Facoltà di Scienze MM. FF. NN.

Università di Verona

A.A. 2013-14

Teoria e Tecniche del Riconoscimento

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

Marco Cristani

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:

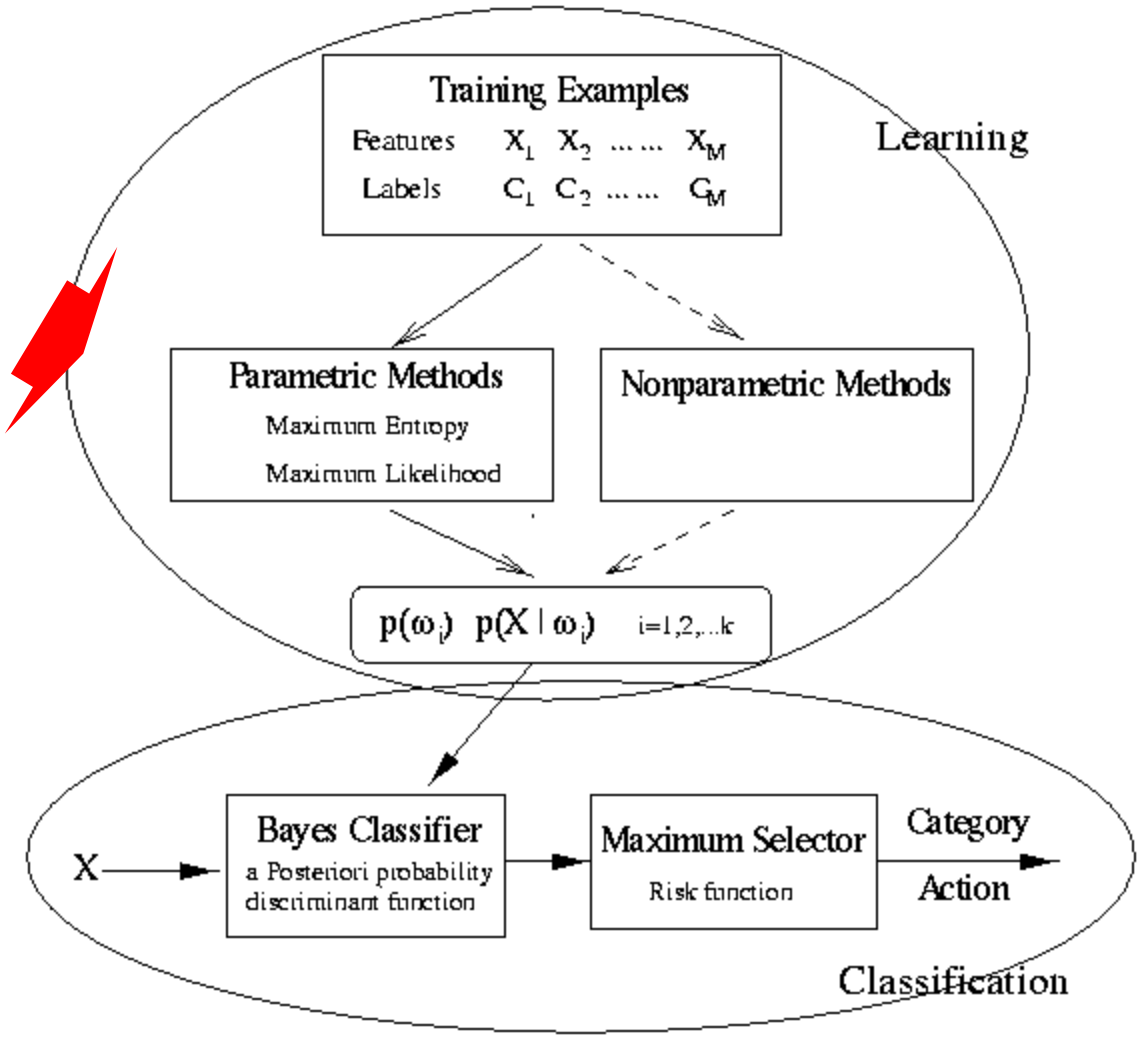
1. ***Stimare*** la ***funzione sconosciuta*** $p(\mathbf{x} \mid \omega_j)$
2. ***Stimare*** i ***parametri sconosciuti*** della ***funzione conosciuta*** $p(\mathbf{x} \mid \omega_j)$

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

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

Stima dei parametri – Due approcci

- Specificatamente, il problema può essere formulato come:
  - Dato un set di training $D=\{x_1, x_2, ..., x_n\}$
  - $p(x|\omega)$ è determinata da $\boldsymbol{\theta}$, che è un vettore rappresentante i parametri necessari

    (p.e., $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ se $p(\mathbf{x} \mid \omega) \approx N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$)
  - Vogliamo trovare il migliore $\boldsymbol{\theta}$ 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*

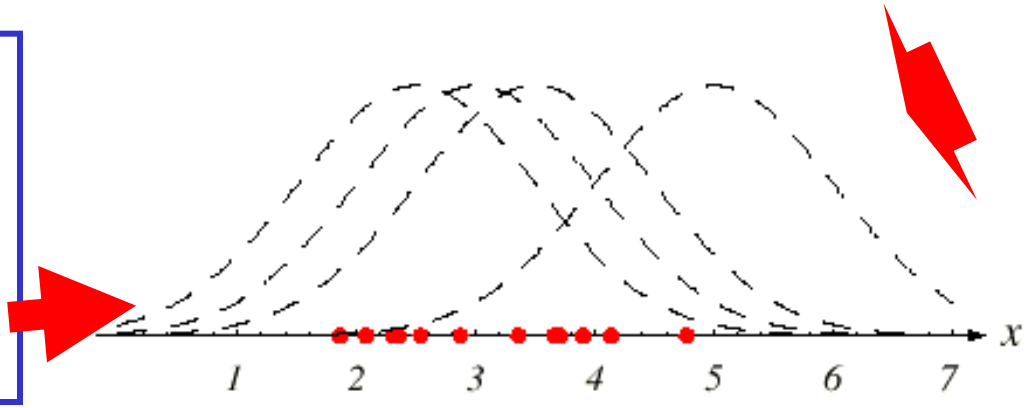
- In forza dell'ipotesi di partenza del problema, poiché i pattern del set **D** sono i.i.d., abbiamo che:

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

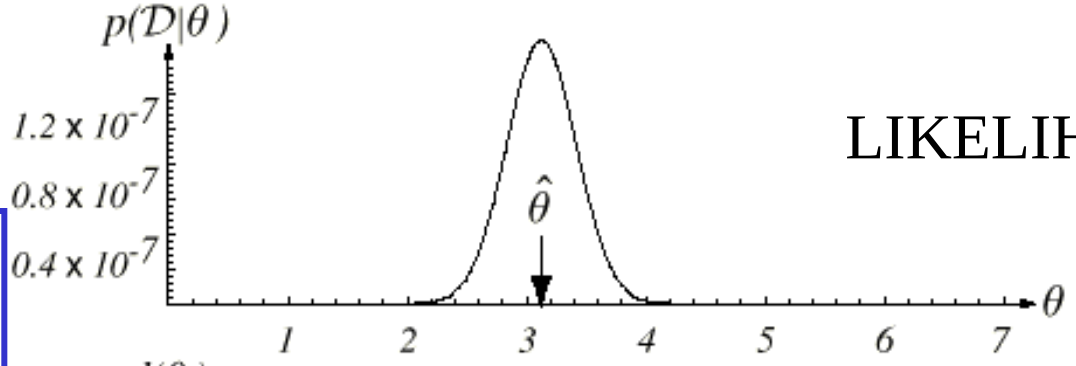
- Vista come funzione di $\boldsymbol{\theta}$, $p(\mathbf{D}|\boldsymbol{\theta})$ viene chiamata ***likelihood*** *di* $\boldsymbol{\theta}$ *rispetto al set di campioni* ***D.***
- La stima di Maximum Likelihood di $\boldsymbol{\theta}$ è, per definizione, il valore $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ che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

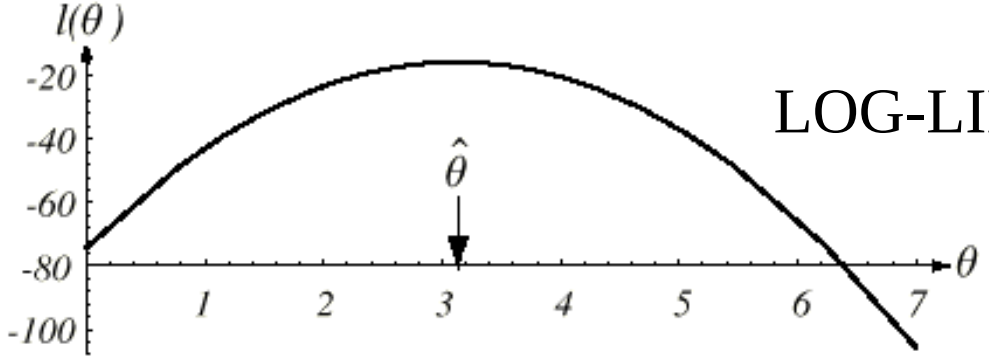


4 delle infinite possibili gaussiane



LIKELIHOOD

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



LOG-LIKELIHOOD

Approccio Maximum Likelihood (3)

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

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

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 D è implicita.

- Pertanto per ricavare il max:

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

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

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

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:

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

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

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (2)

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

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

- 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

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

la cui derivata è

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

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (4)

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

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

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

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

Maximum Likelihood: caso Gaussiano (5)

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

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

- 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***

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

  - ***Distribuzione uniforme***

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

  - ***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* $p(\theta|D)$

$$p(\theta) \Rightarrow p(\theta|D)$$

- 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 $P(\omega_i|\boldsymbol{x})$ 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*** $p(\boldsymbol{x}|\omega_i)$
- 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 $P(\omega_i|\boldsymbol{x},\boldsymbol{D})$
- 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:

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

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

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

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

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:

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

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

Distribuzione dei parametri

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

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

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

Distribuzione dei parametri

- Quindi

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

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

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

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

Distribuzione dei parametri

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

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

- 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

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

- 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 $p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}) \equiv p(x \mid \mu) \approx N(\mu, \sigma^2)$
  in cui l'unica quantità sconosciuta è la media μ .

- Devo quindi definire $p(\boldsymbol{\theta} \mid D) = p(\mu \mid D)$

Esempio: caso Gaussiano

- Con la regola di Bayes posso scrivere:

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

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=$\{x_1, x_2,..., x_n\}$ e riscriviamo la densità riprodotta come

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

$$= \alpha \prod_{k=1}^{n} p(x_k \mid \mu) p(\mu)$$

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

$$p(\mu|\mathcal{D}) = \alpha \prod_{k=1}^{n} \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_k-\mu}{\sigma}\right)^2\right]}^{p(x_k|\mu)} \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-\mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right]}^{p(\mu)}$$

$$= \alpha' \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\mu-x_k}{\sigma}\right)^2 + \left(\frac{\mu-\mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right)\right]$$

$$= \alpha'' \exp\left[-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{n}{\sigma^2}+\frac{1}{\sigma_0^2}\right)\mu^2 - 2\left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{k=1}^{n} x_k + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)\mu\right]\right], \qquad (29)$$

Esempio: caso Gaussiano

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

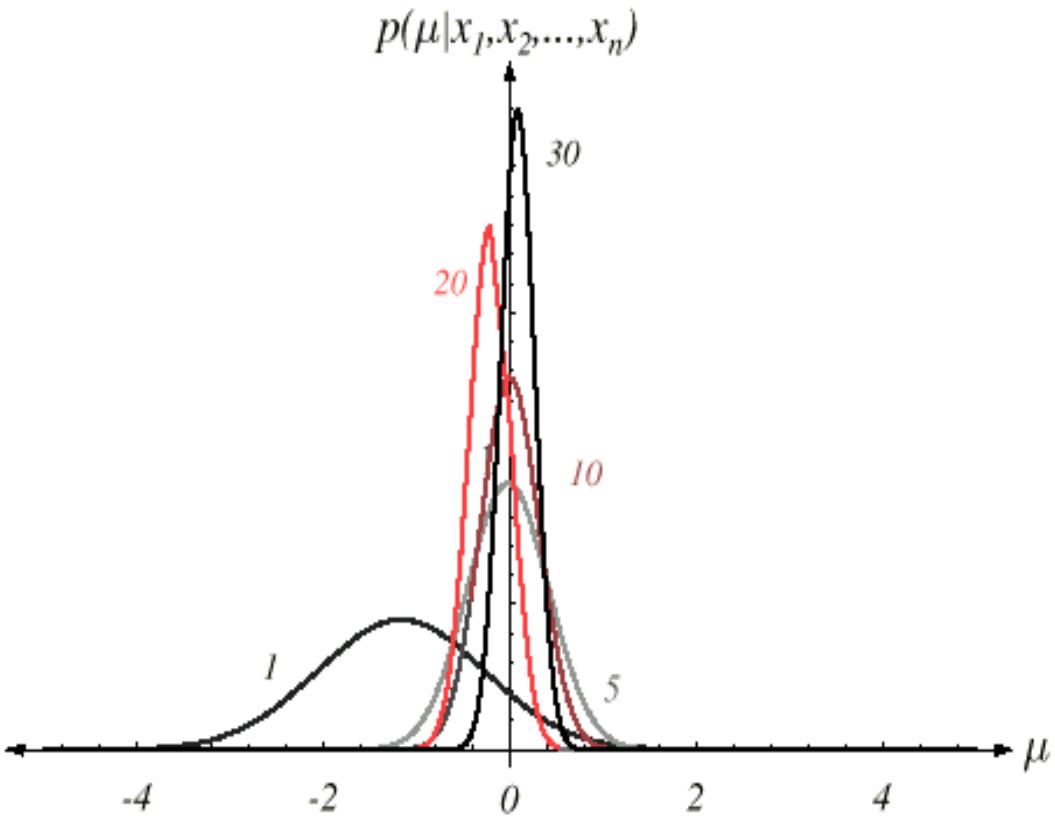
dove $\mu_n = \frac{n\sigma_0^{\,2}}{n\sigma_0^{\,2} + \sigma^2} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} x_k \right) + \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^{\,2} + \sigma^2} \mu_0$

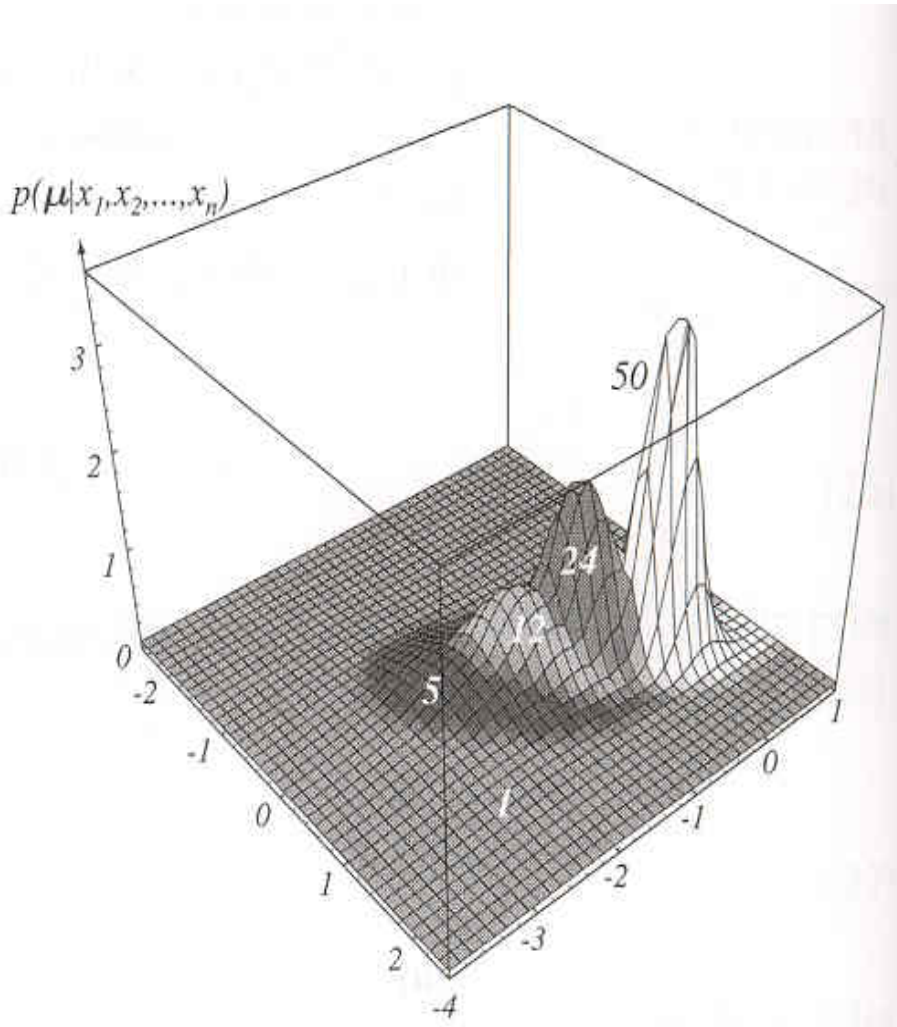
$$\sigma_n^2 = \frac{\sigma_0^{\,2}\sigma^2}{n\sigma_0^{\,2} + \sigma^2}$$

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

$\sigma_n^{\,2}$ misura l'incertezza della nostra scelta.

Esempio: caso Gaussiano





Esempio: caso Gaussiano

TERZO PASSO: stima della densità condizionale p(x|D)

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

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

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

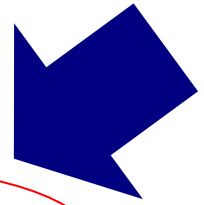
Esempio: caso Gaussiano

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(x|D)* (=$P(\mathbf{x} \mid \omega_i, D)$) ottenuta è la densità condizionale desiderata



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

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:

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

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

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

⇨ 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)

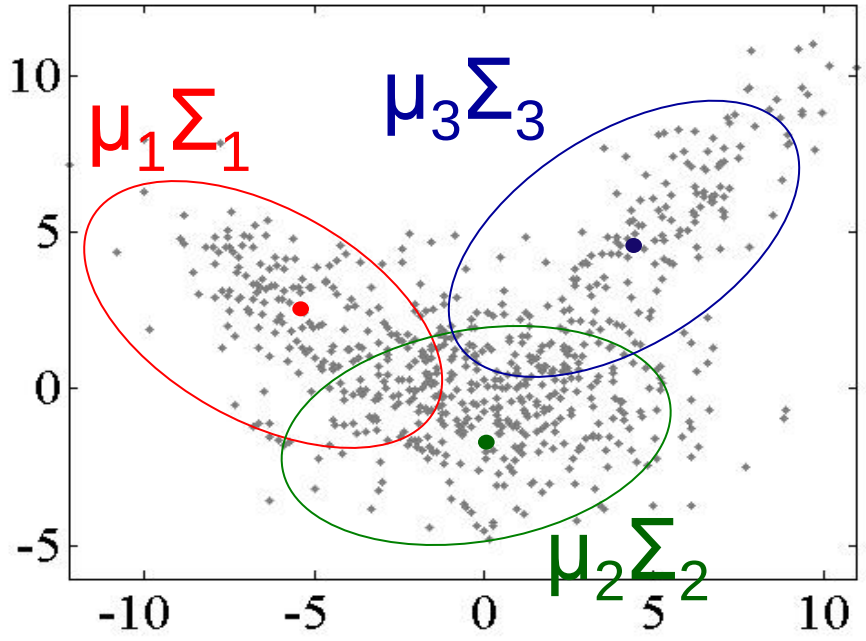
Conclusioni: Bayes vs ML

- In Bayes occorre stimare i prior $\hat{\boldsymbol{\theta}}$
- 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



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

Introduction -
Maximum Likelihood Estimation (MLE) problem

- INPUT:
  - A dataset of observations $v=\{v^{(t)}\}_{t=1...T}$
  - 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

$$\frac{\partial \log\, p(v \mid h^{\theta})}{\partial h_i^{\theta}} = 0 \qquad \mathrm{i} = 1...\mathrm{I}$$

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

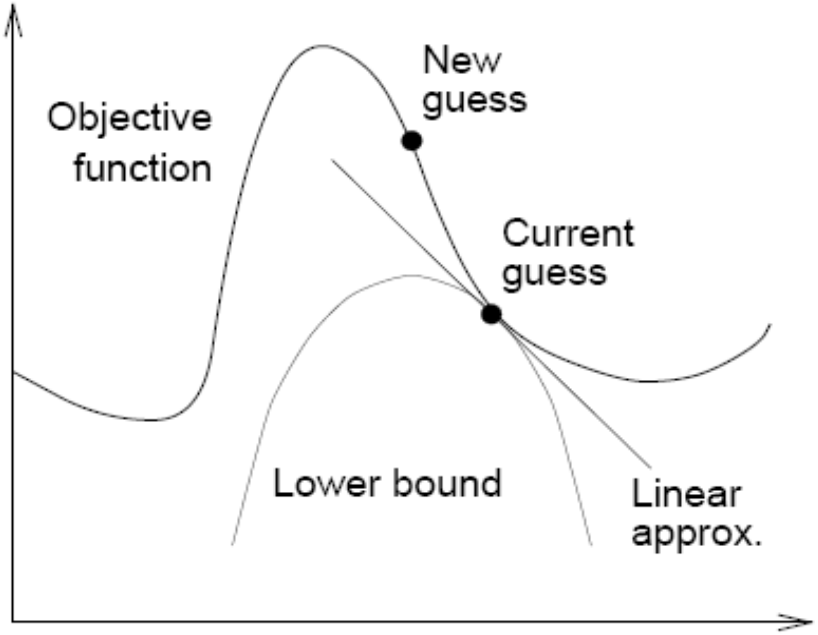
Introduction - EM

- 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

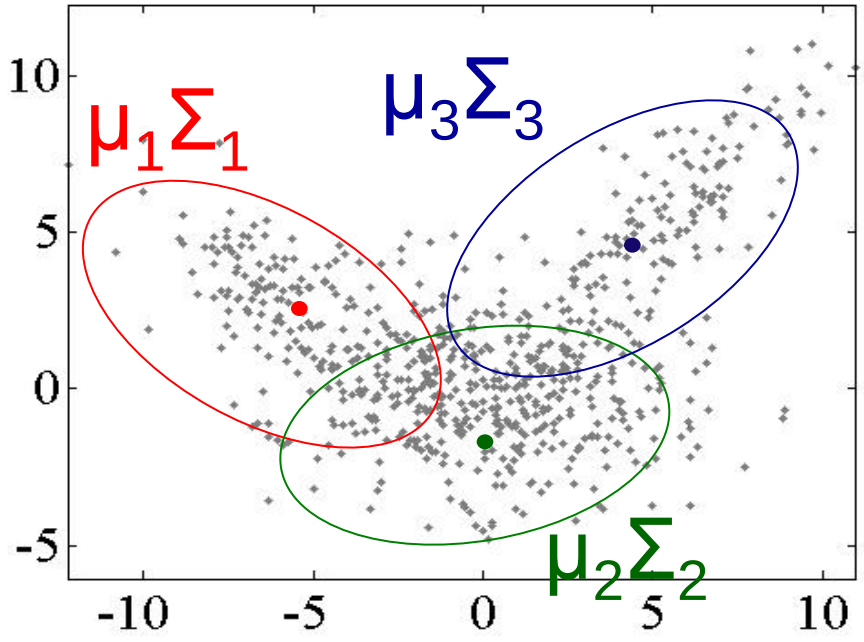
Introduction -
EM placement in the maximization methods literature

- *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



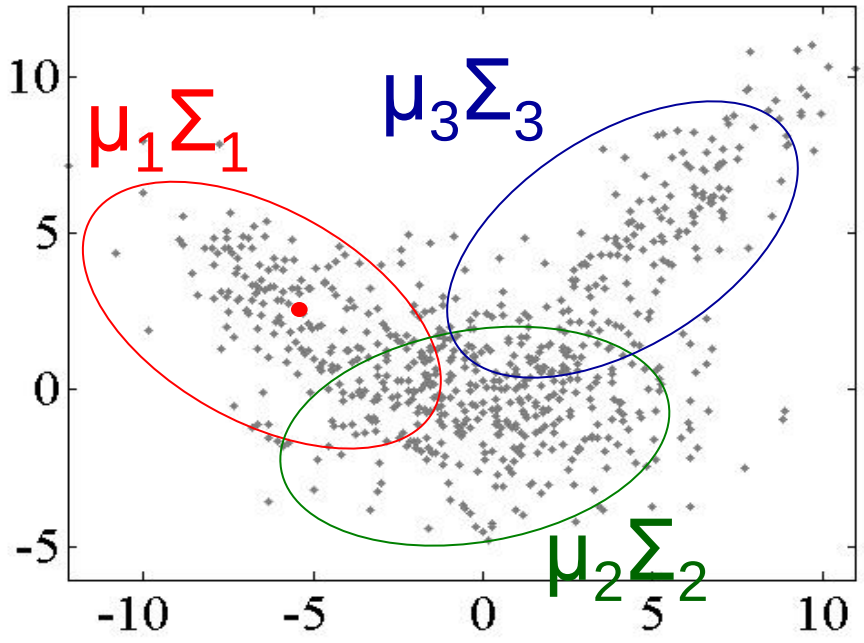
Introduction -
MLE example - Mixture of Gaussians (MoG)

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



Introduction - MLE example - MoGs (2)

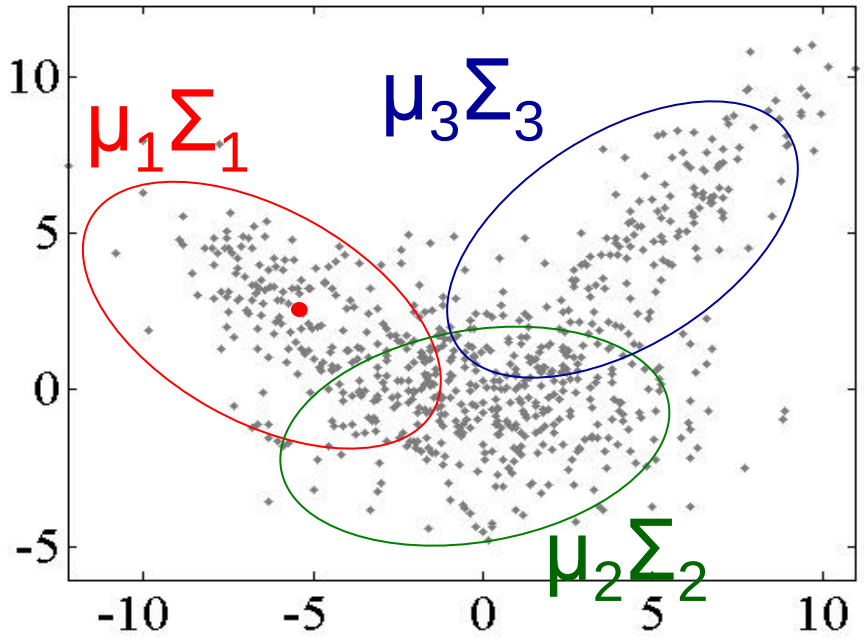
- $p(v^{(t)} \mid h^{\theta}) = \sum_{i=1}^{M} \pi_i N(\mu_i, \Sigma_i)$
- $p(v \mid h^{\theta}) = \prod_{t=1}^{T} p(v^{(t)} \mid h^{\theta})$
- $\log p(v \mid h^{\theta}) = \sum_{t=1}^{T} \log p(v^{(t)} \mid h^{\theta})$
- $\log p(v \mid h^{\theta}) = \sum_{t=1}^{T} \log \sum_{i=1}^{M} \pi_i N(\mu_i,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



Introduction - MLE example - MoGs (3)

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

- Goals
  1. find h^{θ}
  2. maximize $\log p(v \mid h^{\theta})$



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

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

$$\log P(v \mid h^{\theta}) = \log P(v)$$

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

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

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

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*

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

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

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

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

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

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

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

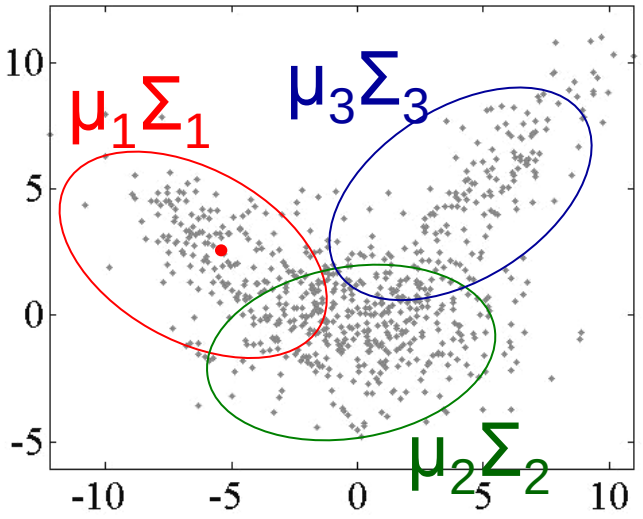
- Cool, but when should I use EM?
  - with probabilistic problems, in which mixtures of *whatever* are involved, where each data point is generated by one of the components of the mixture
    - MoG (mixtures of Gaussian)
    - HMM (mixtures of states)
    - Bayes Net (mixtures of parents of a node)
- 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

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

- $p(v^{(t)} \mid h^{(t)}, h^{\theta}) = N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})$

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



BAYES

- $P(h^{(t)} \mid v^{(t)}, h^{\theta}) = \frac{P(v^{(t)} \mid h^{(t)}, h^{\theta}) P(h^{(t)} \mid h^{\theta})}{P(v^{(t)} \mid h^{\theta})} = \frac{P(v^{(t)} \mid h^{(t)}, h^{\theta}) P(h^{(t)} \mid h^{\theta})}{\sum_{h^{(t)}} P(v^{(t)} \mid h^{(t)}, h^{\theta}) P(h^{(t)} \mid h^{\theta})}$

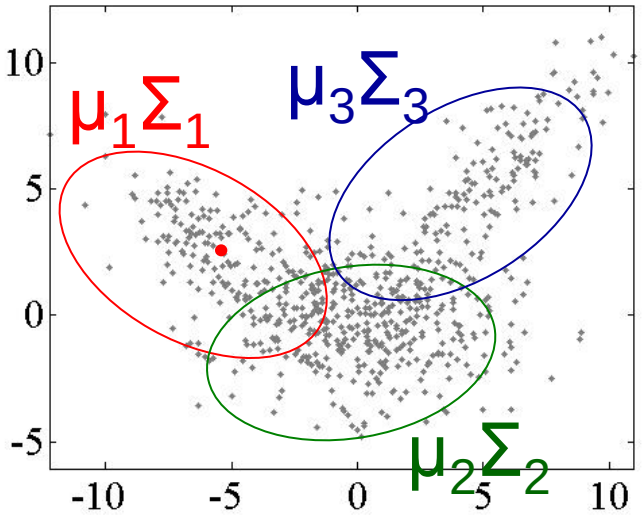
$Q(h^{(t)})$ ←

$= \frac{\pi_{h^{(t)}} N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})}{\sum_{h^{(t)}} \pi_{h^{(t)}} N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})}$

Compute for each i, for each t

Applications -
Back to the MoGs - the M-players

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



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

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

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

!!!

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

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

$$\left(\text{ricorda!} \quad \text{--} > P(v^{(t)} \mid h^{(t)}, h^{\theta}) = N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}}) \right)$$

$$\sum_{t=1}^{T}\sum_{h^{(t)}=1}^{K} P(h^{(t)} \mid v^{(t)}, \hat{h}^{\theta}) \frac{\partial}{\partial \mu_k} \log N(\mu_{h^{(t)}}, \Sigma_{h^{(t)}})$$

$$= \sum_{t=1}^{T} P(h^{(t)} \mid v^{(t)}, \hat{h}^{\theta}) \Sigma^{-1} (v^{(t)} - \mu_k) = 0$$

$$= \sum_{t=1}^{T} P(h^{(t)} \mid v^{(t)}, \hat{h}^{\theta}) \Sigma^{-1} v^{(t)} - P(h^{(t)} \mid v^{(t)}, \hat{h}^{\theta}) \Sigma^{-1} \mu_k = 0$$

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

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

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

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

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

The algorithm -
The core of the EM in practice

- INITIALIZATION: set an initial $\left\{\mu_i^{(init)}, \Sigma_i^{(init)}, \pi_i^{(init)}\right\}$
- 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} , obtaining

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

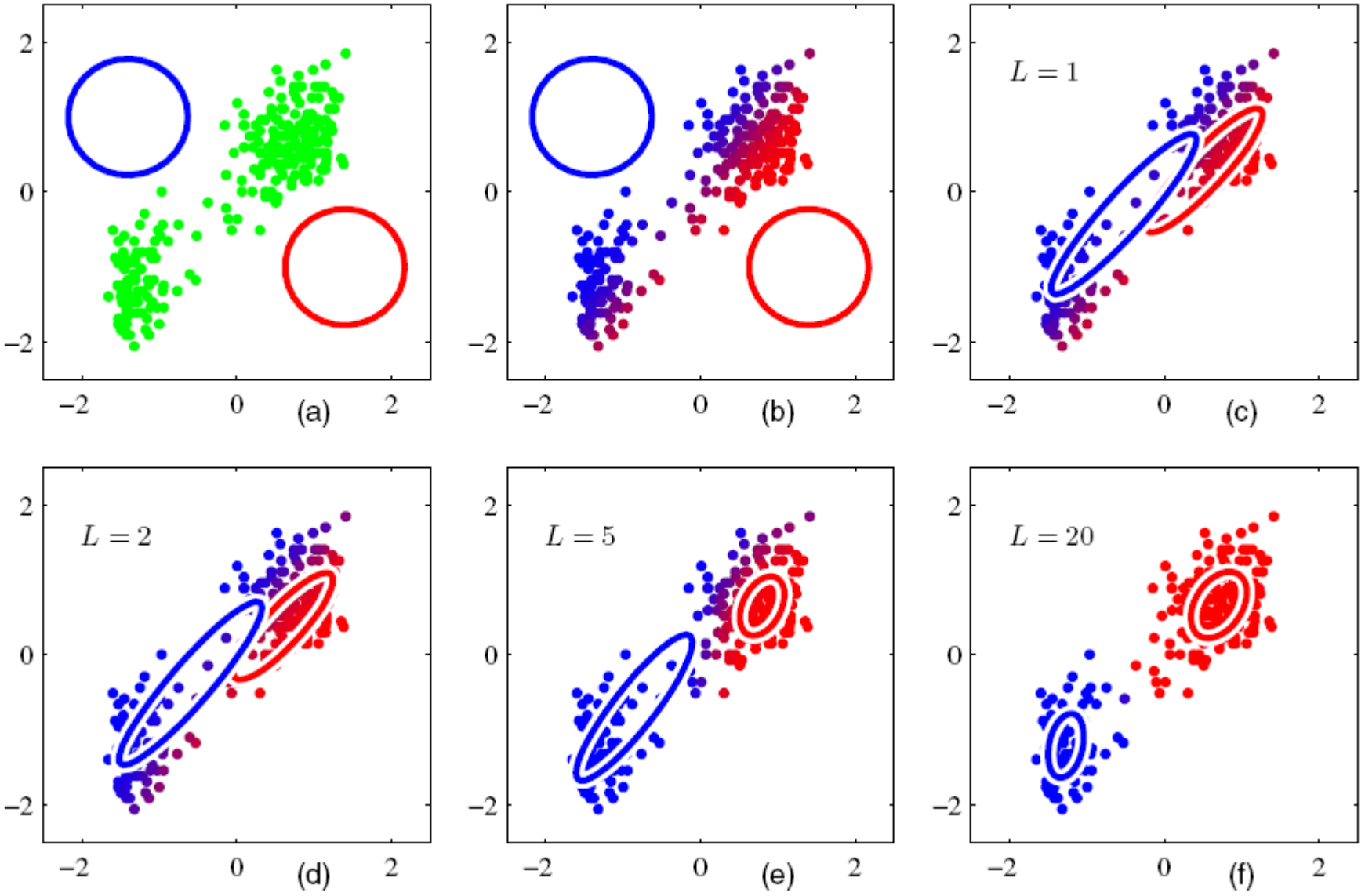
- ITERATION Loop until convergence!

The m-players

- The idea: introduce hidden variables which knowledge semplifies 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 genera, the EM well apply when we have to deal with mixtures

Remarks

- The idea: introduce hidden variables which knowledge semplifies 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 genera, the EM well apply when we have to deal with mixtures


2
0
−2
−2
0
2
(a)
(b)
$L = 1$
(c)
$L = 2$
(d)
$L = 5$
(e)
$L = 20$
(f)

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