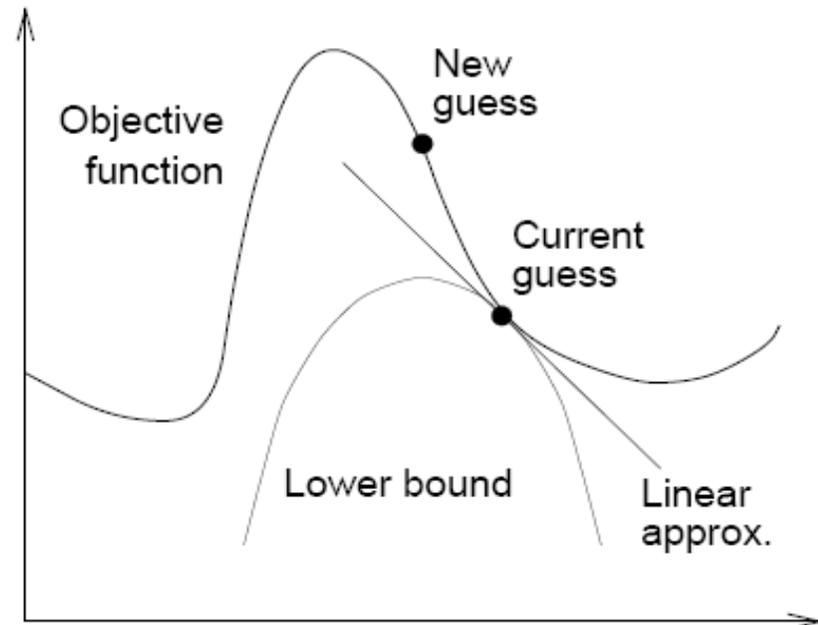


- Iterative process
- Each iteration is composed by 2 steps
 - E-step: Expectation
 - M-step: Maximization
- Convergent to a local maxima of the likelihood function
- Widespreadly used
 - genetics
 - statistics
 - econometrics



Introduction - EM placement in the maximization methods literature

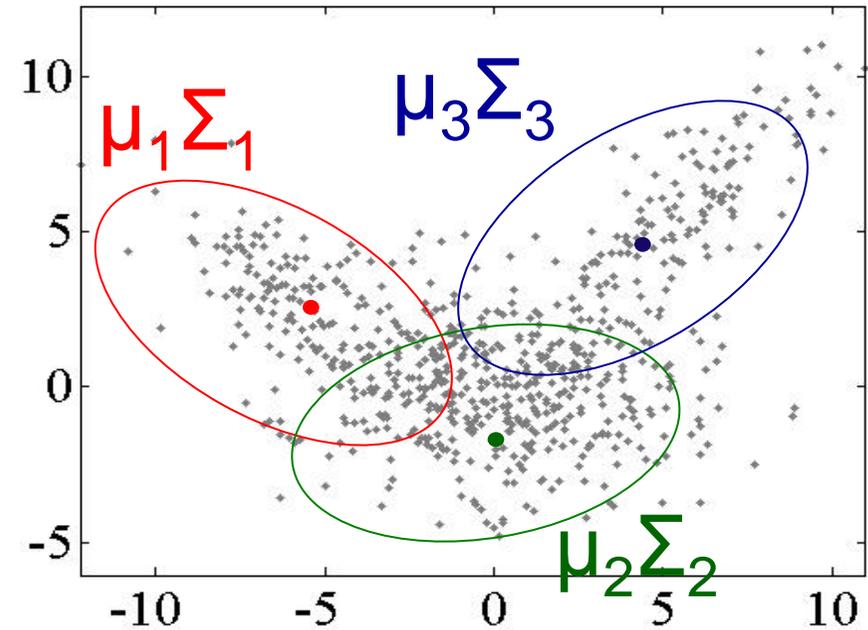
- *Gradient descent*: linear approximation to the $L(h^\theta)$
 - we don't know how good is the approximation
 - we don't know how big the step to do
- *Newton methods*: quadratic approx
 - same problem as above
- *EM*:
 - at each E step it builds a local lower bound of the objective function
 - at each M step, a novel h^θ which corresponds to a bigger value of the objective function





Introduction - MLE example - Mixture of Gaussians (MoG)

- $p(v^{(t)} | h^\theta) = \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$
- $p(v | h^\theta) = \prod_{t=1}^T p(v^{(t)} | h^\theta)$
- $\log p(v | h^\theta) = \sum_{t=1}^T \log p(v^{(t)} | h^\theta)$
- $\log p(v | h^\theta) = \sum_{t=1}^T \log \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$





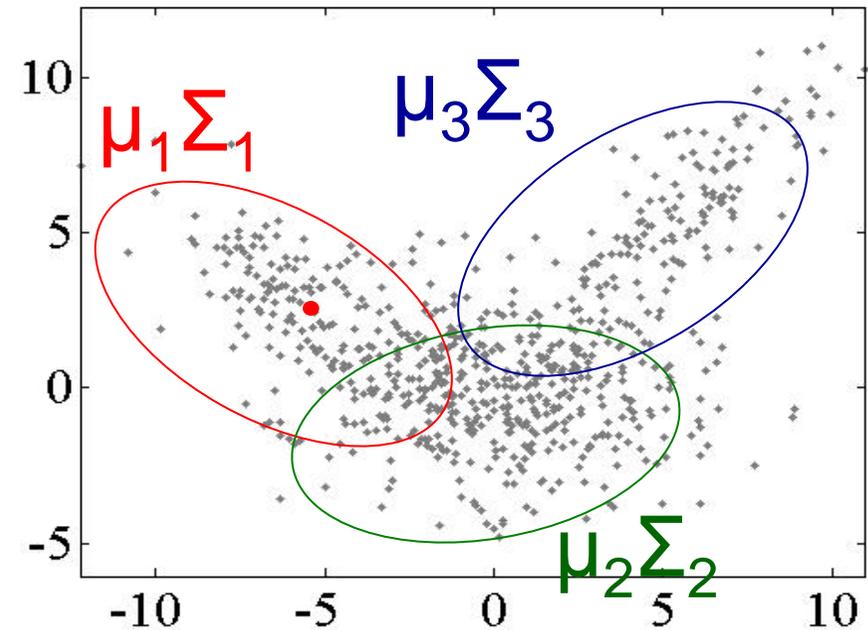
Introduction - MLE example - MoGs (2)

- $p(v^{(t)} | h^\theta) = \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$

- $p(v | h^\theta) = \prod_{t=1}^T p(v^{(t)} | h^\theta)$

- $\log p(v | h^\theta) = \sum_{t=1}^T \log p(v^{(t)} | h^\theta)$

- $\log p(v | h^\theta) = \sum_{t=1}^T \log \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$





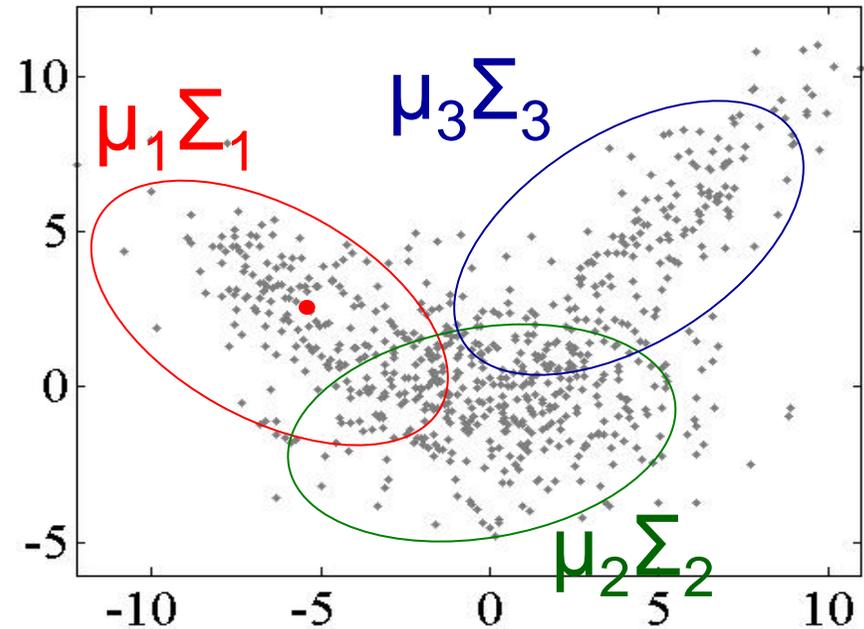
Introduction - MLE example - MoGs (3)

- $\log p(v | h^\theta) = \sum_{t=1}^T \log \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$

- **Goals**

1. find h^θ
2. maximize $\log p(v | h^\theta)$

$$\frac{\partial \log p(v | h^\theta)}{\partial h^\theta} = 0$$



PROBLEMATIC

the parameters are coupled, due to the sum of the log: no closed form solution



The algorithm - EM in one slide! - The EM trick

$$\log P(v | h^\theta) = \log P(v)$$

$$= \log \left(\int_h P(h, v) \right)$$

$$= \log \left(\int_h Q(h) \frac{P(h, v)}{Q(h)} \right)$$

$$\geq \int_h Q(h) \log \left(\frac{P(h, v)}{Q(h)} \right) = -F(Q(h), P(h, v))$$

Jensen Inequality

The trick



The algorithm - Novel objects in the MLE instance

$$\int_h Q(h) \log \left(\frac{P(h, v)}{Q(h)} \right) = -F(Q(h), P(h, v)) \leq \log(P(v))$$

- h = *hidden variable*
 - a hidden *quality* of the single data point
- $P(h, v)$ = *complete data (hidden + visible) likelihood*
 - it explains how the hidden variables and the visible ones are coupled together
- $Q(h)$ = *support distribution on the hidden variables*
 - a distribution over the hidden variables, simpler than $P(h, v)$



The algorithm -

Novel objects in the MLE instance (2)

$$\int_h Q(h) \log \left(\frac{P(h, v)}{Q(h)} \right) = -F(Q(h), P(h, v)) \leq \log(P(v))$$

● • $F(Q(h), P(h, v))$

- a divergence between Q, P a functional
- an inferior bound with respect to the objective function $L(h^\theta)$
- an object with $Q(h)$ unknown
- an object with h^θ unknown



The algorithm - Minimization of the divergence

- I minimize $F(Q,P)$ *alternatively (the sign – vanishes during minimization)*

1. with respect to $Q(h)$, with h^θ fixed

$$\frac{\partial}{\partial Q(h)} \int_h Q(h) \log \left(\frac{P(h, v)}{Q(h)} \right) = 0$$

$$Q(h) = P(h | v, h^\theta)$$

2. with respect to h^θ , with $Q(h)$ fixed

$$\frac{\partial}{\partial h^\theta} \int_h Q(h) \log \left(\frac{P(h, v)}{Q(h)} \right) = 0$$

$$\int_h Q(h) \frac{\partial}{\partial h^\theta} \log P(h, v | h^\theta) = 0$$



The algorithm -

The core of the EM in practice

- **INITIALIZATION**: set an initial h^θ
- **STEP E**: Minimize $F(Q,P)$ with respect to $Q(h^{(t)})$ calculating for each possible value of $h^{(t)}$

$$Q(h^{(t)}) \leftarrow P(h^{(t)} \mid v^{(t)}, h^\theta)$$

**EASY TO
COMPUTE !!!**

for each t

- **STEP M**: Minimize $F(Q,P)$ with respect to h^θ solving

$$\sum_{t=1}^T \left(\int_{h^{(t)}} Q(h^{(t)}) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log P(h^{(t)}, v^{(t)} \mid h^\theta) \right) = 0$$

**EASY TO
COMPUTE !!!**

for M parameters, this is a system of M equations.



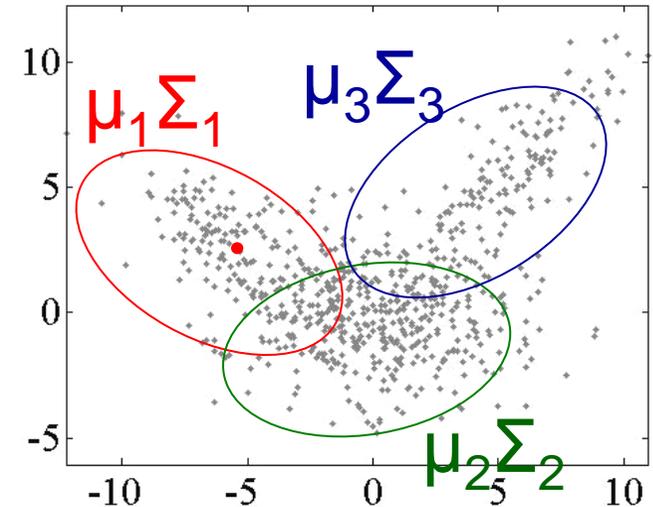
The algorithm - Perplexities and practical receipts

- Cool, but when should I use EM?
 - with probabilistic problems, in which mixtures of *whatever* are involved, where each data point is generated by one of the components of the mixture
 - MoG (mixtures of Gaussian)
 - HMM (mixtures of states)
 - Bayes Net (mixtures of parents of a node)
- Crucial question: what is $h^{(t)}$?
 - $h^{(t)}$ indicates what component of the mixture generates the data $v^{(t)}$



Applications - Back to the MoGs - the E-players

- $p(v^{(t)} | h^\theta) = \sum_{i=1}^M \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$
- $p(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) = N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})$
- $p(h^{(t)} | h^\theta) = \pi_{h^{(t)}}$



BAYES

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad P(h^{(t)} | v^{(t)}, h^\theta) &= \frac{P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) P(h^{(t)} | h^\theta)}{P(v^{(t)} | h^\theta)} = \frac{P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) P(h^{(t)} | h^\theta)}{\sum_{h^{(t)}} P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) P(h^{(t)} | h^\theta)} \\
 &\quad \swarrow \qquad \searrow \\
 &\quad Q(h^{(t)}) \qquad \leftarrow \qquad \qquad \qquad = \frac{\pi_{h^{(t)}} N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})}{\sum_{h^{(t)}} \pi_{h^{(t)}} N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})}
 \end{aligned}$$

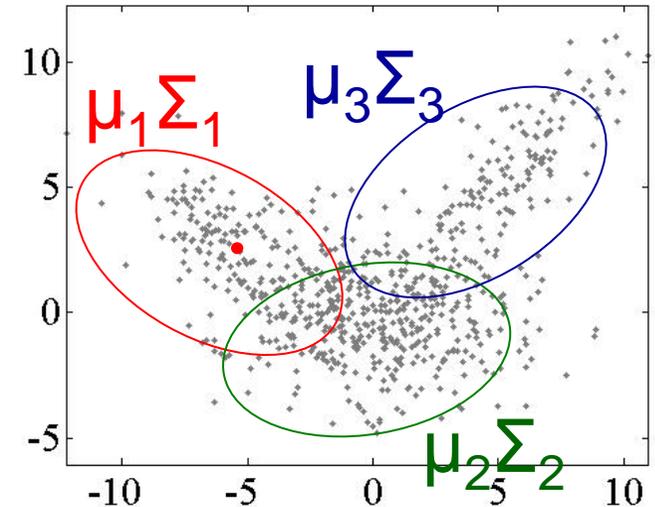
Compute for each i, for each t



Applications - Back to the MoGs - the M-players

$$\bullet \sum_{t=1}^T \left(\int_{h^{(t)}} Q(h^{(t)}) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log P(h^{(t)}, v^{(t)} | h^\theta) \right) = 0$$

$$= \sum_{t=1}^T \sum_{h^{(t)=1}^K} Q(h^{(t)}) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log P(h^{(t)}, v^{(t)} | h^\theta) = 0$$



$$= \sum_{t=1}^T \sum_{h^{(t)=1}^K} P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log \underbrace{P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) P(h^{(t)} | h^\theta)}$$

$$\sum_{t=1}^T \sum_{h^{(t)=1}^K} P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) \quad !!!$$

$$\sum_{t=1}^T \sum_{h^{(t)=1}^K} P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log P(h^{(t)} | h^\theta)$$



$$\sum_{t=1}^T \sum_{h^{(t)}=1}^K P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \frac{\partial}{\partial \hat{h}^\theta} \log P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta)$$

(ricorda! $\rightarrow P(v^{(t)} | h^{(t)}, h^\theta) = N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})$)

$$\begin{aligned} & \sum_{t=1}^T \sum_{h^{(t)}=1}^K P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \frac{\partial}{\partial \mu_k} \log N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}}) \\ &= \sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \Sigma^{-1} (v^{(t)} - \mu_k) = 0 \\ &= \sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \Sigma^{-1} v^{(t)} - P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) \Sigma^{-1} \mu_k = 0 \\ & \mu_k = \frac{\sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) v^{(t)}}{\sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta)} \end{aligned}$$



$$\mu_k = \frac{\sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) v^{(t)}}{\sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta)}$$

$$\Sigma_k = \frac{\sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta) (v^{(t)} - \mu_k)(v^{(t)} - \mu_k)^T}{\sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta)}$$

$$p(h^{(t)} | h^\theta) = \pi_{h^{(t)}}$$

$$\alpha_i = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T P(h^{(t)} | v^{(t)}, \hat{h}^\theta)$$



The algorithm -

The core of the EM in practice

- **INITIALIZATION**: set an initial $\{\mu_i^{(init)}, \Sigma_i^{(init)}, \pi_i^{(init)}\}$
- **STEP E**: Minimize $F(Q,P)$ with respect to $Q(h^{(t)})$ calculating for each possible value of $h^{(t)}$

$$Q(h^{(t)}) \leftarrow P(h^{(t)} | v^{(t)}, h^\theta)$$

**EASY TO
COMPUTE !!!**

for each t

- **STEP M**: Minimize $F(Q,P)$ with respect to h^θ , obtaining

$$\{\mu_i^{(new)}, \Sigma_i^{(new)}, \pi_i^{(new)}\}$$

- **ITERATION** Loop until convergence!



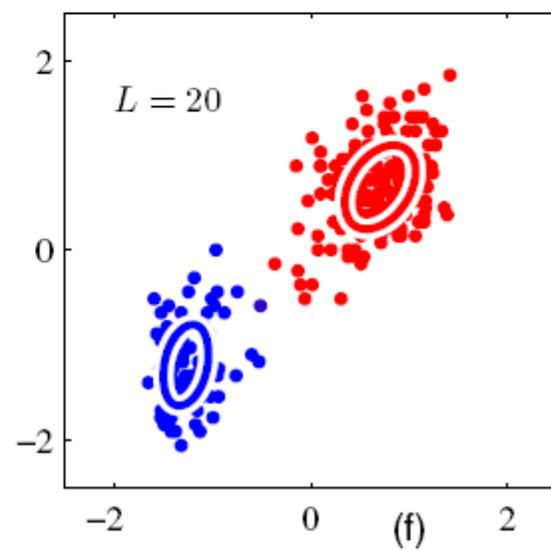
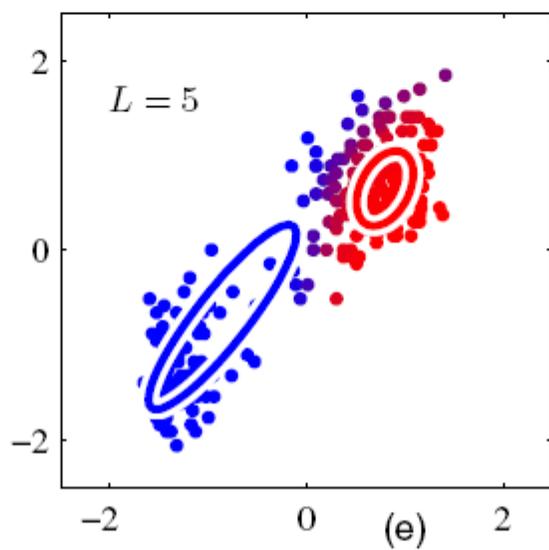
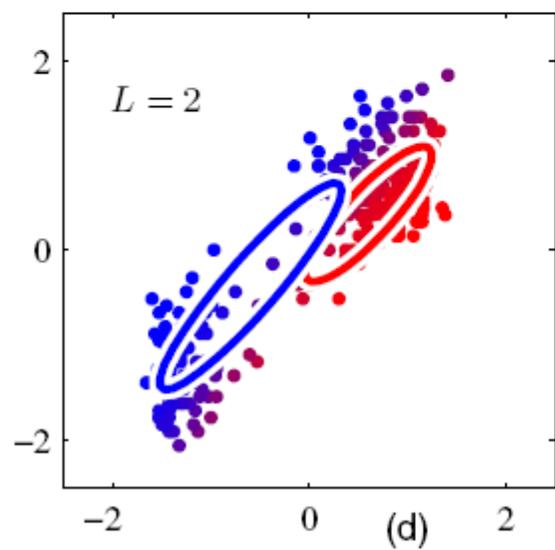
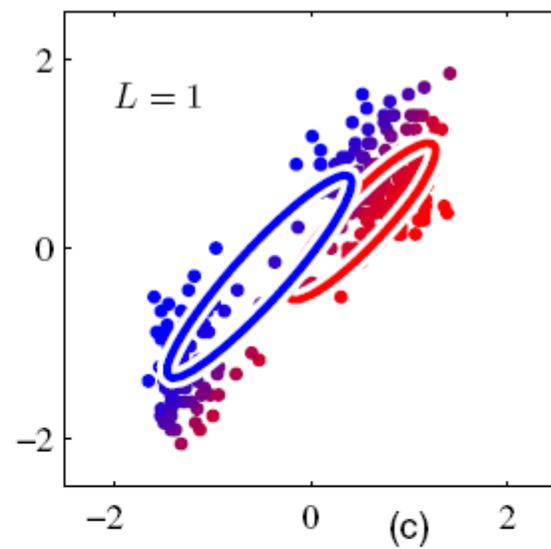
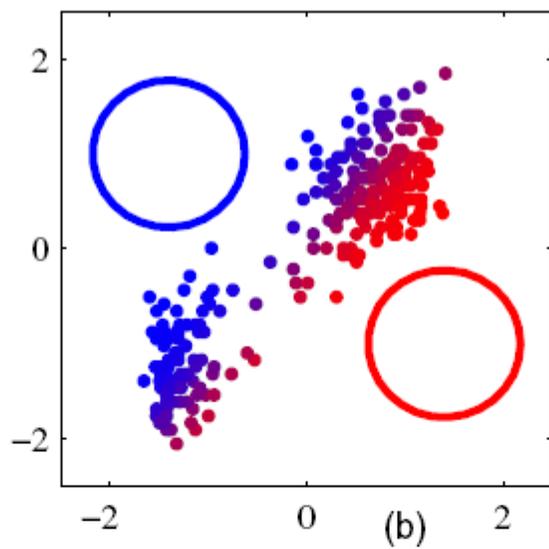
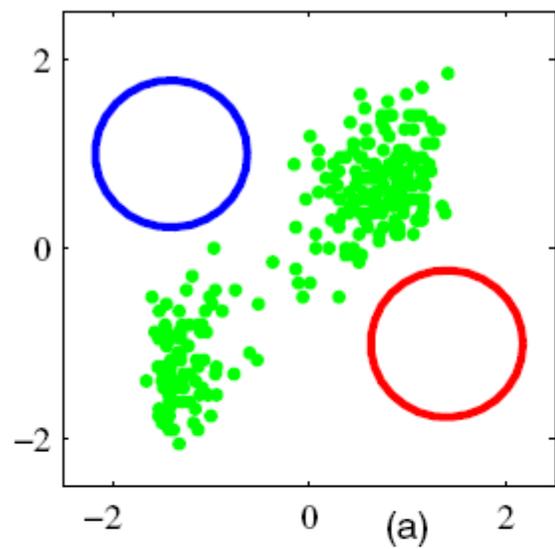
The m-players

- The idea: introduce hidden variables which knowledge simplifies the computation of the parameters
- The hidden variables are related with the visible variables
- The decision of the hidden quantities is not an automatic process, and relies on the scientist
- In general, the EM will apply when we have to deal with mixtures



Remarks

- The idea: introduce hidden variables which knowledge simplifies the computation of the parameters
- The hidden variables are related with the visible variables
- The decision of the hidden quantities is not an automatic process, and relies on the scientist
- In general, the EM will apply when we have to deal with mixtures





Material

- Brendan J. Frey and Nebojsa Jojic. 2005. A Comparison of Algorithms for Inference and Learning in Probabilistic Graphical Models. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 27, 9 (September 2005), 1392-1416.
DOI=10.1109/TPAMI.2005.169
<http://dx.doi.org/10.1109/TPAMI.2005.169>
- A Gentle Tutorial of the EM Algorithm and its Application to Parameter Estimation for Gaussian Mixture and Hidden Markov Models (1998) by Jeff Bilmes