Introduction aux modèles graphiques **2007/2008**

Cours 5 — 05 novembre 2008

Enseignant: Francis Bach *Scribe: Armand Joulin,Augustin Lefévre*

5.1 Modèles de Markov Cachés

Cadre On se donne le modèle suivant : On suppose avoir des états $(q_i)_{i=0..T}$ et une observation bruitée $(Y_i)_{i=O...T}$ des états, représentée par le modèle suivant :

Ceci montre qu'on suppose les bruits indépendants sachant les observations.

Applications Les applications de ce modèle (HMM) sont très vastes : Suivi de cibles, Traitement de la parole (q :mots prononcés), Bioinformatique (q :ADN), Musique (q :notes)...

On peut étendre naturellement les HMM à des grilles pour le traitement d'images, mais leur etude devient alors plus compliquée car la tâche d'infŕence a une complexité exponentielle.

Tâches On suppose que q_0 suit une loi multinomiale de paramètre π et que les q ne prennent que k valeurs. $q_{t+1}|q_t$ a pour loi la matrice $k \times k$ de transition $p(q_{t+1}|q_t)$.

Les tâches à accomplir sont :

- L'Inférence :
  - Le filtrage : $p(q_{t+1}|y_1, ..., y_t)$
  - Le lissage : $p(q_t|y_1, ..., y_T)$
  - Maximiser : $\max_q p(q|y)$
- L'apprentissage.

5.1.1 Application de l'algorithme somme-produit

Comme on a un arbre, on utilise l'algorithme somme-produit. Dans le cadre simple des HMM d'autres méthodes pourraient être envisagées, mais c'est en fait un bon prétexte pour apprendre à l'utiliser. D'ailleurs, pour des arbres compliqués, l'algorithme somme-produit marchera encore ce qui n'est pas nécessairement le cas des méthodes ad-hoc.

On identifie d'abord pour potentiels $p(q_0)$, $p(q_{t+1}|q_t)$ et $p(y_t|q_t)$, $t = 0, \ldots, T-1$.

Les messages sont envoyés selon le protocole : $y_i \to q_i, q_i \to q_{i+1}$ de $i = 0$ à $i = T-1$ et enfin $y_T \to q_T$. Ils valent :

- $m_{y_0,q_0}(q_0) = p(y_0|q_0)$
- $m_{q_0,q_1}(q_1) = \sum_{q_0} p(q_1|q_0) m_{y_0,q_O}(q_0)$

- ...
- $m_{y_t,q_t}(q_t) = p(y_t|q_t)$
- $m_{q_t,q_{t+1}}(q_{t+1}) = \sum_{q_t} p(q_{t+1}|q_t) m_{q_{t-1},q_t}(q_t) m_{y_t,q_t}(q_t)$

Proposition 5.1. *Les messages arrivant en $t+1$ vérifient* $m_{q_t,q_{t+1}}(q_{t+1}) m_{y_{t+1},q_{t+1}}(q_{t+1}) = p(y_0, ..y_{t+1}, q_{t+1})$

Pour obtenir ces formules, il suffit d'appliquer l'algorithme somme-produit au graphe obtenu en supprimant le futur.

Soit $\alpha_t(q_t) = m_{q_{t-1},q_t}(q_t) m_{y_t,q_t}(q_t)$, alors α_t est une probabilité égale à $p(y_0, ..y_{t+1}, q_{t+1})$ et on a la formule de récursion α suivante :

$$\boxed{\alpha_{t+1}(q_{t+1}) = p(y_{t+1}|q_{t+1}) \sum_{q_t} p(q_{t+1}|q_t) \alpha_t(q_t)}$$

avec pour initialisation $\alpha_0(q_0) = p(y_0|q_0)p(q_0)$.

On en déduit le théorème suivant :

Théorème 5.2.

$$p(y_1, ..., y_T) = \sum_{q_T} \alpha_t(q_t)$$

Le calcul de $p(y)$ se fait donc en $O(Tk^2)$ opérations (car chaque récursion est un produit matrice/vecteur). On effectue à présent la rétropropagation des messages. Soit $\beta_t(q_t) = m_{q_{t+1},q_t}(q_t)$, alors on a la formule de récursion suivante :

$$\boxed{\beta_t(q_t) = \sum_{q_{t+1}} p(q_{t+1}|q_t) \beta_{t+1}(q_{t+1}) p(y_{t+1}|q_{t+1})}$$

avec pour initialisation $\beta_T(q_T) = 1$.

Théorème 5.3. $p(q_t, y_0, ...y_T) = \alpha_t(q_t)\beta_t(q_t)$,

$p(q_t, q_{t+1}, y_0, ..., y_T) = p(q_{t+1}|q_t)\alpha_t(q_t)\beta_{t+1}(q_{t+1})p(y_{t+1}|q_{t+1})$.

Finalement, le calcul de $\max_q p(q|y)$ se fait en remplaçant les sommes par des max. La tâche d'inférence est donc effectuée.

Pratique En pratique, l'application directe de la formule de récursion pour le calcul de α_t ne marche pas pour un grand nombre d'états, car on atteint alors la précision machine de 10^{-16} pour les éléments de la somme. Il existe plusieurs solutions pour calculer efficacement les valeurs. Parmi celles-ci, citons le codage en *log* :

$$\log(\alpha_{t+1}) = \log p(y_{t+1}|q_{t+1}) + \log(\sum_{q_t} p(q_{t+1}|q_t) e^{\log(\alpha_t)})$$

On utilise alors la formule $\log(\sum e^{Y_i}) = \log(\sum e^{Y_i - \max Y_i}) + \max Y_i$ qui permet d'éviter les problèmes d'arrondi.

Estimation des paramètres

Supposons donnés :
- $p(q_0) = \pi_{q_0}$,
- $p(q_{t+1}|q_t) = A_{q_{t+1},q_t}$,
- $p(y_t|q_t) = f(y_t, q_t, B)$.

Alors on écrit la vraisemblance compl'ete :

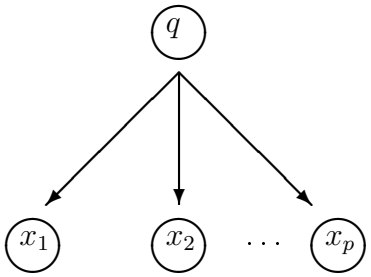
$$\begin{aligned} l_c &= \log(p(q_0)\Pi_{t=0}^{T-1} p(q_{t+1}|q_t)\Pi_{t=0}^{T} p(y_t|q_t) \\ &= \log(\Pi_{i=1}^{k} \pi_i^{\delta(q_0=i)} \Pi_{t=0}^{T-1}\Pi_{i,j=1}^{k} A_{i,j}^{\delta(q_{t+1}=i,q_t=j)} \Pi_{t=0}^{T}\Pi_{i=1}^{k} f(y_t,i,B)^{\delta(q_t=i)}) \\ &= \sum_{i=1}^{k} \delta(q_0=i) log(\pi_i) + \sum_{t=0}^{T-1}\sum_{i,j=1}^{k} \delta(q_{t+1}=i, q_t=j)\log(A_{i,j}) + \sum_{t=0}^{T}\sum_{i=1}^{k} \delta(q_t=i)\log(f(q_t,i,B)) \end{aligned}$$

Pour l'étape E de l'algorithme EM, on calcule donc :
- $\mathbf{E}(\delta(q_0 = i)|y) = p(q_0 = i|y)$
- $\mathbf{E}(\delta(q_t = i)|y) = p(q_t = i|y)$
- $\mathbf{E}(\delta(q_{t+1} = i, q_t = j|y) = p(q_{t+1} = i, q_t = j|y)$

Il suffit alors de remplacer les variables cachées $\delta(q_0 = i)$,$\delta(q_t = i)$ et $\delta(q_{t+1} = i, q_t = j)$ par les quantités ci-dessus : puis on maximise la nouvelle log vraisemblance de la manière habituelle pour obtenir les estimateurs des paramètres.

5.2 Naive Bayes

Cadre On considère un document texte q formé de mots pris dans un ensemble de mots de taille p (l'ordre de grandeur de p est 10^4). On définit une variable $x_i \in \{0, 1\}$ valant 1 si le i^{me} mot est dans le document et 0 sinon. On va chercher à classifier le document q parmi une ensemble de K classes de document.



Pratique On va evaluer $p(x_i = 1|q = k) = \eta_{ik}$ et ainsi par Bayes on pourra estimer $p(q = k|x_i$ pour $i \in \{1, p\})$ et ainsi classifier le document q.

5.3 Vecteurs Gaussiens

Cadre On ne considère plus des variables discretes mais gaussiennes. Posons $x = (x_1, ..., x_n) \in \mathbb{R}^n$ un vecteur gaussien de moyenne μ et de matrice de variance-covariance Σ.

Remarques préliminaires

- Supposer $\mu = 0$ ne change rien au problème
- $\Sigma_{i,j} = \mathbb{E}[x_i x_j]$
- $\Sigma_{i,j} = 0 \iff X_i \perp X_j$

Condition de factorisation dans un graphe

Proposition 5.4. *Soit $G = (V, E)$ un modèle graphique non orienté.*

$$p(x) \in \mathcal{L}(G) \text{ si et seulement si } \forall (i,j) \notin E \quad (\Sigma^{-1})_{i,j} = 0$$

Proof: En développant le produit matriciel, on constate que :

$$p(x) \propto \prod_{i,j} exp(-\frac{1}{2}(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)(\Sigma^{-1})_{i,j})$$

or :

$$\prod_{i,j} exp(-\frac{1}{2}(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)(\Sigma^{-1})_{i,j}) = \prod_{(i,j)\in E} exp(-\frac{1}{2}(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)(\Sigma^{-1})_{i,j})$$

D'où la conclusion. □

Remarque 1. *En général $\Sigma_{i,j} \neq 0$ car (i, j) seront dépendant à travers le graphe.*

5.3.1 Inversion de matrices

Proposition 5.5. *Si $M = \begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix}$, alors on a la formule suivante pour l'inverse :*

$$\begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ -H^{-1}G & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (E - FH^{-1}G)^{-1} & 0 \\ 0 & H^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -FH^{-1} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

de laquelle on obtient

$$\begin{aligned} (H - GE^{-1}F)^{-1} &= H^{-1} + H^{-1}G(E - FH^{-1}G)^{-1}FH^{-1} \\ (H - GE^{-1}F)^{-1}GE^{-1} &= H^{-1}G(E - FH^{-1}G)^{-1} \end{aligned}$$

Définition 5.6. *Soit : $M = \begin{pmatrix} E & F \\ G & H \end{pmatrix}$, alors on appelle* complement de Schur du bloc H, *la matrice :$E - FH^{-1}G$*

Ces formules d'inversion sont très pratiques (et permettent notamment de calculer le déterminant $|M| = |H| \times |H - GE^{-1}F|$. En particulier, si H est grande et facile à inverser, et E petite, alors $(H - GE^{-1}F)^{-1}$ se calcule facilement par la première formule. Par exemple, si $H = I$,$E = I$ et $U = G = F^T$, on a alors :

$$\begin{aligned} (I + UU^T)^{-1} &= I - U(I + U^TU)^{-1}U^T \\ (I + UU^T)^{-1} &= U(U^TU + I)^{-1} \end{aligned}$$

En utilisant cette formule, on écrit donc :

$$\begin{aligned} p(x_1,x_2) &= \frac{(2\pi)^{-\frac{n_1}{2}}(2\pi)^{-\frac{n_2}{2}}}{|\Sigma_{22}|^{\frac{1}{2}}|\Sigma/\Sigma_{22}|^{\frac{1}{2}}} \\ &\exp[-\frac{1}{2}\begin{pmatrix} x_1-\mu_1 \\ x_2-\mu_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} I & 0 \\ -\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{11} & I \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} (\Sigma/\Sigma_{22})^{-1} & 0 \\ 0 & \Sigma_{22}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1} \\ O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1-\mu_1 \\ x_2-\mu_2 \end{pmatrix}] \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned} p(x_1,x_2) &= \frac{(2\pi)^{-\frac{n_1}{2}}}{|\Sigma_{22}|^{\frac{1}{2}}|}\frac{(2\pi)^{-\frac{n_2}{2}}}{\Sigma/\Sigma_{22}|^{\frac{1}{2}}} \\ &exp(-\frac{1}{2}(x_1-\mu_1-\Sigma_{12}\sigma_{22}^{-1}(x_2-\mu_2))^T(\Sigma/\Sigma_{22})^{-1}(x_1-\mu_1-\Sigma_{12}\sigma_{22}^{-1}(x_2-\mu_2)) \\ &-\frac{1}{2}(x_2-\mu_2)^T\Sigma_{22}^{-1}(x_2-\mu_2)) \end{aligned}$$

On reconnait alors un produit de deux gaussiennes.

Ainsi, $p(x_1,x_2) = \mathcal{N}(x_2|\mu_2,\Sigma_{22})\mathcal{N}(x_1|\mu_{1|2},\Sigma_{1|2})$, avec

- $\mu_{1|2} = \mu_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(x_2-\mu_2)$
- $\Sigma_{1|2} = \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{12}$