

Εθνικό Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Μαθηματικών

Κρυμμένα Μαρκοβιανά Μοντέλα και
Γραμμικά Δυναμικά Συστήματα μέσω
Θεωρίας Γράφων

Χρήστος Χριστάκης, υποψήφιος μεταπτυχιακός φοιτητής
Δημήτριος Χελιώτης, επιβλέπων καθηγητής

Περίληψη

Προκειμένου να χαλαρώσουμε τη μαρκοβιανή υπόθεση για ένα σύνολο παρατηρήσεων $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, μπορούμε να θεωρήσουμε ένα κρυμμένο μαρκοβιανό μοντέλο, στο οποίο κάθε παρατήρηση θεωρούμε ότι είναι αποτέλεσμα μιας στοχαστικής διαδικασίας σε μία από πολλές μη παρατηρήσιμες καταστάσεις. Στην εργασία αυτή θα εξετάσουμε τους αλγορίθμους Baum-Welch και Viterbi των κρυμμένων μαρκοβιανών μοντέλων όχι απλώς αλγεβρικά, αλλά θα διαπιστώσουμε ότι μπορούν να θεωρηθούν ειδικές περιπτώσεις των αλγορίθμων αθροίσματος-γινομένου και μεγίστου-αθροίσματος των γραφικών μοντέλων. Για το λόγο αυτό, θα κάνουμε μια εκτενή αναφορά στη θεωρία γράφων, συμπεριλαμβανομένων των δύο παραπάνω αλγορίθμων, καθώς και της χρήσιμης ιδιότητας δ-διαχωρισμού. Στη συνέχεια, θα ασχοληθούμε με τον αλγόριθμο EM. Στο κύριο μέρος θα δούμε τα βασικά αποτελέσματα της θεωρίας του κλασικού KMM, καθώς και κάποιες γενικεύσεις του. Επίσης, αξιοποιώντας τις γνώσεις μας για τα KMM σε συνδυασμό με ορισμένα αποτελέσματα της κανονικής κατανομής, θα βγάλουμε τα βασικά αποτελέσματα της θεωρίας των Γραμμικών Δυναμικών Συστημάτων.

Abstract

In order to extenuate the Markov assumption for a set of data points $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, we can consider a hidden Markov model, in which we consider each observation as a result of a stochastic process under one of several unobserved states. In this thesis we will consider the Baum-Welch algorithm and the Viterbi algorithm of the hidden Markov models not only the algebraic way, but we will ascertain that these can be viewed as special cases of the sum-product algorithm and the max-sum algorithm of the graphical models. For this purpose, we will make an extended reference to the graph theory, included the two algorithms referred above, as well as the very helpful d-seperation property. Afterwards, we will deal with the EM algorithm. In the main part, we will see the basic results of the theory of the classic HMM, as well as some extensions of it. Moreover, since we make worthy of our knowledge about the HMMs in combination with some results of the normal distribution, we will obtain the basic results of the theory of the Linear Dynamical Systems.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα πρωτίστως να ευχαριστήσω τον κύριο Χελιώτη για τη συνολική του συνεισφορά και στήριξη στην εκπόνηση της εργασίας αυτής. Για τον ίδιο λόγο, θα ήθελα να ευχαριστήσω και τα άλλα δύο μέλη της τριμελούς επιτροπής, τον κύριο Παπαδάτο και τον κύριο Τρέβεζα. Επιπλέον, είμαι εξίσου ευγνώμων σε όλους τους καθηγητές του τομέα Στατιστικής και Επιχειρησιακής Έρευνας του Τμήματος Μαθηματικών του ΕΚΠΑ για το ήθος τους και τις γνώσεις που μεταλαμπάδευσαν τόσο σε μένα όσο και στους συμφοιτητές μου κατά τη διάρκεια του μεταπτυχιακού προγράμματος σπουδών. Τέλος, όσον αφορά την ηθική υποστήριξη, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου, τους φίλους μου, καθώς και οποιονδήποτε άλλον συνεισέφερε άμεσα ή έμμεσα μέχρι την αποπεράτωση της εργασίας αυτής.

Περιεχόμενα

I	Εισαγωγή, Θεωρία Γραφικών Μοντέλων και Αλγόριθμος EM	9
1	Εισαγωγή	11
1.1	Πιθανότητες	11
1.2	Η κανονική κατανομή	13
1.3	Μέθοδος μέγιστης πιθανοφάνειας	13
1.4	Bernoulli, Διωνυμική και Πολυωνυμική κατανομή	15
1.5	Πίνακες: ορίζουσες, ίχνη, παράγωγοι και ιδιότητες	15
1.6	Δεσμευμένες και περιθώριες κανονικές κατανομές	16
2	Θεωρία Γραφικών Μοντέλων	19
2.1	Γραφικά Μοντέλα	19
2.2	Διατεταγμένα Γραφικά Μοντέλα	19
2.3	Δεσμευμένη ανεξαρτησία	20
2.4	Δ-διαχωρισμός	21
2.5	Μη διατεταγμένα γραφικά μοντέλα και γράφοι παραγόντων	24
2.6	Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου	26
2.7	Ο αλγόριθμος μεγίστου-αθροίσματος	34
3	Ο Αλγόριθμος EM	39
3.1	Ο αλγόριθμος K -μέσων	39
3.2	Μίξη κανονικών κατανομών	41
3.3	Ο αλγόριθμος EM για μίξη κανονικών κατανομών	43
3.4	Μια εναλλακτική θεώρηση του EM	45
II	Κρυμμένα Μαρκοβιανά Μοντέλα και Γραμμικά Δυναμικά Συστήματα	53
4	Κρυμμένα Μαρκοβιανά Μοντέλα	55
4.1	Μαρκοβιανά Μοντέλα	55
4.2	Κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα	58
4.3	Τρία βασικά προβλήματα και δύο υποθέσεις	60
4.4	Μέγιστη πιθανοφάνεια για τα KMM	61
4.5	Επίλυση των προβλημάτων (1) και (2)	66

4.6	Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου για τα KMM	76
4.7	Παράγοντες κλιμάκωσης	79
4.8	Επίλυση του προβλήματος (3) - Αλγόριθμος Viterbi	81
4.9	Γενικεύσεις των κρυμμένων μαρκοβιανών μοντέλων	84
5	Γραμμικά Δυναμικά Συστήματα	91
5.1	Γραμμικά δυναμικά συστήματα	91
5.2	Συμπερασματολογία στα ΓΔΣ	93
5.3	Μέγιστη πιθανοφάνεια στα ΓΔΣ	104
5.4	Επεκτάσεις των ΓΔΣ	106
5.5	Ατομικά φίλτρα	107

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Διατεταγμένος γράφος που αναπαριστά την $p(a, b, c)$ σύμφωνα με την ανάλυση (2.1).	20
2.2	Ουρά-με-ουρά ως προς το μονοπάτι	21
2.3	Κεφάλι-με-ουρά ως προς το μονοπάτι	21
2.4	Κεφάλι-με-κεφάλι ως προς το μονοπάτι	21
2.5	Ένα παράδειγμα γράφου	23
2.6	Ένα δεύτερο παράδειγμα γράφου	23
2.7	Ένας διατεταγμένος γράφος.	24
2.8	Ο ισοδύναμος μη διατεταγμένος.	24
2.9	Γράφος παραγόντων που αντιστοιχεί στην παραγοντοποίηση (2.18)	25
2.10	Η πιθανότητα $p(x_n)$ ισούται με το κανονικοποιημένο γινόμενο των $\mu_\alpha(x_n)$ και $\mu_\beta(x_n)$	26
2.11	Τμήμα ενός γράφου παραγόντων που παρουσιάζει τον υπολογισμό της $p(x)$	27
2.12	Παρουσίαση της παραγοντοποίησης του υπογράφου που σχετίζεται με τον παράγοντα f_s	28
2.13	Παρουσίαση του υπολογισμού του μηνύματος που στέλνεται από μια μεταβλητή σε έναν γειτονικό παράγοντα.	29
2.14	Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινόμενου μπορεί να παρουσιαστεί αποκλειστικά σε σχέση με μηνύματα που στέλνονται από κόμβους παραγόντων. Το εξερχόμενο μήνυμα που φαίνεται με το μπλε βέλος ισούται με το γινόμενο των εισερχομένων μηνυμάτων που φαίνονται με το πράσινο βέλος επί τον παράγοντα f_s και αθροίζοντας πάνω στις μεταβλητές x_1 και x_2	31
2.15	Γράφος παραγόντων για κατανόηση του αλγορίθμου αθροίσματος-γινόμενου.	32
2.16	Μηνύματα από τους κόμβους-φύλλα προς τον κόμβο-ρίζα.	33
2.17	Μηνύματα από τον κόμβο-ρίζα προς τους κόμβους-φύλλα.	33
2.18	Διάγραμμα που δείχνει τις $K = 3$ τιμές των μεταβλητών x_n στο μοντέλο της αλυσίδας. Το βέλος δείχνει την κατεύθυνση των μηνυμάτων στον αλγόριθμο μεγίστου-γινόμενου. Για κάθε τιμή k κάθε μεταβλητής x_n , η συνάρτηση $\phi(x_n)$ ορίζει μια μοναδική τιμή για την προηγούμενη μεταβλητή, που υποδεικνύεται από τις μαύρες γραμμές. Τα δυο μονοπάτια ορίζουν διανύσματα που δίνουν το ολικό μέγιστο της από κοινού πιθανότητας και μπορούν να βρεθούν ιχνηλατώντας στις μαύρες γραμμές με την αντίθετη κατεύθυνση από αυτή του βέλους.	36

3.1	Γραφική αναπαράσταση ενός μοντέλου μίξης κανονικών κατανομών για ένα σύνολο από N αν. και ισόν. παρατηρήσεις $\{\mathbf{x}_n\}$ με λανθάνουσες μεταβλητές $\{\mathbf{z}_n\}$, όπου $n = 1, \dots, N$	42
3.2	Ίδια γραφική αναπαράσταση με το Σχήμα 3.1, αλλά εδώ υποθέτουμε ότι εκτός από τις $\{\mathbf{x}_n\}$, παρατηρούνται και οι λανθάνουσες μεταβλητές $\{\mathbf{z}_n\}$	48
4.1	Μια ακολουθία από ανεξάρτητες και ισόνομες παρατηρήσεις.	55
4.2	Μια Μαρκοβιανή αλυσίδα πρώτης τάξης των παρατηρήσεων $\{\mathbf{x}_n\}$	56
4.3	Μια Μαρκοβιανή αλυσίδα δεύτερης τάξης των παρατηρήσεων $\{\mathbf{x}_n\}$	57
4.4	Αυτό το σημαντικό γραφικό μοντέλο αναπαριστά τόσο τα κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα όσο και τα γραμμικά δυναμικά συστήματα.	58
4.5	Διάγραμμα που αναπαριστά τον πίνακα μετάβασης \mathbf{A} . Κάθε στήλη του διαγράμματος αντιστοιχεί σε μία από τις λανθάνουσες μεταβλητές \mathbf{z}_n	59
4.6	Διάγραμμα μετάβασης ενός αριστερά-προς-δεξιά KMM με 3 καταστάσεις.	60
4.7	Διάγραμμα ενός αριστερά-προς-δεξιά KMM τριών καταστάσεων, όπου η τιμή της λανθάνουσας μεταβλητής επιτρέπεται να αυξηθεί το πολύ κατά 1 σε κάθε μετάβαση.	61
4.8	Παρουσίαση του εμπροσθοδρομικού αλγορίθμου για τον υπολογισμό των μεταβλητών α	71
4.9	Παρουσίαση του οπισθοδρομικού αλγορίθμου για τον υπολογισμό των μεταβλητών β	72
4.10	Ένας γράφος παραγόντων που αναπαριστά τα KMM.	76
4.11	Ένας απλούστερος γράφος παραγόντων που αναπαριστά τα KMM.	77
4.12	Τμήμα ενός διαγράμματος KMM που δείχνει δύο διαφορετικά μονοπάτια. Ο αλγόριθμος Viterbi εντοπίζει το πιο πιθανό μονοπάτι ανάμεσα σε όλα, που είναι εκθετικά τον αριθμό.	82
4.13	Τμήμα ενός αυτοπαλίνδρομου KMM, στο οποίο κάθε παρατηρήσιμη μεταβλητή εξαρτάται από την αντίστοιχη λανθάνουσα, αλλά και τις δύο προηγούμενες παρατηρήσιμες.	86
4.14	Τμήμα ενός KMM εισαγωγής-εξαγωγής, στο οποίο τόσο οι πιθανότητες εκπομπής όσο και οι πιθανότητες μετάβασης εξαρτώνται από την ακολουθία των παρατηρήσεων $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$	87
4.15	Τμήμα ενός factorial HMM	88
4.16	Παράδειγμα ενός μονοπατιού στο factorial HMM που αποτυπώνεται με κόκκινο χρώμα, το οποίο είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς τους μη παρατηρήσιμους κόμβους $\mathbf{z}_n^{(2)}$ και $\mathbf{z}_{n+1}^{(2)}$, και είναι κεφάλι-με-κεφάλι ως προς τους παρατηρήσιμους κόμβους \mathbf{x}_{n-1} και \mathbf{x}_{n+1} . Επομένως δεν ισχύει η δεσμευμένη ανεξαρτησία (4.5) και δεν υπάρχει ακριβές E βήμα για το μοντέλο.	89

Μέρος Ι

Εισαγωγή, Θεωρία Γραφικών
Μοντέλων και Αλγόριθμος EM

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Πιθανότητες

Έστω X και Y τυχαίες μεταβλητές και ένα πείραμα στο οποίο παίρνουμε μετρήσεις από αυτές. Υποθέτουμε ότι η X μπορεί να πάρει οποιαδήποτε από τις τιμές x_i όπου $i = 1, \dots, M$ ενώ η Y οποιαδήποτε από τις τιμές y_j όπου $j = 1, \dots, L$. Θεωρούμε ένα σύνολο N δοκιμών στις οποίες παίρνουμε δείγμα ταυτόχρονα από τις X και Y και έστω ότι ο αριθμός δοκιμών στις οποίες $X = x_i$ και $Y = y_j$ είναι n_{ij} . Επίσης, έστω ότι ο αριθμός των δοκιμών στις οποίες $X = x_i$ (ανεξάρτητα από την τιμή της $Y = y_j$) ισούται με c_i , και αντίστοιχα ο αριθμός των δοκιμών στις οποίες $Y = y_j$ ισούται με r_j .

Η πιθανότητα η X να πάρει την τιμή x_i και η Y να πάρει την τιμή y_j γράφεται $p(X = x_i, Y = y_j)$ και ονομάζεται από κοινού πιθανότητα των $X = x_i$ και $Y = y_j$ και ισούται με

$$p(X = x_i, Y = y_j) = \frac{n_{ij}}{N}. \quad (1.1)$$

Όμοια έχουμε

$$p(X = x_i) = \frac{c_i}{N}. \quad (1.2)$$

Επειδή όμως $c_i = \sum_{j=1}^L n_{ij}$, από τις (1.1) και (1.2) έχουμε

$$p(X = x_i) = \sum_{j=1}^L p(X = x_i, Y = y_j) \quad (1.3)$$

αποτέλεσμα το οποίο λέγεται *κανόνας αθροίσματος* της πιθανότητας. Μερικές φορές η $p(X = x_i)$ καλείται *περιθώρια* πιθανότητα γιατί δίνεται από το άθροισμα ως προς τις άλλες μεταβλητές (εδώ της Y).

Ας θεωρήσουμε τώρα μόνο εκείνες τις περιπτώσεις στις οποίες $X = x_i$. Το ποσοστό αυτών των παρατηρήσεων στις οποίες ταυτόχρονα $Y = y_j$ γράφεται ως $p(Y = y_j | X = x_i)$ και λέγεται δεσμευμένη πιθανότητα του $Y = y_j$ δοθέντος $X = x_i$ και ισούται με

$$p(Y = y_j | X = x_i) = \frac{n_{ij}}{c_i}. \quad (1.4)$$

Από τις (1.1), (1.2) και (1.4) έπεται η ακόλουθη σχέση

$$\begin{aligned} p(X = x_i, Y = y_j) &= \frac{n_{ij}}{c_i} \cdot \frac{c_i}{N} \\ &= p(Y = y_j | X = x_i) p(X = x_i) \end{aligned} \quad (1.5)$$

η οποία λέγεται *κανόνας γινομένου* της πιθανότητας.

Μπορούμε εντούτοις να αποφύγουμε το διαχωρισμό μεταξύ μιας τυχαίας μεταβλητής και των τιμών που παίρνει μια τυχαία μεταβλητή. Δηλαδή μπορούμε απλώς να γράψουμε $p(X)$ για να ορίσουμε μια κατανομή επί της τυχαίας μεταβλητής X και $p(x)$ για να ορίσουμε την κατανομή υπολογισμένη στη συγκεκριμένη τιμή x . Συνεπώς μπορούμε να γράψουμε πιο συνοπτικά τους δύο κανόνες της πιθανότητας.

Οι Κανόνες της Πιθανότητας

$$\text{κανόνας αθροίσματος } p(X) = \sum_Y p(X, Y) \quad (1.6)$$

$$\text{κανόνας γινομένου } p(X, Y) = p(Y|X)p(X, Y) \quad (1.7)$$

Μια πολύ σημαντική σχέση μεταξύ των δεσμευμένων πιθανοτήτων είναι το *θεώρημα Bayes*:

$$p(Y|X) = \frac{p(X|Y)p(Y)}{p(X)}. \quad (1.8)$$

Στη συνέχεια θα δώσουμε κάποιους χρήσιμους ορισμούς. Ο μέσος όρος μιας συνάρτησης $f(x)$ κάτω από μια συνάρτηση πιθανότητας $p(x)$ καλείται *μέση τιμή* της $f(x)$ και συμβολίζεται με $\mathbb{E}[f]$. Για τις διακριτές κατανομές ο τύπος της είναι

$$\mathbb{E}[f] = \sum_x p(x) f(x). \quad (1.9)$$

ενώ για τις συνεχείς αντί για άθροισμα χρησιμοποιούμε ολοκλήρωμα.

Η διασπορά της $f(x)$ ορίζεται ως

$$\text{var}[f] = \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2] \quad (1.10)$$

και είναι μέτρο της διακύμανσης της $f(x)$ γύρω από τη μέση τιμή της. Ένας πιο εύχρηστος τύπος της διασποράς είναι ο εξής

$$\text{var}[f] = \mathbb{E}[f(x)^2] - \mathbb{E}[f(x)]^2. \quad (1.11)$$

Οπότε στην ειδική περίπτωση, η διασπορά της μεταβλητής x δίνεται από

$$\text{var}[x] = \mathbb{E}[x^2] - \mathbb{E}[x]^2. \quad (1.12)$$

Για δυο τυχαίες μεταβλητές x και y η συνδιασπορά δίνεται από

$$\begin{aligned}\text{cov}[x, y] &= \mathbb{E}_{x,y}[(x - \mathbb{E}[x])(y - \mathbb{E}[y])] \\ &= \mathbb{E}_{x,y}[xy] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y]\end{aligned}\quad (1.13)$$

Στη γενικότερη περίπτωση όπου έχουμε δυο διανύσματα τυχαίων μεταβλητών \mathbf{x} και \mathbf{y} η συνδιασπορά είναι ένας πίνακας

$$\begin{aligned}\text{cov}[\mathbf{x}, \mathbf{y}] &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{y}^T - \mathbb{E}[\mathbf{y}^T])] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}[\mathbf{x}\mathbf{y}^T] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\mathbb{E}[\mathbf{y}^T].\end{aligned}\quad (1.14)$$

Για ευκολία, αντί για $\text{cov}[\mathbf{x}, \mathbf{x}]$ γράφουμε απ' ευθείας $\text{cov}[\mathbf{x}]$.

1.2 Η κανονική κατανομή

Από το σύνολο των κατανομών, θα χρειαστεί να δώσουμε έμφαση σε μια από τις σημαντικότερες κατανομές για συνεχείς μεταβλητές, την *κανονική κατανομή*. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας μιας τέτοιας μεταβλητής x ισούται με

$$\mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x - \mu)^2\right\}\quad (1.15)$$

και ρυθμίζεται από δυο παραμέτρους: το μ που λέγεται *μέση τιμή* και το σ^2 που λέγεται *διασπορά*. Η τετραγωνική ρίζα της διασποράς, το σ , καλείται *τυπική απόκλιση*. Η ονομασία των παραμέτρων ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα, μιας και αποδεικνύεται ότι όντως $\mathbb{E}[x] = \mu$ και $\text{var}[x] = \sigma^2$.

Είναι επίσης πολύ σημαντική η κανονική κατανομή ορισμένη σε ένα D -διάστατο διάνυσμα \mathbf{x} συνεχών μεταβλητών, η οποία δίνεται από

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\}\quad (1.16)$$

όπου το D -διάστατο διάνυσμα $\boldsymbol{\mu}$ καλείται *μέση τιμή*, ο $D \times D$ πίνακας $\boldsymbol{\Sigma}$ καλείται *συνδιασπορά* και το $|\boldsymbol{\Sigma}|$ είναι η ορίζουσα του $\boldsymbol{\Sigma}$.

1.3 Μέθοδος μέγιστης πιθανοφάνειας

Η μέθοδος μέγιστης πιθανοφάνειας αποτελεί μια γενική τεχνική κατασκευής εκτιμητών για μια άγνωστη παράμετρο θ . Έστω ότι έχουμε N το πλήθος ανεξάρτητες και ισόνομες τυχαίες μεταβλητές με συνεχή κατανομή που εξαρτάται από μια άγνωστη παράμετρο θ . Εάν πάρουμε ένα δείγμα παρατηρήσεων από αυτές τότε η από κοινού πυκνότητα του δείγματος ισούται με

$$p(\mathbf{x}|\theta) = \prod_{i=1}^N p(x_i|\theta).\quad (1.17)$$

Η συνάρτηση πιθανοφάνειας είναι απλά και μόνον η πυκνότητα υπολογισμένη στην τιμή του παρατηρηθέντος δείγματος και θεωρούμενη ως συνάρτηση του θ . Μεγιστοποιώντας ως προς θ τη συνάρτηση πιθανοφάνειας, βρίσκουμε μια στατιστική συνάρτηση (που έχει ως στοιχεία τα x_1, \dots, x_N και ίσως όχι όλα από αυτά) που δεν περιέχει καθόλου το θ και λέγεται εκτιμητής μέγιστης πιθανοφάνειας του θ , ή αλλιώς ΕΜΠ του θ . Τις περισσότερες φορές είναι πιο βολικό να μεγιστοποιούμε το λογάριθμο της συνάρτησης πιθανοφάνειας.

Ας πάρουμε για παράδειγμα την κανονική κατανομή. Έχουμε

$$p(\mathbf{x}|\mu, \sigma^2) = \prod_{i=1}^N \mathcal{N}(x_i|\mu, \sigma^2). \quad (1.18)$$

Από τις (1.15) και (1.18), η λογαριθμική πιθανοφάνεια γράφεται ως εξής:

$$\ln p(\mathbf{x}|\mu, \sigma^2) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu)^2 - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{N}{2} \ln(2\pi). \quad (1.19)$$

Μεγιστοποιώντας την (1.19) ως προς το μ , παίρνουμε τον ΕΜΠ του μ που δίνεται από

$$\mu_{\text{ML}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n \quad (1.20)$$

που λέγεται και *δειγματικός μέσος*. Παρομοίως, μεγιστοποιώντας την (1.19) ως προς το σ^2 , παίρνουμε τον ΕΜΠ του σ^2 που δίνεται από

$$\sigma_{\text{ML}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu_{\text{ML}})^2 \quad (1.21)$$

η οποία είναι η *δειγματική διασπορά* υπολογισμένη ως συνάρτηση του μ_{ML} .

Δοθέντος ενός συνόλου N ανεξαρτήτων παρατηρήσεων από μια D -διάστατη κανονική κατανομή, μπορούμε πάλι να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους με τη μέθοδο μέγιστης πιθανοφάνειας. Η λογαριθμική συνάρτηση πιθανοφάνειας δίνεται από

$$\ln p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = -\frac{ND}{2} \ln(2\pi) - \frac{N}{2} \ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}). \quad (1.22)$$

Η παράγωγος της λογαριθμικής πιθανοφάνειας ως προς $\boldsymbol{\mu}$ ισούται με

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}} \ln p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{n=1}^N \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}) \quad (1.23)$$

και θέτοντας αυτή την παράγωγο ίση με μηδέν παίρνουμε την ΕΜΠ του $\boldsymbol{\mu}$ που ισούται με

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{ML}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{x}_n. \quad (1.24)$$

Η μεγιστοποίηση της (1.22) ως προς το $\boldsymbol{\Sigma}$ είναι πιο περίπλοκη και δεν θα τη δούμε αναλυτικά. Ο ΕΜΠ του πίνακα συνδιασποράς τελικά δίνεται από

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ML}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{\text{ML}})(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{\text{ML}})^T. \quad (1.25)$$

1.4 Bernoulli, Διωνυμική και Πολυωνυμική κατανομή

Θεωρούμε μια δίτιμη μεταβλητή $x \in \{0,1\}$. Η πιθανότητα του $x = 1$ δίνεται από την παράμετρο μ , δηλαδή $p(x = 1|\mu) = \mu$. Η συνάρτηση πιθανότητας της x επομένως δίνεται από

$$\text{Bern}(x|\mu) = \mu^x(1 - \mu)^{1-x} \quad (1.26)$$

η οποία είναι γνωστή σαν κατανομή *Bernoulli* και έχει μέση τιμή ίση με μ .

Μπορούμε τώρα να βρούμε την κατανομή των m παρατηρήσεων για τις οποίες $x = 1$, δθέντος ότι έχουμε συνολικά N παρατηρήσεις. Αυτή λέγεται *διωνυμική κατανομή* και γράφεται ως εξής:

$$\text{Bin}(m|N, \mu) = \binom{N}{m} \mu^m (1 - \mu)^{N-m} \quad (1.27)$$

και έχει μέση τιμή ίση με $N\mu$.

Συχνά ωστόσο χρειαζόμαστε διακριτές μεταβλητές που μπορούν να πάρουν μια από K διαφορετικές τιμές. Αν έχουμε π.χ. μια μεταβλητή που μπορεί να πάρει $K = 6$ τιμές και μια παρατήρησή της αντιστοιχεί στην τιμή $x_3 = 1$, τότε το \mathbf{x} αναπαρίσταται από $\mathbf{x} = (0, 0, 1, 0, 0, 0)^T$. Η πιθανότητα του $x_k = 1$ ισούται με μ_k και ο συνολικός αριθμός των παρατηρήσεων (μεταξύ των N) για τις οποίες $x_k = 1$ ισούται με m_k . Η κατανομή που περιγράψαμε λέγεται *πολυωνυμική κατανομή* και έχει συνάρτηση πιθανότητας την

$$\text{Mult}(m_1, m_2, \dots, m_K | \boldsymbol{\mu}, N) = \binom{N}{m_1 m_2 \dots m_K} \prod_{k=1}^K \mu_k^{m_k}. \quad (1.28)$$

Ισχύουν οι σχέσεις $\sum_k \mu_k = 1$ και $\sum_k m_k = N$.

1.5 Πίνακες: ορίζουσες, ίχνη, παράγωγοι και ιδιότητες

Αναφέρουμε κάποιες ιδιότητες των πινάκων που θα χρησιμεύσουν αργότερα.

$$(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T \quad (1.29)$$

$$(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}^{-1} \quad (1.30)$$

$$(\mathbf{A}^T)^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^T \quad (1.31)$$

Σημαντικές επίσης ταυτότητες που αφορούν την αντιστροφή πινάκων είναι

$$(\mathbf{P}^{-1} + \mathbf{B}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{R}^{-1} = \mathbf{P} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{P} \mathbf{B}^T + \mathbf{R})^{-1} \quad (1.32)$$

$$(\mathbf{I} + \mathbf{AB})^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{A} (\mathbf{I} + \mathbf{BA})^{-1} \quad (1.33)$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{BD}^{-1} \mathbf{C})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{D} + \mathbf{CA}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{CA}^{-1} \quad (1.34)$$

Ως ίχνος ενός πίνακα \mathbf{A} ορίζουμε το άθροισμα των στοιχείων της κυρίας διαγωνίου και συμβολίζεται με $\text{Tr}(\mathbf{A})$. Ισχύει η σχέση

$$\text{Tr}(\mathbf{ABC}) = \text{Tr}(\mathbf{CAB}) = \text{Tr}(\mathbf{BCA}) \quad (1.35)$$

ενώ για την ορίζουσα ισχύουν οι σχέσεις

$$|\mathbf{AB}| = |\mathbf{A}||\mathbf{B}| \quad (1.36)$$

$$|\mathbf{A}^{-1}| = \frac{1}{|\mathbf{A}|}. \quad (1.37)$$

Τέλος, όσον αφορά την παραγωγήσιση διανυσμάτων και πινάκων ισχύουν τα εξής:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}^T \mathbf{a}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{a}^T \mathbf{x}) = \mathbf{a} \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \text{Tr}(\mathbf{AB}) = \mathbf{B}^T \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \text{Tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B}) = \mathbf{B} \quad (1.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \text{Tr}(\mathbf{A}) = \mathbf{I} \quad (1.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \text{Tr}(\mathbf{ABA}^T) = \mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{B}^T) \quad (1.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \ln|\mathbf{A}| = (\mathbf{A}^{-1})^T. \quad (1.43)$$

1.6 Δεσμευμένες και περιθώριες κανονικές κατανομές

Μια σημαντική ιδιότητα της πολυδιάστατης κανονικής κατανομής είναι ότι αν δυο σύνολα μεταβλητών έχουν από κοινού κανονική κατανομή, τότε η δεσμευμένη κατανομή του ενός συνόλου δοθέντος του άλλου είναι πάλι κανονική. Επιπλέον η περιθώριες κατανομές και των δυο συνόλων είναι επίσης κανονικές. Θα αναφέρουμε χωρίς περισσότερη ανάλυση κάποια αποτελέσματα που θα χρησιμεύσουν σε επόμενο κεφάλαιο.

Έστω \mathbf{x} και \mathbf{y} δυο τυχαία διανύσματα για τα οποία ισχύει

$$p(\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1}) \quad (1.44)$$

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{Ax} + \mathbf{b}, \mathbf{L}^{-1}) \quad (1.45)$$

όπου οι $\boldsymbol{\Lambda}$ και \mathbf{L} λέγονται πίνακες ακρίβειας. Ορίζουμε το διάνυσμα \mathbf{z} ως εξής:

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix}.$$

Αποδεικνύεται ότι η κατανομή του \mathbf{z} είναι κανονική και έχει μέση τιμή ίση με

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}] = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu} \\ \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b} \end{pmatrix}. \quad (1.46)$$

και πίνακα συνδιασποράς των

$$\text{cov}[\mathbf{z}] = \begin{pmatrix} \Sigma_{\mathbf{x}\mathbf{x}} & \Sigma_{\mathbf{x}\mathbf{y}} \\ \Sigma_{\mathbf{y}\mathbf{x}} & \Sigma_{\mathbf{y}\mathbf{y}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda^{-1} & \Lambda^{-1}\mathbf{A}^T \\ \mathbf{A}\Lambda^{-1} & \mathbf{L}^{-1} + \mathbf{A}\Lambda^{-1}\mathbf{A}^T \end{pmatrix}. \quad (1.47)$$

Επίσης αποδεικνύεται ότι οι κατανομές των \mathbf{y} και $\mathbf{x}|\mathbf{y}$ είναι επίσης κανονικές και δίνονται από

$$p(\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}, \mathbf{L}^{-1} + \mathbf{A}\Lambda^{-1}\mathbf{A}^T) \quad (1.48)$$

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\Sigma\{\mathbf{A}^T\mathbf{L}(\mathbf{y} - \mathbf{b}) + \Lambda\boldsymbol{\mu}\}, \Sigma) \quad (1.49)$$

όπου

$$\Sigma = (\Lambda + \mathbf{A}^T\mathbf{L}\mathbf{A})^{-1}. \quad (1.50)$$

Κεφάλαιο 2

Θεωρία Γραφικών Μοντέλων

2.1 Γραφικά Μοντέλα

Θα μπορούσαμε να διατυπώσουμε και να επιλύσουμε μοντέλα πιθανοτήτων μέσα από καθαρά αλγεβρικές μεθόδους. Παρόλα αυτά μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι είναι πλεονεκτικότερο να ανάγουμε την ανάλυση σε διαγραμματικές αναπαραστάσεις κατανομών που λέγονται γραφικά μοντέλα πιθανοτήτων. Ενδεικτικά, αυτά προσφέρουν τις παρακάτω χρήσιμες ιδιότητες:

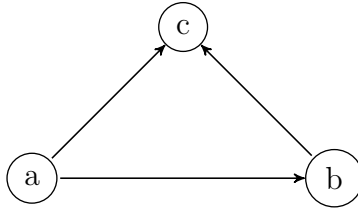
- Μας δίνεται η δυνατότητα να απεικονίσουμε πολύπλοκα πιθανοθεωρητικά μοντέλα.
- Σημαντικές ιδιότητες του μοντέλου όπως η δεσμευμένη ανεξαρτησία μπορούν να εντοπίζονται βλέποντας το γράφο.

Ένας γράφος περιέχει κόμβους οι οποίοι συνδέονται με συνδέσμους. Σε πιθανοθεωρητικά γραφικά μοντέλα κάθε κόμβος συμβολίζει μία ή περισσότερες τυχαίες μεταβλητές ενώ οι σύνδεσμοι συμβολίζουν σχέσεις πιθανοτήτων μεταξύ των μεταβλητών. Αρχικά θα μελετήσουμε τα *διατεταγμένα γραφικά μοντέλα* ή αλλιώς *μπεϋζιανά δίκτυα*, στα οποία οι σύνδεσμοι έχουν συγκεκριμένη κατεύθυνση που υποδεικνύονται από βέλη. Χρησιμεύουν κυρίως για την έκφραση αιτιολογικών σχέσεων μεταξύ τυχαίων μεταβλητών. Η άλλη κύρια κλάση γραφικών μοντέλων είναι τα *μη διατεταγμένα γραφικά μοντέλα* ή αλλιώς *μαρκοβιανά τυχαία πεδία*, στα οποία οι σύνδεσμοι δεν έχουν βέλη και δεν έχουν κατευθυντήρια σημασία. Συνήθως χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν ελαστικούς περιορισμούς μεταξύ μεταβλητών. Για την επίλυση προβλημάτων συμπερασματολογίας, είναι συχνά βολικό να μετατρέπουμε και τα διατεταγμένα και τα μη διατεταγμένα μοντέλα σε *γράφους παραγόντων*.

2.2 Διατεταγμένα Γραφικά Μοντέλα

Έστω η από κοινού κατανομή $p(a, b, c)$ τριών μεταβλητών a, b, c . Εφαρμόζοντας τον κανόνα γινομένου της πιθανότητας (1.7) μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} p(a, b, c) &= p(c|a, b)p(a, b) \\ &= p(c|a, b)p(b|a)p(a). \end{aligned} \tag{2.1}$$



Σχήμα 2.1: Διατεταγμένος γράφος που αναπαριστά την $p(a, b, c)$ σύμφωνα με την ανάλυση (2.1).

Μπορούμε να αναπαραστήσουμε την $p(a, b, c)$ σύμφωνα με την ανάλυση (2.1), ως διατεταγμένο γράφο. Αρχικά δημιουργούμε τρεις κόμβους a, b, c που αναπαριστούν τις αντίστοιχες μεταβλητές. Έπειτα για κάθε δεσμευμένη κατανομή δημιουργούμε βέλη που ξεκινούν από τις μεταβλητές πάνω στις οποίες γίνεται η εκάστοτε δέσμευση. Το αποτέλεσμα είναι ο γράφος του Σχήματος 2.1. Εάν υπάρχει ένας σύνδεσμος από έναν κόμβο a σε έναν κόμβο b τότε λέμε ότι ο a είναι ο γονέας του b και ισοδύναμα ότι ο b είναι το παιδί του a .

Στην γενικότερη περίπτωση όπου έχουμε ένα γράφο με K κόμβους, η από κοινού κατανομή δίνεται από

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^K p(x_k | \text{pa}_k) \quad (2.2)$$

όπου pa_k ορίζεται το σύνολο των γονέων του x_k και $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_K\}$. Οι διατεταγμένοι γράφοι με τους οποίους θα ασχοληθούμε πρέπει να είναι *διατεταγμένοι ακυκλικοί γράφοι*, με άλλα λόγια δεν υπάρχουν κλειστά μονοπάτια του γράφου ώστε να μπορούμε να κατευθυνθούμε από κόμβο σε κόμβο ακολουθώντας την φορά των βελών και να καταλήξουμε στον αρχικό κόμβο.

2.3 Δεσμευμένη ανεξαρτησία

Στην ενότητα αυτή θα επικεντρωθούμε στην ιδιότητα της *δεσμευμένης ανεξαρτησίας*. Έστω τρεις τυχαίες μεταβλητές a, b και c και υποθέτουμε ότι η δεσμευμένη κατανομή του a δοθέντων των b και c δεν εξαρτάται από την τιμή της b , δηλαδή

$$p(a|b, c) = p(a|c) . \quad (2.3)$$

Λέμε ότι η a είναι δεσμευμένα ανεξάρτητη από τη b δοθείσης της c . Αν τώρα γράψουμε την από κοινού πιθανότητα των a και b δοθείσης της c έχουμε

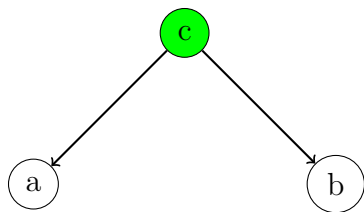
$$\begin{aligned} p(a, b|c) &= p(a|b, c)p(b|c) \\ &= p(a|c)p(b|c) . \end{aligned} \quad (2.4)$$

Αυτό μας λέει ότι οι μεταβλητές a και b είναι στατιστικά ανεξάρτητες δοθείσης της c . Για συντομία θα γράφουμε ισοδύναμα ότι

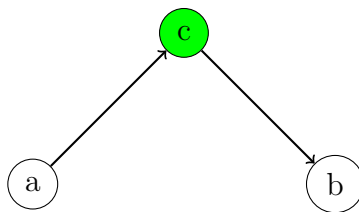
$$a \perp\!\!\!\perp b \mid c \quad (2.5)$$

ενώ όταν οι a και b είναι ανεξάρτητες θα γράφουμε συμβολικά

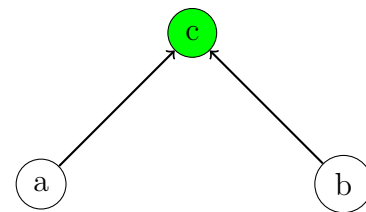
$$a \perp\!\!\!\perp b \mid \emptyset . \quad (2.6)$$



Σχήμα 2.2:
Ουρά-με-ουρά
ως προς το
μονοπάτι



Σχήμα 2.3:
Κεφάλι-με-
ουρά ως προς
το μονοπάτι



Σχήμα 2.4:
Κεφάλι-με-
κεφάλι ως
προς το
μονοπάτι

Αν η από κοινού πιθανότητα ενός συνόλου μεταβλητών δίνεται συναρτήσει ενός γινομένου δεσμευμένων πιθανοτήτων, τότε θα μπορούσαμε να εξετάσουμε αν ισχύει μια δεσμευμένη ανεξαρτησία εφαρμόζοντας επανειλημμένα τους κανόνες αθροίσματος και γινομένου της πιθανότητας. Στην πράξη η προσέγγιση αυτή συνήθως είναι μακροσκελής. Ένα σημαντικό και πρακτικό πλεονέκτημα των γραφικών μοντέλων είναι ότι οι δεσμευμένες ανεξαρτησίες μπορούν να εντοπιστούν απευθείας από το γράφο και χωρίς να χρειάζονται επιπλέον υπολογισμοί. Το γενικό πλαίσιο για να το πετύχουμε αυτό λέγεται δ -διαχωρισμός, όπου το “ δ ” προέρχεται από το “διατεταγμένος”. Θα δούμε σε επόμενη παράγραφο και τη διατύπωση του κριτηρίου δ -διαχωρισμού.

2.4 Δ-διαχωρισμός

Από εδώ και στο εξής όταν δεσμεύουμε πάνω σε μια μεταβλητή (όταν η τιμή της έχει παρατηρηθεί), στον διατεταγμένο γράφο της από κοινού πιθανότητας, ο κόμβος που αντιστοιχεί στην παρατηρηθείσα μεταβλητή θα έχει πράσινο χρώμα.

Ας θεωρήσουμε στο Σχήμα 2.2 το μονοπάτι από τον κόμβο a στον κόμβο b μέσω του c . Ο κόμβος c λέγεται ότι είναι *ουρά-με-ουρά* ως προς το μονοπάτι αυτό γιατί συνδέεται με την ουρά των δυο βελών. Η παρουσία ενός τέτοιου μονοπατιού καθιστά τους κόμβους a και b εξαρτημένους. Όμως όταν δεσμεύουμε στον κόμβο c , ο δεσμευμένος κόμβος “μπλοκάρει” το μονοπάτι από το a στο b και καθιστά τους a και b δεσμευμένα ανεξάρτητους. Ανάλογα στο Σχήμα 2.3, ο κόμβος c λέγεται ότι είναι *κεφάλι-με-ουρά* ως προς το μονοπάτι από το a στο b γιατί συνδέεται με το κεφάλι του πρώτου βέλους και την ουρά του δεύτερου βέλους. Ξανά ένα τέτοιο μονοπάτι κάνει τους κόμβους a και b εξαρτημένους, ενώ αν παρατηρηθεί ο c , η παρατήρηση αυτή “μπλοκάρει” το μονοπάτι και συνεπώς $a \perp b \mid c$.

Ας αποδείξουμε τον ισχυρισμό μας για την πρώτη περίπτωση. Θεωρούμε τον γράφο του Σχήματος 2.2, με τη διαφορά ότι αρχικά δεν έχουμε δεσμεύσει στον κόμβο c . Η από κοινού κατανομή που αντιστοιχεί στο γράφο, λόγω της σχέσης (2.2) ισούται με

$$p(a, b, c) = p(a|c)p(b|c)p(c). \quad (2.7)$$

Αθροίζοντας και τις δύο πλευρές ως προς c , παίρνουμε

$$p(a, b) = \sum_c p(a|c)p(b|c)p(c). \quad (2.8)$$

Το άθροισμα αυτό εν γένει δεν ισούται με το γινόμενο $p(a)p(b)$, άρα γενικά οι a και b δεν είναι ανεξάρτητες.

Αν τώρα δεσμεύσουμε πάνω στη μεταβλητή c , όπως ακριβώς στο Σχήμα 2.2, μπορούμε λόγω της σχέσης (2.7) να γράψουμε

$$\begin{aligned} p(a, b|c) &= \frac{p(a, b, c)}{p(c)} \\ &= p(a|c)p(b|c) \end{aligned} \quad (2.9)$$

και έτσι συμπεραίνουμε ότι $a \perp\!\!\!\perp b | c$.

Ας δούμε τη δεύτερη περίπτωση, αυτή του κόμβου που είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς το μονοπάτι. Ανατρέχουμε στο Σχήμα 2.3, όμως υποθέτουμε ότι ο κόμβος c δεν είναι δεσμευμένος. Η από κοινού πιθανότητα των τριών μεταβλητών ισούται με

$$p(a, b, c) = p(a)p(c|a)p(b|c). \quad (2.10)$$

Εάν αθροίσουμε και τα δύο μέλη ως προς c , έχουμε

$$p(a, b) = p(a) \sum_c p(c|a)p(b|c) = p(a)p(b|a) \quad (2.11)$$

που δεν ισούται με $p(a)p(b)$, άρα γενικά οι a και b δεν είναι ανεξάρτητες. Δεσμεύοντας όμως στην c , παίρνουμε

$$\begin{aligned} p(a, b|c) &= \frac{p(a, b, c)}{p(c)} \\ &= \frac{p(a)p(c|a)p(b|c)}{p(c)} \\ &= p(a|c)p(b|c) \end{aligned} \quad (2.12)$$

οπότε ισχύει η δεσμευμένη ανεξαρτησία $a \perp\!\!\!\perp b | c$.

Στο Σχήμα 2.4, ο κόμβος c λέγεται ότι είναι κεφάλι-με-κεφάλι ως προς το μονοπάτι $a - c - b$ γιατί συνδέεται με τα κεφάλια των δύο βελών. Όταν ο c δεν έχει παρατηρηθεί μπλοκάρει το μονοπάτι και οι μεταβλητές a και b είναι ανεξάρτητες, ενώ όταν παρατηρείται ξεμπλοκάρει το μονοπάτι και οι a και b γίνονται εξαρτημένες.

Πράγματι, η από κοινού πιθανότητα του γράφου ισούται με

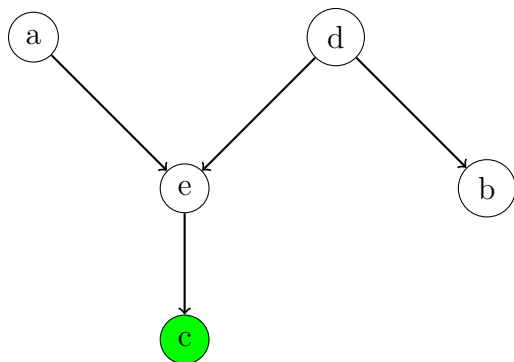
$$p(a, b, c) = p(a)p(b)p(c|a, b) \quad (2.13)$$

Στην περίπτωση που καμία από τις μεταβλητές δεν παρατηρείται, αθροίζοντας και τα δύο μέλη ως προς c , παίρνουμε

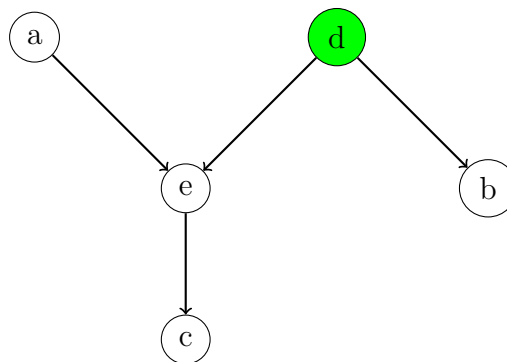
$$p(a, b) = p(a)p(b) \quad (2.14)$$

επομένως οι a και b είναι ανεξάρτητες. Εάν δεσμεύσουμε όμως στον c , όπως στο Σχήμα 2.4, τότε η δεσμευμένη πιθανότητα των a και b δοθείσης της c ισούται με

$$\begin{aligned} p(a, b|c) &= \frac{p(a, b, c)}{p(c)} \\ &= \frac{p(a)p(b)p(c|a, b)}{p(c)} \end{aligned} \quad (2.15)$$



Σχήμα 2.5: Ένα παράδειγμα γράφου



Σχήμα 2.6: Ένα δεύτερο παράδειγμα γράφου

που δεν ταυτίζεται με το γινόμενο $p(a|c)p(b|c)$ άρα δεν ισχύει η δεσμευμένη ανεξαρτησία.

Υπάρχει τέλος ένα λεπτό σημείο στην τελευταία περίπτωση. Θα χρειαστούμε έναν ακόμη ορισμό. Λέμε ότι ο κόμβος y είναι απόγονος του κόμβου x εάν υπάρχει μονοπάτι από τον x στον y ώστε κάθε βήμα του μονοπατιού να ακολουθεί τη φορά των βελών. Αποδεικνύεται ότι ένα κεφάλι-με-κεφάλι μονοπάτι ξεμπλοκάρεται εάν είτε ο κόμβος είτε οποιοσδήποτε από τους απογόνους του παρατηρηθεί.

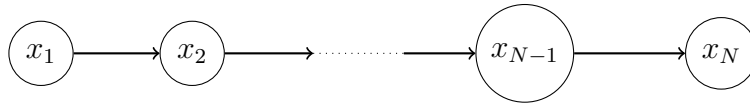
Συνοψίζοντας, ένας ουρά-με-ουρά ή κεφάλι-με-ουρά κόμβος αφήνει ένα μονοπάτι μπλοκαρισμένο εκτός και αν παρατηρηθεί, οπότε και μπλοκάρει το μονοπάτι. Αντίθετα ένας κεφάλι-με-κεφάλι κόμβος μπλοκάρει ένα μονοπάτι αν δεν έχει παρατηρηθεί, εάν όμως είτε ο κόμβος είτε οποιοσδήποτε από τους απογόνους του παρατηρηθεί, τότε το μονοπάτι ξεμπλοκάρεται. Αυτό είναι το κριτήριο δ-διαχωρισμού.

Δίνουμε τώρα μια γενικότερη διατύπωση του κριτηρίου δ-διαχωρισμού για διατεταγμένους γράφους. Θεωρούμε έναν διατεταγμένο γράφο στον οποίο τα A, B και C είναι τυχαία ξένα μεταξύ τους σύνολα γράφων. Θέλουμε να διαπιστώσουμε εάν ισχύει $A \perp\!\!\!\perp B \mid C$ για έναν δοθέντα διατεταγμένο ακυκλικό γράφο. Γι' αυτό θεωρούμε όλα τα δυνατά μονοπάτια από οποιονδήποτε κόμβο του A προς οποιονδήποτε κόμβο του B . Κάθε τέτοιο μονοπάτι θα λέγεται μπλοκαρισμένο εάν περιλαμβάνει κόμβο τέτοιοι ώστε είτε

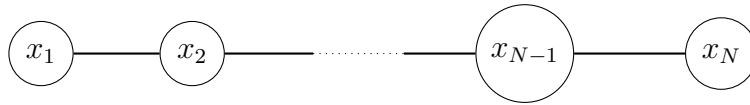
1. τα βέλη στο μονοπάτι συναντιούνται είτε κεφάλι-με-ουρά είτε ουρά-με-ουρά στον κόμβο αυτό, και ο κόμβος είναι στο σύνολο C , είτε
2. τα βέλη συναντιούνται κεφάλι-με-κεφάλι στον κόμβο, και ούτε ο κόμβος ούτε κάποιος από τους απογόνους του βρίσκεται στο σύνολο C .

Εάν όλα τα μονοπάτια είναι μπλοκαρισμένα, τότε το A λέγεται δ-διαχωρισμένο από το B μέσω του C και για την από κοινού κατανομή όλων των μεταβλητών του γράφου ισχύει $A \perp\!\!\!\perp B \mid C$.

Θα δώσουμε δύο παραδείγματα για το δ-διαχωρισμό. Στο Σχήμα 2.5 το μονοπάτι από τον a στον b δεν μπλοκάρεται από τον d γιατί είναι ουρά-με-ουρά κόμβος για το μονοπάτι και δεν παρατηρείται. Ούτε μπλοκάρεται από τον e , γιατί εάν και είναι κεφάλι-με-κεφάλι κόμβος, έχει απόγονο τον c που ανήκει στο σύνολο των δεσμευμένων κόμβων. Άρα για τον γράφο αυτό δεν ισχύει $a \perp\!\!\!\perp b \mid c$. Στο Σχήμα 2.6 το μονοπάτι από τον a στον b μπλοκάρεται από τον d γιατί είναι ουρά-με-ουρά κόμβος που παρατηρείται και συνεπώς $a \perp\!\!\!\perp b \mid d$. Επίσης μπλοκάρεται από τον e ,



Σχήμα 2.7: Ένας διατεταγμένος γράφος.



Σχήμα 2.8: Ο ισοδύναμος μη διατεταγμένος.

γιατί ο e είναι κεφάλι-με-κεφάλι κόμβος, και ούτε αυτός ούτε κάποιος από τους απογόνους του ανήκει στο σύνολο των δεσμευμένων κόμβων.

Για τον δ -διαχωρισμό, οι ντετερμινιστικοί παράμετροι των κατανομών συμπεριφέρονται σαν παρατηρηθέντες κόμβοι. Οι κόμβοι των παραμέτρων αυτών δεν έχουν ποτέ γονείς και έτσι όλα τα μονοπάτια που περνούν από αυτούς είναι ουρά-με-ουρά και συνεπώς μπλοκαρισμένα. Συνεπώς δεν παίζουν ρόλο στο δ -διαχωρισμό. Εύκολα επίσης αποδεικνύεται χρησιμοποιώντας δ -διαχωρισμό ότι όταν έχουμε ένα δείγμα από ανεξάρτητες και ισόνομες τ.μ. που καθορίζονται από κατανομή με κοινή άγνωστη παράμετρο, τότε η από κοινού πιθανότητα του δείγματος ισούται με το γινόμενο των πιθανοτήτων κάθε παρατήρησης.

2.5 Μη διατεταγμένα γραφικά μοντέλα και γράφοι παραγόντων

Η δεύτερη κύρια κλάση γραφικών μοντέλων είναι τα μη διατεταγμένα γραφικά μοντέλα. Αυτά περιέχουν ένα σύνολο κόμβων, καθένας από τους οποίους αντιστοιχεί σε μια μεταβλητή ή σε ένα σύνολο μεταβλητών και ένα σύνολο συνδέσμων καθένας από τους οποίους συνδέει ένα ζεύγος κόμβων. Οι σύνδεσμοι δεν είναι διατεταγμένοι, δηλαδή δεν έχουν βέλη.

Μπορούμε και εδώ να εξετάσουμε για δεσμευμένη ανεξαρτησία, δηλαδή εάν $A \perp\!\!\!\perp B \mid C$. Θεωρούμε όλα τα μονοπάτια που συνδέουν κόμβους του συνόλου A με κόμβους του συνόλου B . Εάν όλα τα μονοπάτια περνούν από έναν ή περισσότερους κόμβους του C , τότε όλα αυτά τα μονοπάτια είναι μπλοκαρισμένα και ισχύει η συγκεκριμένη δεσμευμένη ανεξαρτησία. Διαφορετικά, η ανεξαρτησία δεν ισχύει απαραίτητα. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει κατανομή που αντιστοιχεί με το γράφο που δεν ικανοποιεί τη σχέση δεσμευμένης ανεξαρτησίας.

Συχνά χρειάζεται να μετατρέψουμε έναν διατεταγμένο γράφο σε μη διατεταγμένο όπως φαίνεται στα Σχήματα 2.7 και 2.8, ενώ το αντίστροφο είναι σπανιότερο και παρουσιάζει προβλήματα κυρίως εξαιτίας περιορισμών κανονικοποίησης.

Έστω ότι θέλουμε να κάνουμε ακριβή συμπερασματολογία σε μια αλυσίδα από κόμβους όπως στο Σχήμα 2.8, δηλαδή να υπολογίσουμε π.χ. την περιθώρια πιθανότητα ενός κόμβου ή την από κοινού πιθανότητα πολλών κόμβων. Αποδεικνύεται ότι η πιθανότητα αυτή ισούται με το γινόμενο

δύο συναρτήσεων $\mu_\alpha(x_n)$ και $\mu_\beta(x_n)$ επί μια σταθερά κανονικοποίησης, δηλαδή

$$p(x_n) = \frac{1}{Z} \mu_\alpha(x_n) \mu_\beta(x_n) . \quad (2.16)$$

Οι συναρτήσεις αυτές λέγονται *μηνύματα*. Το $\mu_\alpha(x_n)$ είναι συνάρτηση του x_n , όμως η τιμή του εξαρτάται και από τους κόμβους $\{x_1, \dots, x_{n-1}\}$. Ανάλογα, η τιμή του $\mu_\beta(x_n)$ εξαρτάται και από τους κόμβους $\{x_{n+1}, \dots, x_N\}$. Τα μηνύματα $\mu_\alpha(x_n)$ και $\mu_\beta(x_n)$ μπορούν να υπολογιστούν αναδρομικά. Η α αναδρομή είναι εμπροσθοδρομική και ξεκινά αφότου υπολογίσουμε το $\mu_\alpha(x_2)$, ενώ η β αναδρομή είναι οπισθοδρομική και ξεκινά αφού προηγουμένως υπολογιστεί το $\mu_\beta(x_N)$. Μπορούμε στη συνέχεια -για μια αλυσίδα κόμβων- να υπολογίσουμε την από κοινού πιθανότητα δυο γειτονικών κόμβων και τελικά όλων των κόμβων αφού πρώτα έχει ολοκληρωθεί η μεταφορά των μηνυμάτων που απαιτούνται για να υπολογιστούν οι περιθώριες πιθανότητες.

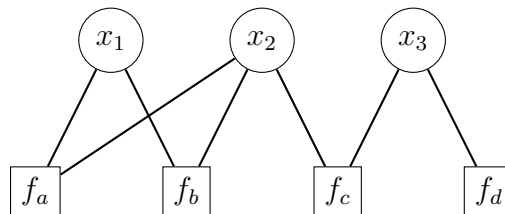
Να επισημάνουμε ότι γράφοι που έχουν τη μορφή του Σχήματος 2.10 λέγονται *μαρκοβιανές αλυσίδες*, και οι αντίστοιχες εξισώσεις μετάδοσης μηνυμάτων αποτελούν ένα παράδειγμα των εξισώσεων *Chapman-Kolmogorov* για μαρκοβιανές διαδικασίες.

Ακριβή συμπερασματολογία με μετακίνηση τοπικών μηνυμάτων μπορούμε να πετύχουμε και σε μια ευρύτερη κλάση γράφων που λέγονται *δέντρα*. Η διάδοση μηνυμάτων που περιγράψαμε προηγουμένως για τις αλυσίδες γενικεύεται για να πάρουμε τον αλγόριθμο *αθροίσματος-γινομένου* που μας επιτρέπει ακριβή συμπερασματολογία σε γράφους-δέντρα.

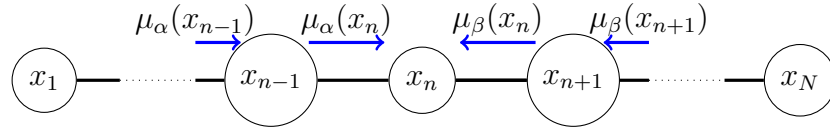
Για τους μη διατεταγμένους γράφους, δέντρο ορίζεται ένας γράφος στον οποίο υπάρχει ένα και μόνο ένα μονοπάτι για κάθε ζεύγος κόμβων. Για τους διατεταγμένους γράφους, δέντρο είναι ένας γράφος στον οποίο υπάρχει ένας μοναδικός κόμβος που λέγεται *ρίζα*, που δεν έχει γονείς, και όλοι οι άλλοι κόμβοι έχουν έναν γονέα. Μια κατανομή που αναπαρίσταται με ένα διατεταγμένο δέντρο μπορεί εύκολα να μετατραπεί σε αναπαράσταση με ένα μη διατεταγμένο δέντρο. Ισχύει και το αντίστροφο.

Εάν σε ένα διατεταγμένο γράφο υπάρχουν κόμβοι που έχουν παραπάνω από έναν γονέα, αλλά υπάρχει ένα μοναδικό μονοπάτι (ασχέτως της κατεύθυνσης που έχουν τα βέλη) ανάμεσα σε οποιοδήποτε ζευγάρι κόμβων, τότε ο γράφος καλείται *παλυδέντρο*.

Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου που θα αναλύσουμε αργότερα είναι εφαρμόσιμος σε μη διατεταγμένα και διατεταγμένα δέντρα και σε παλυδέντρα. Μπορεί όμως να αποδοθεί σε απλότερη μορφή εάν πρώτα εισάγουμε μια νέα γραφική κατασκευή που λέγεται *γράφος παραγόντων*. Τόσο οι διατεταγμένοι όσο και οι μη διατεταγμένοι γράφοι δίνουν τη δυνατότητα σε μια συνάρτηση πολλών μεταβλητών να εκφραστεί ως γινόμενο παραγόντων πάνω σε υποσύνολα αυτών των μεταβλητών. Οι γράφοι παραγόντων κάνουν αυτή τη διάσπαση σαφέστερη εισάγοντας εκτός από τους κόμβους που αναπαριστούν τις μεταβλητές, επιπλέον κόμβους για τους



Σχήμα 2.9: Γράφος παραγόντων που αντιστοιχεί στην παραγοντοποίηση (2.18) .



Σχήμα 2.10: Η πιθανότητα $p(x_n)$ ισούται με το κανονικοποιημένο γινόμενο των $\mu_\alpha(x_n)$ και $\mu_\beta(x_n)$.

παράγοντες.

Ας γράψουμε την από κοινού πιθανότητα πάνω σε ένα σύνολο μεταβλητών ως γινόμενο παραγόντων

$$p(\mathbf{x}) = \prod_s f_s(\mathbf{x}_s) \quad (2.17)$$

όπου το \mathbf{x}_s είναι ένα υποσύνολο μεταβλητών. Κάθε παράγοντας f_s είναι μια συνάρτηση του συνόλου μεταβλητών \mathbf{x}_s .

Σε ένα γράφο παραγόντων υπάρχει ένας κόμβος (που απεικονίζεται συνήθως με κύκλο) για κάθε μεταβλητή στην κατανομή. Υπάρχουν επίσης επιπλέον κόμβοι (που απεικονίζονται με τετράγωνα) για κάθε παράγοντα $f_s(\mathbf{x}_s)$ στην από κοινού κατανομή. Τέλος υπάρχουν μη διατεταγμένοι σύνδεσμοι που συνδέουν κάθε κόμβο παραγόντων με όλους τους κόμβους μεταβλητών από τους οποίους εξαρτάται ο παράγοντας. Έστω π.χ. μια κατανομή που γράφεται με την παραγοντοποίηση

$$p(\mathbf{x}) = f_a(x_1, x_2) f_b(x_1, x_2) f_c(x_2, x_3) f_d(x_3). \quad (2.18)$$

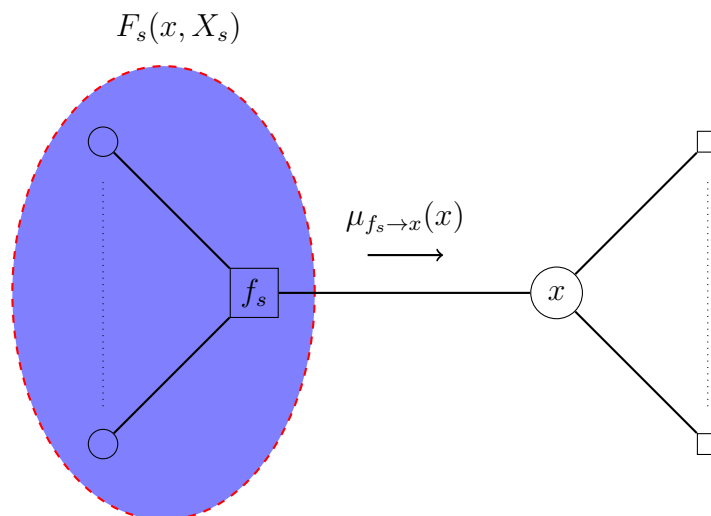
Αυτή μπορεί να αποδοθεί από τον γράφο του Σχήματος 2.9.

Εάν έχουμε μια κατανομή που έχει εκφραστεί μέσω ενός διατεταγμένου ή ενός μη διατεταγμένου γράφου, μπορούμε να τον μετατρέψουμε σε ένα γράφο παραγόντων. Η μετατροπή αυτή δεν είναι μοναδική. Εάν πάρουμε ένα διατεταγμένο ή μη διατεταγμένο δέντρο και το μετατρέψουμε σε γράφο παραγόντων, το αποτέλεσμα θα είναι πάλι δέντρο (δηλαδή στον γράφο παραγόντων δεν προκύπτουν κύκλοι, και για κάθε ζευγάρι κόμβων υπάρχει ένα και μόνο ένα μονοπάτι που τους συνδέει). Στην περίπτωση του διατεταγμένου πολυδέντρου, η μετατροπή σε μη διατεταγμένο γράφο επιφέρει κύκλους, ενώ η μετατροπή σε γράφο παραγόντων έχει ως αποτέλεσμα πάλι ένα δέντρο.

2.6 Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου

Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα τους γράφους παραγόντων ώστε να πάρουμε αλγορίθμους ακριβούς συμπερασματολογίας που είναι εφαρμόσιμοι σε γράφους-δέντρα. Πρώτα θα επικεντρωθούμε στο πρόβλημα του υπολογισμού τοπικών περιθωρίων πιθανοτήτων πάνω σε κόμβους ή υποσύνολα κόμβων, που θα μας οδηγήσει στον αλγόριθμο *αθροίσματος-γινομένου*. Έπειτα θα ασχοληθούμε με την τεχνική εύρεσης της πιο πιθανής κατάστασης που θα μας οδηγήσει στον αλγόριθμο *μεγίστου-αθροίσματος*.

Υποθέτουμε αρχικά ότι όλες οι μεταβλητές του μοντέλου είναι διακριτές και συνεπώς η εύρεση περιθωρίων πιθανοτήτων ανάγεται σε αθροίσματα. Το πλαίσιο παραμένει ίδιο όταν σε επόμενο κεφάλαιο συζητήσουμε για τα γραμμικά δυναμικά συστήματα, όπου αντί για αθροίσματα



Σχήμα 2.11: Τμήμα ενός γράφου παραγόντων που παρουσιάζει τον υπολογισμό της $p(x)$.

χρησιμοποιούμε ολοκληρώματα. Βασική επίσης είναι η υπόθεση ότι ο αρχικός γράφος είναι είτε μη διατεταγμένο δέντρο, είτε διατεταγμένο δέντρο, είτε πολυδέντρο. Είναι σημαντικό να μετατρέψουμε τον αυθεντικό γράφο σε γράφο παραγόντων (που θα έχει δομή δέντρου) ώστε να χρησιμοποιούμε το ίδιο πλαίσιο σε διατεταγμένους και μη διατεταγμένους γράφους.

Ας θεωρήσουμε για αρχή το πρόβλημα της εύρεσης της $p(x)$ για έναν κόμβο μιας μη παρατηρηθείσας μεταβλητής x . Εξ' ορισμού

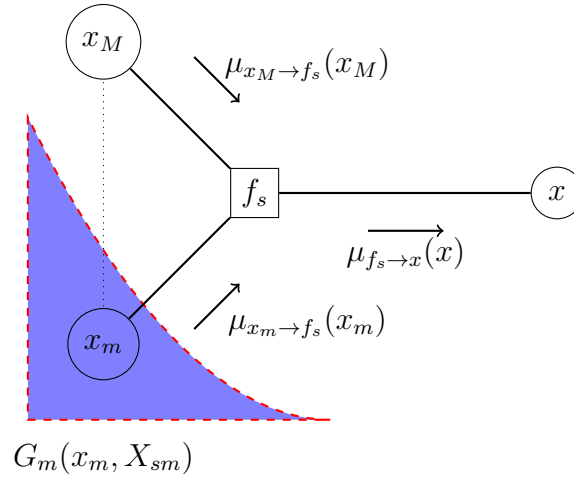
$$p(x) = \sum_{\mathbf{x} \setminus x} p(\mathbf{x}) \quad (2.19)$$

όπου το $\mathbf{x} \setminus x$ είναι το σύνολο όλων των μεταβλητών που ανήκουν στο \mathbf{x} εκτός της x . Η φιλοσοφία είναι να αντικαταστήσουμε το $p(\mathbf{x})$ με την ισοδύναμη έκφραση (2.17) και ύστερα να εναλλάξουμε αθροίσματα και γινόμενα. Βλέποντας το τμήμα γράφου που φαίνεται στο Σχήμα 2.11 παρατηρούμε ότι το σχήμα δέντρου του γράφου μας επιτρέπει να διαμερίσουμε τους παράγοντες της από κοινού πιθανότητας σε σύνολα, όπου κάθε σύνολο σχετίζεται με τους κόμβους παραγόντων που είναι γείτονες του κόμβου της μεταβλητής x . Βλέπουμε ότι η από κοινού πιθανότητα μπορεί να γραφτεί ως γινόμενο στη μορφή

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{s \in \text{ne}(x)} F_s(x, X_s) \quad (2.20)$$

όπου το $\text{ne}(x)$ είναι το σύνολο των κόμβων παραγόντων που είναι γείτονες του x , το X_s είναι το σύνολο όλων των μεταβλητών στο υποδέντρο που συνδέονται με τη μεταβλητή x μέσω του παράγοντα f_s και το $F_s(x, X_s)$ είναι το γινόμενο όλων των παραγόντων του συνόλου που σχετίζεται με τον παράγοντα f_s .

Αντικαθιστώντας την (2.20) στην (2.19) και εναλλάσσοντας αθροίσματα και γινόμενα, παίρ-



Σχήμα 2.12: Παρουσίαση της παραγοντοποίησης του υπογράφου που σχετίζεται με τον παράγοντα f_s .

νομε

$$\begin{aligned}
 p(x) &= \prod_{s \in \text{ne}(x)} \left[\sum_{X_s} F_s(x, X_s) \right] \\
 &= \prod_{s \in \text{ne}(x)} \mu_{f_s \rightarrow x}(x). \tag{2.21}
 \end{aligned}$$

Εδώ έχουμε εισάγει ένα σύνολο συναρτήσεων $\mu_{f_s \rightarrow x}(x)$ που ορίζονται από

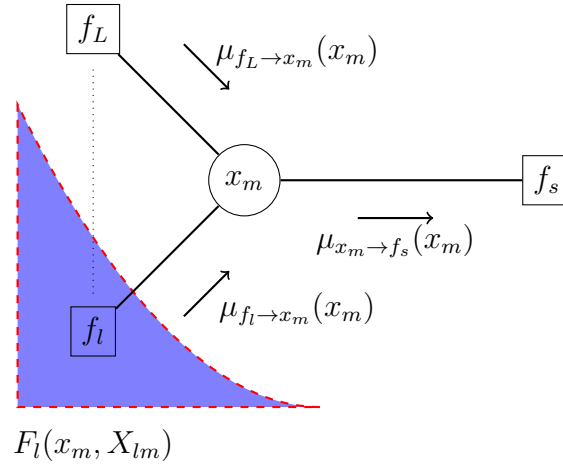
$$\mu_{f_s \rightarrow x}(x) \equiv \sum_{X_s} F_s(x, X_s) \tag{2.22}$$

και που μπορούν να θεωρηθούν σαν μηνύματα από τους κόμβους παραγόντων f_s προς τον κόμβο της μεταβλητής x . Βλέπουμε ότι το $p(x)$ δίνεται από το γινόμενο όλων των εισερχομένων μηνυμάτων που φθάνουν στον κόμβο x .

Για να υπολογίσουμε αυτά τα μηνύματα, επιστρέφουμε στο Σχήμα 2.11 και παρατηρούμε ότι κάθε παράγοντας $F_s(x, X_s)$ περιγράφεται από έναν υπογράφο παραγόντων και μπορεί να παραγοντοποιηθεί. Συγκεκριμένα μπορούμε να γράψουμε

$$F_s(x, X_s) = f_s(x, x_1, \dots, x_M) G_1(x_1, X_{s1}), \dots, G_M(x_M, X_{sM}) \tag{2.23}$$

όπου οι μεταβλητές x_1, \dots, x_M είναι οι μεταβλητές που μαζί με τη x σχετίζονται με τον παράγοντα f_s . Η παραγοντοποίηση αυτή φαίνεται στο Σχήμα 2.12. Εναλλακτικά, το σύνολο $\{x, x_1, \dots, x_M\}$ επειδή είναι το σύνολο των μεταβλητών που εξαρτώνται από τον f_s , μπορούμε να το συμβολίζουμε με \mathbf{x}_s για να χρησιμοποιηθεί στον τύπο (2.17).



Σχήμα 2.13: Παρουσίαση του υπολογισμού του μηνύματος που στέλνεται από μια μεταβλητή σε έναν γειτονικό παράγοντα.

Αντικαθιστώντας την (2.23) στην (2.22) παίρνουμε

$$\begin{aligned}
 \mu_{f_s \rightarrow x}(x) &= \sum_{x_1} \dots \sum_{x_M} f_s(x, x_1, \dots, x_M) \prod_{m \in \text{ne}(f_s) \setminus x} \left[\sum_{X_{sm}} G_m(x_m, X_{sm}) \right] \\
 &= \sum_{x_1} \dots \sum_{x_M} f_s(x, x_1, \dots, x_M) \prod_{m \in \text{ne}(f_s) \setminus x} \mu_{x_m \rightarrow f_s}(x_m) \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

όπου το $\text{ne}(f_s)$ είναι το σύνολο των κόμβων μεταβλητών που είναι γείτονες του κόμβου f_s και το $\text{ne}(f_s) \setminus x$ είναι το ίδιο σύνολο χωρίς όμως τον κόμβο x . Επίσης έχουμε ορίσει τα ακόλουθα μηνύματα από μεταβλητές σε κόμβους

$$\mu_{x_m \rightarrow f_s}(x_m) \equiv \sum_{X_{sm}} G_m(x_m, X_{sm}) . \quad (2.25)$$

Έχουμε λοιπόν ορίσει δύο τύπους μηνυμάτων, το $\mu_{f \rightarrow x}(x)$ και το $\mu_{x \rightarrow f}(x)$. Βλέπουμε ότι τα μηνύματα αυτά είναι πάντα συνάρτηση της μεταβλητής της οποίας ο κόμβος συνδέει ο σύνδεσμος.

Το αποτέλεσμα (2.24) μας λέει ότι για να υπολογίσουμε το μήνυμα που στέλνει ένας παράγοντας σε μια μεταβλητή διαμέσω του συνδέσμου μεταξύ τους, παίρνουμε το γινόμενο των εισερχομένων μηνυμάτων πάνω σε όλους τους άλλους συνδέσμους που φτάνουν στον κόμβο του παράγοντα, πολλαπλασιάζουμε επί τον παράγοντα και ύστερα αθροίζουμε πάνω σε όλες τις μεταβλητές από τις οποίες προέρχονται τα εισερχόμενα μηνύματα. Αυτό παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.12. Αξίζει να σημειωθεί ότι ένας κόμβος παράγοντα μπορεί να στείλει ένα μήνυμα σε έναν κόμβο μεταβλητής αφού έχει προσλάβει τα εισερχόμενα μηνύματα από όλους τους άλλους γειτονικούς κόμβους μεταβλητών.

Τέλος θα βρούμε μια έκφραση για τον υπολογισμό των μηνυμάτων από μεταβλητή σε παράγοντα χρησιμοποιώντας πάλι παραγοντοποίηση βάσει ενός υπογράφου. Από το Σχήμα 2.13 βλέπουμε ότι ο όρος $G_m(x_m, X_{sm})$ που σχετίζεται με τον κόμβο x_m ισούται με το γινόμενο των

όρων $F_l(x_m, X_{lm})$, που ο καθένας τους σχετίζεται με έναν από τους παράγοντες f_l που είναι συνδεδεμένος με τον κόμβο x_m (εξαιρουμένου του κόμβου f_s). Έχουμε λοιπόν

$$G_m(x_m, X_{sm}) = \prod_{l \in \text{ne}(x_m) \setminus f_s} F_l(x_m, X_{lm}). \quad (2.26)$$

Αντικαθιστώντας την (2.26) στην (2.25) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \mu_{x_m \rightarrow f_s}(x_m) &= \prod_{l \in \text{ne}(x_m) \setminus f_s} \left[\sum_{X_{lm}} F_l(x_m, X_{lm}) \right] \\ &= \prod_{l \in \text{ne}(x_m) \setminus f_s} \mu_{f_l \rightarrow x_m}(x_m) \end{aligned} \quad (2.27)$$

όπου έχουμε κάνει χρήση του ορισμού (2.22) για τα μηνύματα από παράγοντα σε μεταβλητή. Άρα για να υπολογίσουμε το μήνυμα που στέλνει μια μεταβλητή σε ένα γειτονικό παράγοντα, παίρνουμε απλά το γινόμενο των εισερχομένων μηνυμάτων από όλους τους άλλους συνδέσμους. Κάθε κόμβος μεταβλητής που έχει μόνο δύο γείτονες δεν χρήζει υπολογισμού και απλώς περνούν μηνύματα αναλλοίωτα μέσα από αυτόν. Παρατηρούμε επίσης ότι ένας κόμβος μεταβλητής μπορεί να στείλει ένα μήνυμα σε έναν κόμβο παράγοντα αφού πρώτα έχει προσλάβει τα εισερχόμενα μηνύματα από όλους τους άλλους γειτονικούς κόμβους παραγόντων.

Η περιθώρια πιθανότητα του κόμβου x ισούται με το γινόμενο των εισερχομένων μηνυμάτων από όλους τους συνδέσμους που φτάνουν στον κόμβο. Τα μηνύματα αυτά μπορούν να υπολογιστούν αναδρομικά συναρτήσσει άλλων μηνυμάτων. Για να ξεκινήσουμε αυτή την αναδρομή, μπορούμε να δούμε τον κόμβο x σαν την ρίζα του δέντρου και να ξεκινήσουμε από τους κόμβους-φύλλα. Από τον ορισμό (2.27) βλέπουμε ότι εάν ένας κόμβος-φύλλο είναι κόμβος μεταβλητής τότε το μήνυμα που στέλνει μέσα από τον μοναδικό σύνδεσμό του δίνεται από

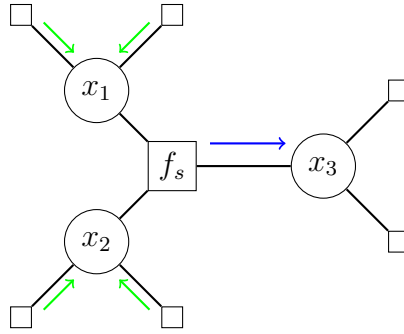
$$\mu_{x \rightarrow f}(x) = 1 \quad (2.28)$$

ενώ εάν ο κόμβος-φύλλο είναι κόμβος παράγοντα, βλέπουμε από τη σχέση (2.24) ότι το μήνυμα που στέλνεται ισούται με

$$\mu_{f \rightarrow x}(x) = f(x). \quad (2.29)$$

Συνοψίζοντας, για τον υπολογισμό της $p(x)$ ξεκινάμε βλέποντας τον κόμβο x σαν τη ρίζα του γράφου παραγόντων και εντάσσοντας μηνύματα στα φύλλα του γράφου χρησιμοποιώντας τις (2.28) και (2.29). Τα μηνύματα διαβιβάζονται αναδρομικά σύμφωνα με τους τύπους (2.24) και (2.27) μέχρις ότου όλα τα μηνύματα να έχουν διαδοθεί σε όλους τους συνδέσμους και η ρίζα να έχει προσλάβει μηνύματα από όλους τους γείτονές της. Κάθε κόμβος μπορεί να στείλει ένα μήνυμα προς τη ρίζα αφού έχει προσλάβει μηνύματα από όλους τους άλλους γείτονές του. Μόλις η ρίζα λάβει μηνύματα από όλους τους γείτονές της, η ζητούμενη πιθανότητα υπολογίζεται από την (2.21).

Εάν θελήσουμε να υπολογίσουμε την περιθώρια πιθανότητα κάθε κόμβου μεταβλητής, αντί να τρέχουμε τον παραπάνω αλγόριθμο ξεχωριστά, μπορούμε να εργαστούμε ως εξής. Επιλέγουμε αυθαίρετα οποιονδήποτε κόμβο (μεταβλητής ή παράγοντα) και τον θεωρούμε ως ρίζα. Στέλνουμε μηνύματα από τα φύλλα στη ρίζα όπως προηγουμένως. Σ' αυτό το σημείο η ρίζα έχει λάβει



Σχήμα 2.14: Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινόμενου μπορεί να παρουσιαστεί αποκλειστικά σε σχέση με μηνύματα που στέλνονται από κόμβους παραγόντων. Το εξερχόμενο μήνυμα που φαίνεται με το μπλε βέλος ισούται με το γινόμενο των εισερχομένων μηνυμάτων που φαίνονται με το πράσινο βέλος επί τον παράγοντα f_s και αθροίζοντας πάνω στις μεταβλητές x_1 και x_2 .

μηνύματα από όλους τους γείτονές της. Επομένως μπορεί να στείλει μηνύματα σε όλους τους γείτονές της. Αυτοί με τη σειρά τους θα έχουν λάβει μηνύματα από όλους τους γείτονές τους και έτσι μπορούν να στείλουν μηνύματα στους συνδέσμους που απομακρύνονται από τη ρίζα, και έτσι τα μηνύματα περνούν από τη ρίζα προς τα φύλλα. Μέχρι τώρα ένα μήνυμα θα έχει περάσει και στις δυο κατευθύνσεις διαμέσου όλων των συνδέσμων, και κάθε κόμβος θα έχει λάβει μήνυμα από όλους τους γείτονές του. Επειδή κάθε κόμβος μεταβλητής έχει λάβει μηνύματα από όλους τους γείτονές του, μπορούμε να υπολογίσουμε την περιθώρια πιθανότητα κάθε μεταβλητής του γράφου. Ο αριθμός των μηνυμάτων που πρέπει να υπολογιστούν ισούται με το διπλάσιο του πλήθους των συνδέσμων του γράφου, ισούται δηλαδή μόλις με το διπλάσιο των υπολογισμών που χρειάζονται για την εύρεση μιας περιθώριας πιθανότητας. Να σημειωθεί ότι ο αλγόριθμος είναι ανεξάρτητος από το ποιος κόμβος επιλέχθηκε ως ρίζα.

Έστω τώρα ότι θέλουμε να υπολογίσουμε την περιθώρια πιθανότητα $p(\mathbf{x}_s)$ που είναι το σύνολο των μεταβλητών που σχετίζονται με έναν παράγοντα. Αποδεικνύεται ότι η ποσότητα αυτή ισούται με το γινόμενο των μηνυμάτων που φτάνουν σε αυτόν τον κόμβο παράγοντα επί τον παράγοντα στον κόμβο, δηλαδή

$$p(\mathbf{x}_s) = f_s(\mathbf{x}_s) \prod_{i \in \text{ne}(f_s)} \mu_{x_i \rightarrow f_s}(x_i) \quad (2.30)$$

σε πλήρη αντιστοιχία με τις περιθώριες πιθανότητες των κόμβων μεταβλητών.

Το μήνυμα που στέλνεται από έναν κόμβο μεταβλητής σε έναν κόμβο παράγοντα είναι απλά το γινόμενο των εισερχομένων μηνυμάτων από τους υπόλοιπους συνδέσμους. Εναλλακτικά μπορούμε να δούμε τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινόμενου αποκλείοντας μηνύματα από μεταβλητές σε παράγοντες και λαμβάνοντας υπ' όψιν μόνο αυτά που στέλνονται από κόμβους παραγόντων. Είναι πιο εύκολα αντιληπτό αν δούμε το παράδειγμα του Σχήματος 2.14.

Μέχρι στιγμής έχουμε παραβλέψει το θέμα της κανονικοποίησης. Αν ο γράφος παραγόντων προέκυψε από έναν διατεταγμένο γράφο, τότε η από κοινού κατανομή είναι ήδη κανονικοποιημένη, και επομένως όλες οι περιθώριες κατανομές που υπολογίστηκαν από τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινόμενου είναι επίσης ορθά κανονικοποιημένες. Αν όμως ξεκινήσαμε από ένα μη διατεταγμένο γράφο, τότε γενικά υπάρχει μια άγνωστη σταθερά κανονικοποίησης $1/Z$. Μπο-

ρούμε εδώ να δουλέψουμε με μια μη κανονικοποιημένη εκδοχή $\tilde{p}(\mathbf{x})$ της από κοινού κατανομής, όπου $p(\mathbf{x}) = \tilde{p}(\mathbf{x})/Z$. Αρχικά τρέχουμε τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινομένου για να βρούμε τις μη κανονικοποιημένες ποσότητες $\tilde{p}(x_i)$. Στη συνέχεια, η σταθερά $1/Z$ υπολογίζεται κανονικοποιώντας οποιαδήποτε από τις περιθώριες ποσότητες $\tilde{p}(x_i)$. Αυτό μας λύνει τα χέρια, γιατί αντί να κάνουμε κανονικοποίηση πάνω στην περιθώρια “πιθανότητα” πολλών μεταβλητών $p(\mathbf{x})$, μπορούμε να κανονικοποιήσουμε πάνω σε μία μόνο μεταβλητή, κάτι που είναι πολύ αποδοτικό υπολογιστικά.

Ας δώσουμε τώρα ένα παράδειγμα για να δούμε πως λειτουργεί ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου. Το Σχήμα 2.15 δείχνει ένα γράφο παραγόντων που έχει μη κανονικοποιημένη από κοινού κατανομή που δίνεται από

$$\tilde{p}(\mathbf{x}) = f_a(x_1, x_2)f_b(x_2, x_3)f_c(x_2, x_4) . \quad (2.31)$$

Για να εφαρμόσουμε τον αλγόριθμο στον γράφο, ας θεωρήσουμε τον κόμβο x_3 ως τη ρίζα και ως φύλλα τους κόμβους x_1 και x_4 . Ξεκινώντας από τους κόμβους-φύλλα έχουμε τα εξής έξι μηνύματα

$$\mu_{x_1 \rightarrow f_a}(x_1) = 1 \quad (2.32)$$

$$\mu_{f_a \rightarrow x_2}(x_2) = \sum_{x_1} f_a(x_1, x_2) \quad (2.33)$$

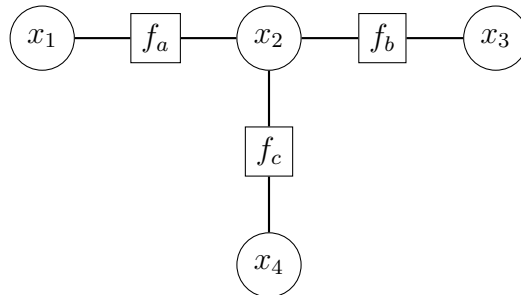
$$\mu_{x_4 \rightarrow f_c}(x_4) = 1 \quad (2.34)$$

$$\mu_{f_c \rightarrow x_2}(x_2) = \sum_{x_4} f_c(x_2, x_4) \quad (2.35)$$

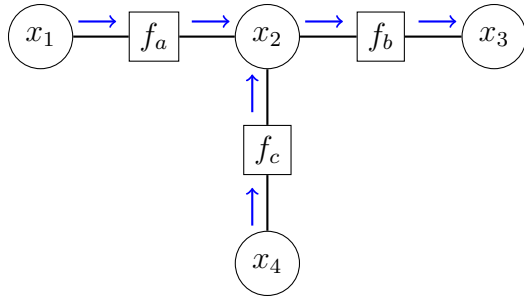
$$\mu_{x_2 \rightarrow f_b}(x_2) = \mu_{f_a \rightarrow x_2}(x_2)\mu_{f_c \rightarrow x_2}(x_2) \quad (2.36)$$

$$\mu_{f_b \rightarrow x_3}(x_3) = \sum_{x_2} f_b(x_2, x_3)\mu_{x_2 \rightarrow f_b}(x_2) . \quad (2.37)$$

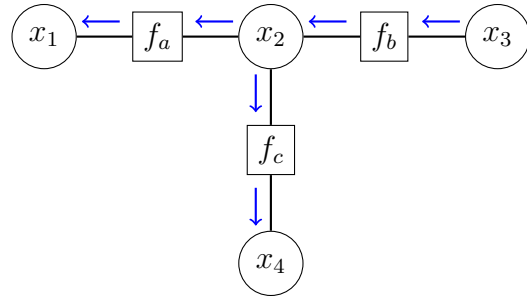
Η κατεύθυνση της ροής των μηνυμάτων φαίνεται στο Σχήμα 2.16. Όταν ολοκληρωθεί η μετάδοση αυτών των μηνυμάτων, μπορούμε να στείλουμε μηνύματα από τη ρίζα στα φύλλα τα οποία δίνονται από



Σχήμα 2.15: Γράφος παραγόντων για κατανόηση του αλγορίθμου αθροίσματος-γινομένου.



Σχήμα 2.16: Μηνύματα από τους κόμβους-φύλλα προς τον κόμβο-ρίζα.



Σχήμα 2.17: Μηνύματα από τον κόμβο-ρίζα προς τους κόμβους-φύλλα.

$$\mu_{x_3 \rightarrow f_b}(x_3) = 1 \quad (2.38)$$

$$\mu_{f_b \rightarrow x_2}(x_2) = \sum_{x_3} f_b(x_2, x_3) \quad (2.39)$$

$$\mu_{x_2 \rightarrow f_a}(x_2) = \mu_{f_b \rightarrow x_2}(x_2) \mu_{f_c \rightarrow x_2}(x_2) \quad (2.40)$$

$$\mu_{f_a \rightarrow x_1}(x_1) = \sum_{x_2} f_a(x_1, x_2) \mu_{x_2 \rightarrow f_a}(x_2) \quad (2.41)$$

$$\mu_{x_2 \rightarrow f_c}(x_2) = \mu_{f_a \rightarrow x_2}(x_2) \mu_{f_b \rightarrow x_2}(x_2) \quad (2.42)$$

$$\mu_{f_c \rightarrow x_4}(x_4) = \sum_{x_2} f_c(x_2, x_4) \mu_{x_2 \rightarrow f_c}(x_2) . \quad (2.43)$$

Πλέον ένα μήνυμα έχει περάσει σε κάθε κατεύθυνση σε κάθε σύνδεσμο και πλέον μπορούμε να υπολογίσουμε τις περιθώριες πιθανότητες. Ας κάνουμε μια επαλήθευση για το $p(x_2)$. Χρησιμοποιώντας την (2.21) και αντικαθιστώντας στα μηνύματα τους παραπάνω τύπους έχουμε

$$\begin{aligned} \tilde{p}(x_2) &= \mu_{f_a \rightarrow x_2}(x_2) \mu_{f_b \rightarrow x_2}(x_2) \mu_{f_c \rightarrow x_2}(x_2) \\ &= \left[\sum_{x_1} f_a(x_1, x_2) \right] \left[\sum_{x_3} f_b(x_2, x_3) \right] \left[\sum_{x_4} f_c(x_2, x_4) \right] \\ &= \sum_{x_1} \sum_{x_3} \sum_{x_4} f_a(x_1, x_2) f_b(x_2, x_3) f_c(x_2, x_4) \\ &= \sum_{x_1} \sum_{x_3} \sum_{x_4} \tilde{p}(x) \end{aligned} \quad (2.44)$$

όπως έπρεπε.

Τα προηγούμενα αποτελέσματά μας έχουν προκύψει υποθέτοντας ότι οι μεταβλητές είναι διακριτές. Παρόλα αυτά η διακριτότητα των μεταβλητών δεν παίζει ρόλο ούτε στη γραφική αναπαράσταση ούτε στην πιθανοθεωρητική κατασκευή του αλγορίθμου αθροίσματος-γινομένου. Για τις συνεχείς μεταβλητές τα αθροίσματα απλώς αντικαθίστανται από ολοκληρώματα, όπως θα δούμε αργότερα στα γραμμικά δυναμικά συστήματα.

	$x = 0$	$x = 1$
$y = 0$	0.3	0.4
$y = 1$	0.3	0.0

Πίνακας 2.1: Παράδειγμα από κοινού κατανομής δυο μεταβλητών.

2.7 Ο αλγόριθμος μεγίστου-αθροίσματος

Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου μας επιτρέπει να παίρνουμε την από κοινού πιθανότητα $p(\mathbf{x})$ εκφρασμένη ως γράφο παραγόντων και να βρίσκουμε περιθώριες πιθανότητες ενός υποσυνόλου των μεταβλητών. Δυο ακόμη βασικοί στόχοι μας θα είναι να βρούμε μια σύνθεση των μεταβλητών που έχει τη μεγαλύτερη πιθανότητα και να βρούμε την τιμή της πιθανότητας αυτής. Μπορούμε να τα πετύχουμε αυτά μέσω ενός πολύ συγγενικού αλγορίθμου που λέγεται *μεγίστου-αθροίσματος* που μπορεί να θεωρηθεί εφαρμογή του δυναμικού προγραμματισμού στα γραφικά μοντέλα.

Μια απλή προσέγγιση για να βρίσκουμε τιμές κρυμμένων μεταβλητών με υψηλή πιθανότητα θα ήταν να τρέξουμε τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινομένου για να βρούμε τα $p(x_i)$ για κάθε μεταβλητή, και ύστερα για κάθε περιθώρια πιθανότητα, να βρούμε την τιμή x_i^* που την μεγιστοποιεί. Αυτό όμως θα μας έδινε το σύνολο των τιμών που είναι ξεχωριστά οι πιο πιθανές. Εμείς όμως ζητάμε να βρούμε το σύνολο των τιμών που έχουν από κοινού τη μεγαλύτερη πιθανότητα, με άλλα λόγια το διάνυσμα \mathbf{x}^{\max} που μεγιστοποιεί την από κοινού πιθανότητα, δηλαδή

$$\mathbf{x}^{\max} = \arg \max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) \quad (2.45)$$

και για το οποίο η τιμή της πιθανότητας είναι ίση με

$$p(\mathbf{x}^{\max}) = \max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) . \quad (2.46)$$

Γενικά το \mathbf{x}^{\max} δεν είναι το ίδιο σύνολο με το σύνολο των x_i^* όπως μπορούμε να δείξουμε με ένα απλό παράδειγμα. Έστω η από κοινού κατανομή $p(x, y)$ $x, y \in \{0, 1\}$ που δίνεται στον Πίνακα 2.1. Αυτή μεγιστοποιείται θέτοντας $x = 1$ και $y = 0$. Όμως $p(x = 0) = 0.6$, $p(x = 1) = 0.4$ και $p(y = 0) = 0.7$, $p(y = 1) = 0.3$ και συνεπώς οι περιθώριες πιθανότητες μεγιστοποιούνται για $x = 0$ και $y = 0$ (που όμως έχουν από κοινού πιθανότητα ίση με 0.3). Επίσης δεν είναι δύσκολο να κατασκευάσουμε παραδείγματα στα οποία το σύνολο των ξεχωριστά πιο πιθανών τιμών έχει μηδενική πιθανότητα στην από κοινού κατανομή.

Ψάχνουμε λοιπόν έναν αλγόριθμο που βρίσκει την τιμή του \mathbf{x} που μεγιστοποιεί την $p(\mathbf{x})$ και ταυτόχρονα βρίσκει αυτή τη μέγιστη τιμή της $p(\mathbf{x})$. Για το δεύτερο πρόβλημα γράφουμε

$$\max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) = \max_{x_1} \dots \max_{x_M} p(\mathbf{x}) \quad (2.47)$$

όπου M είναι ο συνολικός αριθμός μεταβλητών και ύστερα αντικαθιστούμε την $p(\mathbf{x})$ με την έκφρασή της ως γινόμενο παραγόντων. Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε την εξής ιδιότητα του μεγίστου

$$\max(ab, ac) = a \max(b, c) \quad (2.48)$$

που ισχύει αν $a \geq 0$ (όντως οι παράγοντες σε ένα γραφικό μοντέλο είναι πάντα μη αρνητικοί). Αυτό μας επιτρέπει να εναλλάσσουμε γινόμενα με μεγιστοποιήσεις.

Στους γράφους παραγόντων με σχήμα δέντρου, λοιπόν, αντικαθιστούμε την (2.17) στην (2.47) και εναλλάσσουμε μεγιστοποιήσεις με γινόμενα. Η κατασκευή των υπολογισμών είναι ίδια με αυτή του αλγορίθμου αθροίσματος-γινόμενου και συνεπώς μπορούμε να ερμηνεύσουμε εκείνα τα αποτελέσματα στην παρούσα παράγραφο. Έστω ότι σχεδιάζουμε έναν συγκεκριμένο κόμβο μεταβλητής σαν την ρίζα του γράφου. Τότε ξεκινάμε να στέλνουμε ένα σύνολο μηνυμάτων από τα φύλλα προς τη ρίζα, με κάθε κόμβο να στέλνει τα μηνύματά του προς τη ρίζα μόλις έχει λάβει όλα τα εισερχόμενα μηνύματα από τους άλλους γείτονές του. Η τελική μεγιστοποίηση γίνεται πάνω στο γινόμενο όλων των μηνυμάτων που φτάνουν στη ρίζα, και δίνει τη μέγιστη τιμή της $p(\mathbf{x})$. Συνεπώς ο αλγόριθμος αυτός θα μπορούσε να λέγεται *μεγίστου-γινόμενου* και είναι ταυτόσημος με τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινόμενου με τη διαφορά ότι τα αθροίσματα αντικαθίστανται από μεγιστοποιήσεις. Να σημειωθεί ότι σε αυτή τη φάση, μηνύματα έχουν σταλεί από τα φύλλα στη ρίζα, αλλά όχι προς την αντίθετη κατεύθυνση.

Στην πράξη όμως, το γινόμενο πολλών μικρών πιθανοτήτων οδηγεί σε μικρούς αριθμούς που αριθμητικά δεν είναι διαχειρίσιμοι, και έτσι είναι βολικότερο να δουλεύουμε με το λογάριθμο της από κοινού πιθανότητας. Ο λογάριθμος είναι αύξουσα συνάρτηση, δηλαδή αν $a > b$ τότε $\ln a > \ln b$ και συνεπώς το μέγιστο και η λογαριθμική συνάρτηση μπορούν να εναλλαχθούν, οπότε

$$\ln \left(\max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) \right) = \max_{\mathbf{x}} \ln p(\mathbf{x}) . \quad (2.49)$$

Η επιμεριστική ιδιότητα ισχύει επειδή

$$\max(a + b, a + c) = a + \max(b, c) . \quad (2.50)$$

Άρα παίρνοντας το λογάριθμο, το αποτέλεσμα είναι τα γινόμενα στον αλγόριθμο μεγίστου-γινόμενου να αντικαθίστανται από αθροίσματα, και έτσι παίρνουμε τον αλγόριθμο *μεγίστου-αθροίσματος*. Από τα αποτελέσματα (2.24) και (2.27) του αλγορίθμου αθροίσματος-γινόμενου, μπορούμε άμεσα να γράψουμε τον αλγόριθμο μεγίστου-αθροίσματος με παρόμοιο τρόπο όπως η διάδοση μηνυμάτων, αντικαθιστώντας τα αθροίσματα με μεγιστοποιήσεις και τα γινόμενα με αθροίσματα λογαρίθμων. Επομένως έχουμε

$$\mu_{f \rightarrow x}(x) = \max_{x_1, \dots, x_M} \left[\ln f(x, x_1, \dots, x_M) + \sum_{m \in \text{ne}(f) \setminus x} \mu_{x_m \rightarrow f}(x_m) \right] \quad (2.51)$$

$$\mu_{x \rightarrow f}(x) = \sum_{l \in \text{ne}(x) \setminus f} \mu_{f_l \rightarrow x}(x) \quad (2.52)$$

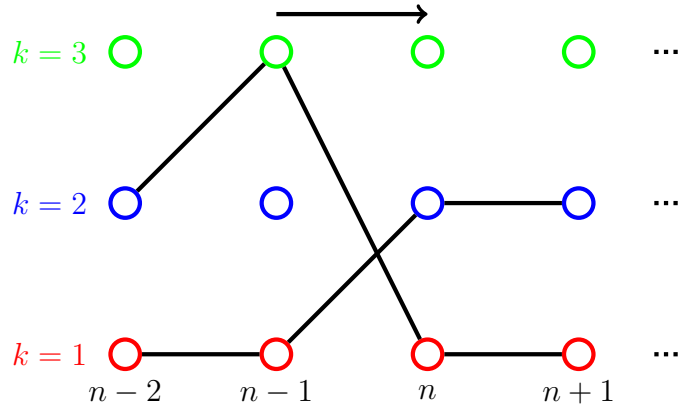
Τα αρχικά μηνύματα που στέλνονται από τα φύλλα προκύπτουν ανάλογα με τις (2.28) και (2.29) και δίνονται από

$$\mu_{x \rightarrow f}(x) = 0 \quad (2.53)$$

$$\mu_{f \rightarrow x}(x) = \ln f(x) \quad (2.54)$$

ενώ στη ρίζα η μέγιστη πιθανότητα μπορεί να υπολογιστεί αναλόγως με την (2.21), ως εξής

$$p^{\max} = \max_x \left[\sum_{s \in \text{ne}(x)} \mu_{f_s \rightarrow x}(x) \right] . \quad (2.55)$$



Σχήμα 2.18: Διάγραμμα που δείχνει τις $K = 3$ τιμές των μεταβλητών x_n στο μοντέλο της αλυσίδας. Το βέλος δείχνει την κατεύθυνση των μηνυμάτων στον αλγόριθμο μεγίστου-γινομένου. Για κάθε τιμή k κάθε μεταβλητής x_n , η συνάρτηση $\phi(x_n)$ ορίζει μια μοναδική τιμή για την προηγούμενη μεταβλητή, που υποδεικνύεται από τις μαύρες γραμμές. Τα δυο μονοπάτια ορίζουν διανύσματα που δίνουν το ολικό μέγιστο της από κοινού πιθανότητας και μπορούν να βρεθούν ιχνηλατώντας στις μαύρες γραμμές με την αντίθετη κατεύθυνση από αυτή του βέλους.

Έχουμε δει μέχρι τώρα πώς να βρίσκουμε το μέγιστο της από κοινού κατανομής στέλνοντας μηνύματα από τα φύλλα στη ρίζα. Το αποτέλεσμα θα είναι το ίδιο ανεξάρτητα από το ποιος κόμβος επιλέχθηκε ως ρίζα. Θα πρέπει στη συνέχεια να βρούμε το πώς διαμορφώνονται οι τιμές των μεταβλητών ώστε η από κοινού κατανομή να μεγιστοποιηθεί. Η διαδικασία του υπολογισμού της (2.55) θα μας δώσει την τιμή x^{\max} , δηλαδή της πιο πιθανής τιμής της ρίζας-μεταβλητής που ορίζεται από

$$x^{\max} = \arg \max_x \left[\sum_{s \in \text{ne}(x)} \mu_{f_s \rightarrow x}(x) \right]. \quad (2.56)$$

Εδώ ίσως να σκεφτόμασταν να συνεχίσουμε τον αλγόριθμο μετάδοσης μηνυμάτων και να στείλουμε μηνύματα από τη ρίζα πίσω στα φύλλα, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (2.51) και (2.52) και εφαρμόζοντας την (2.56) σε όλους τους εναπομείναντες κόμβους μεταβλητών. Επειδή όμως τώρα μεγιστοποιούμε, είναι δυνατόν να υπάρχουν πολλοί συνδυασμοί του \mathbf{x} που όλοι τους να δίνουν τη μέγιστη τιμή της $p(\mathbf{x})$. Σε αυτές τις περιπτώσεις αυτή η στρατηγική μπορεί να αποτύχει, γιατί είναι δυνατόν οι τιμές των μεταβλητών που προέκυψαν από μεγιστοποίηση του γινομένου των μηνυμάτων σε κάθε κόμβο να ανήκουν σε διαφορετικά διανύσματα μεγίστων, και τελικά να διαμορφωθεί ένα διάνυσμα που πλέον δεν αντιστοιχεί σε μέγιστο.

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να λυθεί εφαρμόζοντας ένα διαφορετικό τρόπο μετάδοσης μηνυμάτων από τη ρίζα στα φύλλα. Για να δούμε πώς δουλεύει αυτός, ας θεωρήσουμε το απλό παράδειγμα της αλυσίδας N μεταβλητών που η καθεμία έχει K καταστάσεις, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.10. Παίρνουμε τον κόμβο x_N ως τη ρίζα. Στην πρώτη φάση στέλνουμε μηνύματα από το φύλλο x_1 προς τη ρίζα σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\mu_{x_n \rightarrow f_{n,n+1}}(x_n) = \mu_{f_{n-1,n} \rightarrow x_n}(x_n) \quad (2.57)$$

$$\mu_{f_{n-1,n} \rightarrow x_n}(x_n) = \max_{x_{n-1}} \{ \ln f_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n) + \mu_{x_{n-1} \rightarrow f_{n-1,n}}(x_{n-1}) \} \quad (2.58)$$

οι οποίες προκύπτουν εφαρμόζοντας αντίστοιχα τις (2.52) και (2.51) στο συγκεκριμένο γράφο. Το αρχικό μήνυμα που στέλνεται από το φύλλο είναι

$$\mu_{x_1 \rightarrow f_{1,2}}(x_1) = 0 . \quad (2.59)$$

Η πιο πιθανή τιμή της x_N δίνεται από

$$x_N^{\max} = \arg \max_{x_N} [\mu_{f_{N-1,N} \rightarrow x_N}(x_N)] . \quad (2.60)$$

Τώρα πρέπει να καθορίσουμε την τιμή των προηγούμενων μεταβλητών που αντιστοιχούν στο ίδιο διάνυσμα μεγιστοποίησης. Αυτό μπορεί να γίνει παρακολουθώντας ποιες τιμές των μεταβλητών δημιουργούν την μέγιστη τιμή κάθε μεταβλητής, δηλαδή τις τιμές

$$\phi(x_n) = \arg \max_{x_{n-1}} [\ln f_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n) + \mu_{x_{n-1} \rightarrow f_{n-1,n}}(x_{n-1})] . \quad (2.61)$$

Για καλύτερη κατανόηση, αναπαριστούμε την αλυσίδα των μεταβλητών σε ένα διάγραμμα όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.18. Δεν πρόκειται για γραφικό μοντέλο πιθανοτήτων επειδή οι κόμβοι συμβολίζουν τιμές μεταβλητών, ενώ κάθε μεταβλητή αντιστοιχεί σε μια στήλη στο διάγραμμα. Για κάθε τιμή μιας δοθείσης μεταβλητής, υπάρχει μια μοναδική τιμή της προηγούμενης μεταβλητής που μεγιστοποιεί την πιθανότητα (εάν υπάρχουν τιμές που δίνουν την ίδια πιθανότητα, επιλέγουμε τη μία από αυτές είτε τυχαία, είτε συστηματικά) που αντιστοιχεί στη συνάρτηση $\phi(x_n)$ που δίνεται από την (2.61), και φαίνεται γραφικά από τις γραμμές που συνδέουν τους κόμβους. Μόλις μάθουμε την πιθανότερη τιμή του τελικού κόμβου x_N , μπορούμε απλά να ακολουθήσουμε το σύνδεσμο προς τα πίσω για να βρούμε την πιο πιθανή τιμή της x_{N-1} κ.ο.κ., μέχρι να φτάσουμε στον αρχικό κόμβο x_1 . Ισοδύναμα, στέλνουμε μηνύματα στην αλυσίδα προς τα πίσω, χρησιμοποιώντας

$$x_{n-1}^{\max} = \phi(x_n^{\max}) \quad (2.62)$$

και η διαδικασία αυτή λέγεται *οπισθοδρομική ιχνηλασία*. Παρατηρήστε ότι θα μπορούσαν να υπάρχουν αρκετές τιμές της x_{n-1} που δίνουν τη μέγιστη τιμή στην (2.61). Εάν διαλέξουμε μία από αυτές τις τιμές όταν κάνουμε οπισθοδρομική ιχνηλασία, τότε είμαστε σίγουροι ότι έχουμε πάρει το ολικό μέγιστο.

Στο Σχήμα 2.18 υπάρχουν δύο μονοπάτια, καθένα από τα οποία υποθέτουμε ότι επιφέρει ολικό μέγιστο στην από κοινού πιθανότητα. Εάν $k = 1$ και $k = 2$ είναι δυνατές τιμές της x_N^{\max} , τότε ξεκινώντας από οποιαδήποτε κατάσταση και ιχνηλατώντας προς τα πίσω στις μαύρες γραμμές, εφαρμόζοντας δηλαδή τη σχέση (2.62), παίρνουμε μια διαδικασία εύρεσης ολικού μεγίστου. Παρατηρήστε ότι εάν είχαμε τρέξει προς τα εμπρός τον αλγόριθμο μεγίστου-αθροίσματος και ακολουθώντας τον ίδιο αλγόριθμο προς τα πίσω και μετά είχαμε εφαρμόσει την (2.56) σε κάθε κόμβο ξεχωριστά, μπορεί τελικά να επιλέγαμε κάποιες καταστάσεις από το ένα μονοπάτι και κάποιες από το άλλο μονοπάτι και στο τέλος το διάνυσμα τιμών που επιλέξαμε να μην είναι ολικό μέγιστο. Βλέπουμε λοιπόν ότι πρέπει να καταγράψουμε τις τιμές των μεταβλητών που δημιουργούν τα μέγιστα στη διάρκεια του εμπρόσθιου περάσματος χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση $\phi(x_n)$ και ύστερα να κάνουμε οπισθοδρομική ιχνηλασία για να βρούμε τη λύση του προβλήματος.

Συνεπώς σε έναν γενικό γράφο παραγόντων σχήματος δέντρου, όταν στέλνουμε ένα μήνυμα από έναν παράγοντα f σε μια μεταβλητή x , η μεγιστοποίηση γίνεται πάνω σε όλες τις άλλες μεταβλητές x_1, \dots, x_M που είναι γείτονες του παράγοντα, χρησιμοποιώντας την (2.51). Όταν

κάνουμε αυτή τη μεγιστοποίηση, σημειώνουμε ποιες τιμές των μεταβλητών x_1, \dots, x_M δημιούργησαν το μέγιστο. Τότε όταν κάνουμε οπισθοδρομική ιχνηλασία, αφού έχουμε βρει το x^{\max} , μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτές τις αποθηκευμένες τιμές για να προσδιορίσουμε τις τιμές $x_1^{\max}, \dots, x_M^{\max}$. Ο αλγόριθμος μεγίστου-αθροίσματος με οπισθοδρομική ιχνηλασία, δίνει έναν ακριβή αλγόριθμο μεγιστοποίησης για τις μεταβλητές, εφόσον ο γράφος παραγόντων είναι ένα δέντρο. Μια σημαντική εφαρμογή αυτής της τεχνικής είναι η εύρεση της πιο πιθανής ακολουθίας των κρυμμένων καταστάσεων σε ένα κρυμμένο μαρκοβιανό μοντέλο, που είναι γνωστή ως ο αλγόριθμος *Viterbi*.

Κεφάλαιο 3

Ο Αλγόριθμος EM

3.1 Ο αλγόριθμος K -μέσων

Έστω ότι έχουμε ένα σύνολο δεδομένων $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, που αποτελείται από N παρατηρήσεις μιας D -διάστατης τυχαίας μεταβλητής \mathbf{x} . Θεωρούμε το πρόβλημα της διαμέρισης του συνόλου των δεδομένων σε K συστάδες, όπου το K είναι δεδομένος αριθμός. Διαισθητικά, κάθε συστάδα είναι ένα σύνολο δεδομένων-σημείων των οποίων οι αποστάσεις από τα υπόλοιπα εσωτερικά σημεία της συστάδας είναι μικρές σε σχέση με τις αποστάσεις από τα σημεία εκτός της συστάδας. Μπορούμε να θέσουμε αυτό το σκεπτικό σε μαθηματική βάση, εισάγοντας αρχικά ένα σύνολο D -διάστατων διανυσμάτων $\boldsymbol{\mu}_k$, όπου $k = 1, \dots, K$ και το $\boldsymbol{\mu}_k$ είναι ένα διάνυσμα που σχετίζεται με την k συστάδα, και ουσιαστικά αντιπροσωπεύει το κέντρο της συστάδας. Ο στόχος μας είναι να διαχωρίσουμε τα δεδομένα σε συστάδες και να βρούμε ένα σύνολο διανυσμάτων $\{\boldsymbol{\mu}_k\}$ ώστε το άθροισμα των τετραγώνων των αποστάσεων κάθε σημείου από το κοντινότερό του $\boldsymbol{\mu}_k$ να ελαχιστοποιηθεί.

Τώρα θα περιγράψουμε αυτή την κατανομή των δεδομένων σε συστάδες. Για κάθε δεδομένο \mathbf{x}_n , εισάγουμε ένα σύνολο δείκτριων μεταβλητών $r_{nk} \in \{0, 1\}$, όπου $k = 1, \dots, K$, που περιγράφουν σε ποια από τις συστάδες θα στείλουμε το \mathbf{x}_n , δηλαδή εάν το στοιχείο \mathbf{x}_n στέλνεται στη συστάδα k τότε $r_{nk} = 1$, και $r_{nj} = 0$ για $j \neq k$. Μπορούμε έπειτα να ορίσουμε μια αντικειμενική συνάρτηση, που δίνεται από

$$J = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K r_{nk} \|\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k\|^2 \quad (3.1)$$

που είναι το άθροισμα των τετραγώνων των αποστάσεων κάθε σημείου από το κέντρο της συστάδας του. Στόχος μας είναι να βρούμε τιμές των r_{nk} και $\boldsymbol{\mu}_k$ ώστε να ελαχιστοποιήσουμε το J . Μπορούμε να το κάνουμε αυτό με μια επαναληπτική διαδικασία, στην οποία κάθε επανάληψη περιλαμβάνει δύο διαδοχικά βήματα που είναι διαδοχικές βελτιστοποιήσεις ως προς τα r_{nk} και $\boldsymbol{\mu}_k$. Πρώτα διαλέγουμε αρχικές τιμές για τα $\boldsymbol{\mu}_k$. Έπειτα στο πρώτο στάδιο ελαχιστοποιούμε το J ως προς το r_{nk} , κρατώντας σταθερά τα $\boldsymbol{\mu}_k$. Στο δεύτερο στάδιο ελαχιστοποιούμε το J ως προς το $\boldsymbol{\mu}_k$, κρατώντας τα r_{nk} σταθερά. Αυτή η διασταδιακή βελτιστοποίηση συνεχίζεται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση. Στην πραγματικότητα η ανανέωση των τιμών των r_{nk} και $\boldsymbol{\mu}_k$ είναι αντίστοιχα τα E (expectation=μέση τιμή) και M (maximization=μεγιστοποίηση) βήματα του αλγορίθμου EM.

Θα παρουσιάσουμε τα βήματα E και M στον αλγόριθμο K -μέσων. Ας θεωρήσουμε πρώτα τον προσδιορισμό των r_{nk} . Επειδή το J στην (3.1) είναι γραμμική συνάρτηση του r_{nk} , η βελτιστοποίηση μπορεί να επιτευχθεί και μάλιστα σε κλειστή μορφή. Οι όροι που έχουν διαφορετικό n είναι ανεξάρτητοι, συνεπώς μπορούμε να βελτιστοποιήσουμε για κάθε n ξεχωριστά διαλέγοντας r_{nk} ίσο με 1 για εκείνη την τιμή του k που ελαχιστοποιεί το $\|\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k\|^2$. Με άλλα λόγια στέλνουμε το n -οστό σημείο στο πλησιέστερο κέντρο συστάδας, συνεπώς $r_{nk} = 1$ αν και μόνον αν $k = \arg \min_j \|\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_j\|^2$, ενώ σε κάθε άλλη περίπτωση $r_{nk} = 0$.

Ας θεωρήσουμε τώρα τη βελτιστοποίηση ως προς το $\boldsymbol{\mu}_k$, κρατώντας σταθερά τα r_{nk} . Η αντικειμενική συνάρτηση J είναι τετραγωνική ως προς το $\boldsymbol{\mu}_k$, και μπορεί να ελαχιστοποιηθεί θέτοντας την παράγωγο ως προς $\boldsymbol{\mu}_k$ ίση με μηδέν, για να πάρουμε

$$2 \sum_{n=1}^N r_{nk} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) = \mathbf{0} \quad (3.2)$$

οπότε επιλύοντας ως προς $\boldsymbol{\mu}_k$ παίρνουμε

$$\boldsymbol{\mu}_k = \frac{\sum_n r_{nk} \mathbf{x}_n}{\sum_n r_{nk}}. \quad (3.3)$$

Ο παρονομαστής ισούται με τον αριθμό των σημείων που στέλνονται στην συστάδα k , και συνεπώς αυτό το αποτέλεσμα έχει την εξής ερμηνεία, ότι το $\boldsymbol{\mu}_k$ ισούται με το μέσο όρο των σημείων \mathbf{x}_n που ανήκουν στην συστάδα k . Για το λόγο αυτό η διαδικασία λέγεται αλγόριθμος K -μέσων.

Τα δύο στάδια στα οποία ξαναστέλνουμε σημεία δεδομένων σε συστάδες και ξαναυπολογίζουμε τους μέσους κάθε συστάδας επαναλαμβάνονται, μέχρι να μην υπάρχουν αλλαγές στις αναθέσεις, είτε μέχρι να επιτευχθεί ένας ικανός αριθμός επαναλήψεων. Επειδή σε κάθε φάση η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης J μειώνεται, η σύγκλιση του αλγορίθμου είναι βέβαιη. Ενδέχεται όμως η σύγκλιση να επιτευχθεί σε τοπικό και όχι σε ολικό ελάχιστο της J . Σημαντικό ρόλο για τη σύγκλιση παίζουν οι επιλογές των αρχικών τιμών των κέντρων των συστάδων. Μια καλή αρχικοποίηση θα ήταν να διαλέξουμε τα κέντρα των συστάδων $\boldsymbol{\mu}_k$ να είναι ίσα με ένα τυχαίο υποσύνολο K τιμών των δεδομένων. Ο αλγόριθμος K -μέσων συν τοις άλλοις χρησιμοποιείται συχνά για την αρχικοποίηση των παραμέτρων ενός μοντέλου μίξης κανονικών πριν εφαρμόσουμε τον αλγόριθμο EM.

Οι εφαρμογές του αλγορίθμου είναι πολυάριθμες. Μεταξύ αυτών είναι τα προβλήματα της τμηματοποίησης εικόνας και της συμπίεσης εικόνας ή δεδομένων. Ο στόχος της τμηματοποίησης είναι να διαμερίσουμε την εικόνα σε περιοχές, που καθεμία είτε έχει μια ομοιογενή οπτικά εμφάνιση είτε αντιστοιχεί σε αντικείμενα ή τμήματα αντικειμένων. Όταν κάνουμε συμπίεση δεδομένων, είναι σημαντικό να κάνουμε διάκριση μεταξύ συμπίεσης δεδομένων χωρίς απώλειες, όπου έχουμε ως στόχο να μπορούμε να ανακατασκευάσουμε ακριβώς τα αυθεντικά δεδομένα από τη συμπίεσμένη αναπαράσταση, και μεταξύ συμπίεσης δεδομένων με απώλειες. Στη δεύτερη περίπτωση, αφενός αποδεχόμαστε ορισμένα λάθη όταν κάνουμε ανασυγκρότηση, αφετέρου μπορούμε να πετύχουμε υψηλότερα επίπεδα συμπίεσης σε σχέση με την περίπτωση χωρίς απώλειες.

3.2 Μίξη κανονικών κατανομών

Η μίξη κανονικών κατανομών είναι μια γραμμική υπέρθεση κανονικών κατανομών και παρέχει μια πλουσιότερη κατηγορία μοντέλων πυκνότητας από μια απλή κανονική κατανομή. Μπορούμε να διατυπώσουμε τη μίξη κανονικών μέσω διακριτών λανθάνουσών μεταβλητών. Αυτό θα μας βοηθήσει στην καλύτερη κατανόηση της κατανομής καθώς και για να χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο EM.

Η συνάρτηση πυκνότητας της μίξης μπορεί να γραφτεί ως εξής

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k). \quad (3.4)$$

Ας εισάγουμε τώρα μια K -διάστατη τυχαία μεταβλητή \mathbf{z} τέτοια ώστε ένα συγκεκριμένο στοιχείο της z_k ισούται με 1 και όλα τα υπόλοιπα στοιχεία ισούνται με 0. Οι τιμές του z_k συνεπώς ικανοποιούν τις σχέσεις $z_k \in \{0, 1\}$ και $\sum_k z_k = 1$, και βλέπουμε ότι το διάνυσμα \mathbf{z} έχει συνολικά K δυνατές τιμές που καθορίζονται από τη συντεταγμένη που είναι μη μηδενική. Θα ορίσουμε την από κοινού κατανομή $p(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ ως γινόμενο της περιθώριας πιθανότητας $p(\mathbf{z})$ και της δεσμευμένης πιθανότητας $p(\mathbf{x} | \mathbf{z})$. Η περιθώρια κατανομή του \mathbf{z} είναι ορισμένη με βάση τα π_k , έτσι ώστε

$$p(z_k = 1) = \pi_k \quad (3.5)$$

όπου οι παράμετροι $\{\pi_k\}$ πρέπει να ικανοποιούν τις σχέσεις

$$0 \leq \pi_k \leq 1 \quad (3.6)$$

$$\sum_{k=1}^K \pi_k = 1 \quad (3.7)$$

ώστε να είναι έγκυρες πιθανότητες. Συνεπώς μπορούμε να γράψουμε την κατανομή του \mathbf{z} ως εξής

$$p(\mathbf{z}) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{z_k}. \quad (3.8)$$

Παρομοίως η δεσμευμένη κατανομή του \mathbf{x} δοθείσης μιας συγκεκριμένης τιμής του \mathbf{z} είναι μια κανονική με

$$p(\mathbf{x} | z_k = 1) = \mathcal{N}(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \quad (3.9)$$

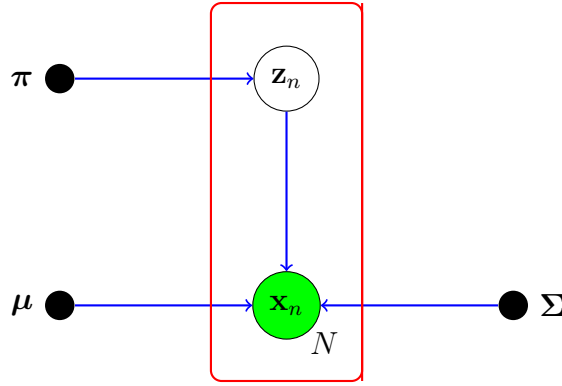
οπότε παρομοίως έχουμε

$$p(\mathbf{x} | \mathbf{z}) = \prod_{k=1}^K \mathcal{N}(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)^{z_k}. \quad (3.10)$$

Συνεπώς η περιθώρια πιθανότητα της \mathbf{x} ισούται με

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{z}) p(\mathbf{x} | \mathbf{z}) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \quad (3.11)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τις (3.8) και (3.10). Αυτή η περιθώρια πιθανότητα παρατηρούμε ότι είναι μια μίξη κανονικών κατανομών της μορφής (3.4). Επειδή έχουμε χρησιμοποιήσει τη



Σχήμα 3.1: Γραφική αναπαράσταση ενός μοντέλου μίξης κανονικών κατανομών για ένα σύνολο από N αν. και ισόν. παρατηρήσεις $\{\mathbf{x}_n\}$ με λανθάνουσες μεταβλητές $\{\mathbf{z}_n\}$, όπου $n = 1, \dots, N$.

σχέση $p(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{x}, \mathbf{z})$, έπεται ότι για κάθε παρατήρηση \mathbf{x}_n , υπάρχει αντιστοιχισμένη μια λανθάνουσα μεταβλητή \mathbf{z}_n . Επομένως βρήκαμε μια ισοδύναμη διατύπωση της μίξης κανονικών κατανομών που περιλαμβάνει μια λανθάνουσα μεταβλητή. Πλέον θα εργαζόμαστε πάνω στην από κοινού κατανομή $p(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ αντί για την περιθώρια $p(\mathbf{x})$, και αυτό οδηγεί σε απλοποιήσεις, κυρίως με την εισαγωγή του αλγορίθμου EM.

Μια άλλη ποσότητα που θα μας απασχολήσει είναι η δεσμευμένη πιθανότητα του \mathbf{x} δοθέντος του \mathbf{z} . Συμβολίζουμε την $p(z_k = 1 | \mathbf{x})$ με $\gamma(z_k)$, και μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Bayes ως εξής

$$\begin{aligned} \gamma(z_k) = p(z_k = 1 | \mathbf{x}) &= \frac{p(z_k = 1)p(\mathbf{x} | z_k = 1)}{\sum_{j=1}^K p(z_j = 1)p(\mathbf{x} | z_j = 1)} \\ &= \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Μπορούμε να δούμε την π_k ως την εκ των προτέρων πιθανότητα του $z_k = 1$, και την ποσότητα $\gamma(z_k)$ ως την αντίστοιχη εκ των υστέρων πιθανότητα αφού έχουμε παρατηρήσει το \mathbf{x} .

Ας υποθέσουμε τώρα ότι έχουμε ένα σύνολο δεδομένων από παρατηρήσεις $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, και θέλουμε να μοντελοποιήσουμε τα δεδομένα χρησιμοποιώντας μίξη κανονικών. Μπορούμε να αναπαραστήσουμε τα δεδομένα ως έναν $N \times D$ πίνακα \mathbf{X} του οποίου η n -οστή γραμμή δίνεται από το \mathbf{x}_n^T , ενώ οι αντίστοιχες λανθάνουσες μεταβλητές θα δίνονται από έναν $N \times K$ πίνακα \mathbf{Z} με γραμμές \mathbf{z}_n^T . Εάν υποθέσουμε ότι τα δεδομένα λαμβάνονται ανεξάρτητα από την κατανομή, τότε μπορούμε να εκφράσουμε το μοντέλο μίξης κανονικών για αυτά τα ανεξάρτητα και ισόνομα δεδομένα χρησιμοποιώντας τη γραφική αναπαράσταση του Σχήματος 3.1. Από τη σχέση (3.4), ο λογάριθμος της συνάρτησης πιθανοφάνειας δίνεται από

$$\ln p(\mathbf{X} | \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{n=1}^N \ln \left\{ \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \right\}. \quad (3.13)$$

Η μεγιστοποίηση της (3.13), όμως, βλέπουμε ότι είναι ένα πρόβλημα πιο περίπλοκο από αυτό μιας απλής κανονικής κατανομής. Ο λόγος είναι η παρουσία του αθροίσματος που εμφανίζεται εντός του λογαρίθμου, και έτσι η συνάρτηση του λογαρίθμου δεν δρα πλέον απευθείας πάνω στην κανονική. Εάν θέσουμε τις παραγώγους της λογαριθμικής πιθανοφάνειας ίσες με το μηδέν, τότε δεν θα πάρουμε ένα αποτέλεσμα σε κλειστή μορφή. Για να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο EM.

3.3 Ο αλγόριθμος EM για μίξη κανονικών κατανομών

Μια απλή και ταυτόχρονα ισχυρή μέθοδος για την εύρεση λύσεων βασισμένων στη μέγιστη πιθανοφάνεια σε μοντέλα με λανθάνουσες μεταβλητές είναι ο αλγόριθμος EM. Ο EM είναι ευρέως εφαρμόσιμος, αρχικά όμως θα εστιάσουμε στο μοντέλο μίξης κανονικών.

Ας αρχίσουμε γράφοντας τις συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται για ένα μέγιστο της συνάρτησης πιθανοφάνειας. Θέτοντας τις παραγώγους της συνάρτησης $\ln p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ στην (3.13) ως προς τις μέσες τιμές $\boldsymbol{\mu}_k$ ίσες με μηδέν, παίρνουμε

$$\mathbf{0} = \sum_{n=1}^N \underbrace{\frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}}_{\gamma(z_{nk})} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) \quad (3.14)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τον τύπο (1.16) της πολυδιάστατης κανονικής. Παρατηρήστε ότι οι εκ των υστέρων πιθανότητες που δίνονται από την (3.12) εμφανίζονται με φυσικό τρόπο στη δεξιά πλευρά της ισότητας και ισούνται με το κλάσμα εντός του αθροίσματος. Πολλαπλασιάζοντας με $\boldsymbol{\Sigma}_k$ και εναλλάσσοντας παίρνουμε

$$\boldsymbol{\mu}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n \quad (3.15)$$

όπου έχουμε ορίσει

$$N_k = \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}). \quad (3.16)$$

Μπορούμε να ερμηνεύσουμε το N_k ως τον μέσο αριθμό σημείων που αντιστοιχίζονται στη συστάδα k . Βλέπουμε ότι η μέση τιμή $\boldsymbol{\mu}_k$ της k -οστής μεταβλητής που είναι όρος της μίξης, προκύπτει παίρνοντας ένα σταθμισμένο μέσο όρο όλων των στοιχείων του συνόλου των παρατηρήσεων, όπου ο συντελεστής στάθμισης της παρατήρησης \mathbf{x}_n δίνεται από την εκ των υστέρων πιθανότητα $\gamma(z_{nk})$, που δείχνει κατά πόσον ο όρος k ήταν υπεύθυνος για την παραγωγή του \mathbf{x}_n .

Εάν θέσουμε την παράγωγο της $\ln p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ ως προς $\boldsymbol{\Sigma}_k$ ίση με μηδέν, και ακολουθήσουμε βήματα όπως προηγουμένως, θα πάρουμε

$$\boldsymbol{\Sigma}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T. \quad (3.17)$$

Βλέπουμε ότι η μορφή είναι η ίδια με αυτή μιας απλής κανονικής κατανομής που προσαρμόζεται σε ένα σύνολο δεδομένων, όμως ξανά με κάθε παρατήρηση σταθμισμένη με την εκ των υστέρων πιθανότητα και με τον παρονομαστή που δίνεται από τον αναμενόμενο αριθμό σημείων που σχετίζονται με την αντίστοιχη μεταβλητή μίξης.

Τέλος, μεγιστοποιούμε την $\ln p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ ως προς τους παράγοντες μίξης π_k . Εδώ θα πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν τον περιορισμό (3.7), που απαιτεί το άθροισμα των π_k να ισούται με ένα. Η μεγιστοποίηση μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας έναν πολλαπλασιαστή Lagrange και μεγιστοποιώντας την ποσότητα

$$\ln p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) + \lambda \left(\sum_{k=1}^K \pi_k - 1 \right) \quad (3.18)$$

το οποίο δίνει

$$0 = \sum_{n=1}^N \frac{\mathcal{N}(\mathbf{x}_n|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_n|\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)} + \lambda. \quad (3.19)$$

Εάν πολλαπλασιάσουμε και τις δυο πλευρές με π_k και αθροίσουμε πάνω σε όλα τα k και κάνουμε χρήση του περιορισμού (3.7), βρίσκουμε $\lambda = -N$. Αντικαθιστούμε την τιμή του λ και τελικά βρίσκουμε ότι

$$\pi_k = \frac{N_k}{N} \quad (3.20)$$

δηλαδή το π_k ισούται με το μέσο όρο των $\gamma(z_{nk})$.

Αξίζει να αναφέρουμε ότι τα αποτελέσματα (3.15), (3.17) και (3.20) δεν είναι λύσεις σε κλειστή μορφή του μοντέλου μίξης, επειδή οι πιθανότητες $\gamma(z_{nk})$ εξαρτώνται από αυτές τις παραμέτρους με έναν περίπλοκο τρόπο μέσω της σχέσης (3.12). Εντούτοις, αυτά τα αποτελέσματα συνθέτουν ένα απλό επαναληπτικό σχήμα για την εύρεση μιας λύσης του προβλήματος μέγιστης πιθανοφάνειας. Ξεκινάμε διαλέγοντας κάποιες αρχικές τιμές για τις μέσες τιμές, τους πίνακες συνδιασποράς και τους συντελεστές μίξης. Έπειτα κινούμαστε εναλλάξ μεταξύ του E βήματος και του M βήματος. Στο E βήμα χρησιμοποιούμε τις τιμές των παραμέτρων για να υπολογίσουμε τις εκ των υστέρων πιθανότητες που δίνονται από την (3.12). Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε αυτές τις πιθανότητες στο M βήμα για να επανεκτιμήσουμε τις μέσες τιμές, συνδιασπορές και παράγοντες μίξης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα (3.15), (3.17) και (3.20). Να σημειωθεί ότι πρώτα υπολογίζουμε τις νέες μέσες τιμές χρησιμοποιώντας την (3.15) και μετά χρησιμοποιούμε αυτές τις νέες τιμές για να βρούμε τις συνδιασπορές χρησιμοποιώντας την (3.17). Θα θεωρούμε ότι ο αλγόριθμος έχει συγκλίνει όταν η αλλαγή στη λογαριθμική συνάρτηση πιθανοφάνειας, ή εναλλακτικά στις παραμέτρους, είναι μικρότερη από κάποιο “κατώφλι”.

Γενικά ο αλγόριθμος EM χρειάζεται πολύ περισσότερες επαναλήψεις για να συγκλίνει σε σχέση με τον αλγόριθμο K -μέσων, και κάθε επανάληψη χρειάζεται σημαντικά περισσότερους υπολογισμούς. Για το λόγο αυτό συνηθίζουμε να τρέχουμε τον αλγόριθμο K -μέσων για να βρούμε μια κατάλληλη αρχικοποίηση για το μοντέλο μίξης κανονικών, και μετά συνεχίζουμε χρησιμοποιώντας τον EM. Οι πίνακες συνδιασποράς μπορούν να αρχικοποιηθούν από τις δειγματικές συνδιασπορές των συστάδων που βρέθηκαν από τον αλγόριθμο K -μέσων, και οι συντελεστές μίξης από τα ποσοστά των παρατηρήσεων που ανήκουν σε κάθε συστάδα. Να σημειωθεί ότι γενικά θα υπάρχουν πολλά τοπικά μέγιστα της λογαριθμικής συνάρτησης πιθανοφάνειας, και ότι ο EM δεν είναι σίγουρο ότι θα βρει το μεγαλύτερο από αυτά τα μέγιστα. Συνοψίζοντας:

EM για μίξη κανονικών

1. Αρχικοποιούμε τις μέσες τιμές $\boldsymbol{\mu}_k$, συνδιασπορές $\boldsymbol{\Sigma}_k$ και παράγοντες μίξης π_k και υπολογίζουμε την αρχική τιμή της λογαριθμικής πιθανοφάνειας.
2. **E βήμα:** Υπολογίζουμε τις εκ των υστέρων πιθανότητες χρησιμοποιώντας τις πρόσφατες τιμές των παραμέτρων

$$\gamma(z_{nk}) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}. \quad (3.21)$$

3. **M βήμα:** Επανεκτιμούμε τις παραμέτρους χρησιμοποιώντας τις πρόσφατες τιμές των $\gamma(z_{nk})$

$$\boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}} = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n \quad (3.22)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{new}} = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}})(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}})^T \quad (3.23)$$

$$\pi_k^{\text{new}} = \frac{N_k}{N} \quad (3.24)$$

$$(3.25)$$

όπου έχουμε ορίσει

$$N_k = \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}). \quad (3.26)$$

4. Υπολογίζουμε την λογαριθμική πιθανοφάνεια

$$\ln p(\mathbf{X} | \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{n=1}^N \ln \left\{ \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \right\} \quad (3.27)$$

και ελέγχουμε για σύγκλιση είτε των παραμέτρων είτε της λογαριθμικής πιθανοφάνειας. Εάν το κριτήριο σύγκλισης δεν ικανοποιείται, επιστρέφουμε στο βήμα 2.

3.4 Μια εναλλακτική θεώρηση του EM

Ο στόχος του αλγορίθμου EM είναι η εύρεση λύσεων μέγιστης πιθανοφάνειας για μοντέλα με λανθάνουσες μεταβλητές. Ορίζουμε το σύνολο των παρατηρηθέντων δεδομένων με \mathbf{X} , του οποίου η n -οστή σειρά ισούται με \mathbf{x}_n^T , και όμοια ορίζουμε το σύνολο όλων των λανθανουσών

μεταβλητών με \mathbf{Z} , του οποίου η n -οστή σειρά ισούται με \mathbf{z}_n^T . Το σύνολο των παραμέτρων του μοντέλου συμβολίζεται με $\boldsymbol{\theta}$, και έτσι η λογαριθμική συνάρτηση πιθανοφάνειας δίνεται από

$$\ln p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\theta}) = \ln \left\{ \sum_{\mathbf{Z}} p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}) \right\}. \quad (3.28)$$

Όταν οι λανθάνουσες μεταβλητές είναι συνεχείς, τα άθροισμα αντικαθιστώνται από ολοκληρώματα.

Είναι πολύ σημαντικό να παρατηρήσουμε ότι το άθροισμα επί των λανθανουσών μεταβλητών γίνεται μέσα στο λογάριθμο. Ακόμα και αν η από κοινού πιθανότητα $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta})$ ανήκει στην εκθετική οικογένεια κατανομών, η περιθώρια κατανομή $p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\theta})$ εν γένει δεν ανήκει λόγω του άθροισματος αυτού. Η παρουσία του άθροισματος εμποδίζει τον λογάριθμο να επιδράσει απευθείας στην από κοινού κατανομή, με αποτέλεσμα να έχουμε περίπλοκες εκφράσεις στη λύση της μέγιστης πιθανοφάνειας. Γενικά μια κατανομή επί της \mathbf{x} , δοθέντων των παραμέτρων $\boldsymbol{\eta}$, λέμε ότι ανήκει στην εκθετική οικογένεια κατανομών εάν μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\eta}) = h(\mathbf{x})g(\boldsymbol{\eta}) \exp \{ \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{u}(\mathbf{x}) \} \quad (3.29)$$

όπου η \mathbf{x} είναι διακριτή ή συνεχής μεταβλητή, μονοδιάστατη ή πολυδιάστατη.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι σε κάθε παρατήρηση της \mathbf{X} έχουμε τη δυνατότητα να γνωρίζουμε την αντίστοιχη τιμή της λανθάνουσας μεταβλητής, δηλαδή το \mathbf{Z} . Θα χαρακτηρίζουμε το $\{\mathbf{X}, \mathbf{Z}\}$ ως το πλήρες σύνολο δεδομένων, ενώ στο πραγματικά παρατηρηθέν σύνολο \mathbf{X} θα αναφερόμαστε ως ελλιπές σύνολο δεδομένων. Υποθέτουμε επίσης ότι η μεγιστοποίηση της συνάρτησης $\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta})$ είναι εφικτή.

Στην πράξη όμως, δεν μας δίνεται το πλήρες σύνολο δεδομένων $\{\mathbf{X}, \mathbf{Z}\}$, αλλά το ελλιπές σύνολο \mathbf{X} . Η μοναδική γνώση μας για τις τιμές των λανθανουσών μεταβλητών δίνεται από την κατανομή $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta})$. Επειδή δε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη λογαριθμική πιθανοφάνεια των πλήρων δεδομένων, θεωρούμε τη μέση τιμή της υπό την $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta})$, που αποδεικνύεται ότι αντιστοιχεί στο E βήμα του αλγορίθμου EM. Στο επακόλουθο M βήμα, μεγιστοποιούμε αυτή τη μέση τιμή. Εάν η πιο πρόσφατη εκτίμηση των παραμέτρων είναι η $\boldsymbol{\theta}^{\text{old}}$, τότε ένα ζεύγος από διαδοχικά E και M βήματα δημιουργεί μια νέα εκτίμηση, τη $\boldsymbol{\theta}^{\text{new}}$. Ο αλγόριθμος αρχικοποιείται από την τιμή $\boldsymbol{\theta}^0$ για τις παραμέτρους.

Στο E βήμα χρησιμοποιούμε τις πρόσφατες τιμές $\boldsymbol{\theta}^{\text{old}}$ για να βρούμε την εκ των υστέρων πιθανότητα $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$. Ύστερα χρησιμοποιούμε αυτή την πιθανότητα για να βρούμε τη μέση τιμή της λογαριθμικής πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων, υπολογισμένη για κάποια τυχούσα τιμή των παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}$. Αυτή η μέση τιμή δίνεται από

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) = \sum_{\mathbf{Z}} p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}). \quad (3.30)$$

Στο M βήμα, υπολογίζουμε τη νέα εκτίμηση $\boldsymbol{\theta}^{\text{new}}$ μεγιστοποιώντας την παρακάτω συνάρτηση

$$\boldsymbol{\theta}^{\text{new}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}). \quad (3.31)$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι στον ορισμό του $\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$, ο λογάριθμος δρα απευθείας στην από κοινού πιθανότητα $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta})$, και έτσι η μεγιστοποίηση του M βήματος θα είναι εξ υποθέσεως εφικτή.

Παρακάτω ανακεφαλαιώνουμε τον γενικό αλγόριθμο EM. Αποδεικνύεται ότι σε κάθε κύκλο του αλγορίθμου, η λογαριθμική πιθανοφάνεια των ελλειπών δεδομένων αυξάνεται, εκτός αν βρισκόμαστε ήδη σε τοπικό μέγιστο.

Ο γενικός αλγόριθμος EM

1. Διαλέγουμε μια αρχική τιμή για τις παραμέτρους θ^{old} .
2. **E βήμα:** Υπολογίζουμε την $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \theta^{\text{old}})$.
3. **M βήμα:** Υπολογίζουμε το θ^{new} που δίνεται από

$$\theta^{\text{new}} = \arg \max_{\theta} \mathcal{Q}(\theta, \theta^{\text{old}}) \quad (3.32)$$

όπου

$$\mathcal{Q}(\theta, \theta^{\text{old}}) = \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \theta^{\text{old}}) \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\theta). \quad (3.33)$$

4. Ελέγχουμε για σύγκλιση είτε της λογαριθμικής πιθανοφάνειας είτε των τιμών των παραμέτρων. Εάν το κριτήριο σύγκλισης δεν ικανοποιείται, τότε θέτουμε

$$\theta^{\text{old}} \leftarrow \theta^{\text{new}} \quad (3.34)$$

και επιστρέφουμε στο βήμα 2.

Ο αλγόριθμος EM μπορεί να χρησιμοποιηθεί επίσης για να βρούμε μέγιστες εκ των υστέρων λύσεις για μοντέλα στα οποία ορίζεται μια εκ των προτέρων κατανομή $p(\theta)$ για τις παραμέτρους. Σε αυτή την περίπτωση το E βήμα παραμένει το ίδιο με αυτό της μέγιστης πιθανοφάνειας, ενώ στο M βήμα η ποσότητα που πρέπει να μεγιστοποιηθεί ισούται με $\mathcal{Q}(\theta, \theta^{\text{old}}) + \ln p(\theta)$.

Ας δούμε λίγο αναλυτικότερα πώς γίνεται αυτό. Η εκ των υστέρων πιθανότητα των παραμέτρων ισούται με

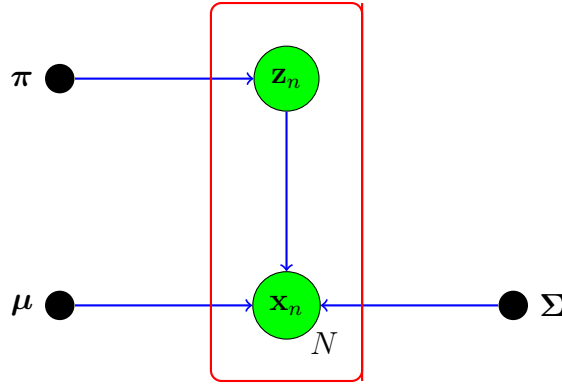
$$p(\theta|\mathbf{X}) = \frac{p(\mathbf{X}, \theta)}{p(\mathbf{X})} = \frac{p(\mathbf{X}|\theta)p(\theta)}{\int p(\mathbf{X}|\theta)p(\theta)d\theta} \quad (3.35)$$

ενώ η πιθανότητα της συνάρτησης πρόβλεψης δίνεται από

$$p(\mathbf{X}_f|\mathbf{X}) = \int p(\mathbf{X}_f|\theta)p(\theta|\mathbf{X})d\theta. \quad (3.36)$$

Το διάνυσμα παραμέτρων που μεγιστοποιεί την εκ των υστέρων κατανομή λέγεται MAP (maximum a posteriori) εκτίμηση, και ισούται με

$$\theta_{\text{MAP}} = \arg \max_{\theta} p(\theta|\mathbf{X}) = \arg \max_{\theta} p(\theta, \mathbf{X}). \quad (3.37)$$



Σχήμα 3.2: Ίδια γραφική αναπαράσταση με το Σχήμα 3.1, αλλά εδώ υποθέτουμε ότι εκτός από τις $\{\mathbf{x}_n\}$, παρατηρούνται και οι λανθάνουσες μεταβλητές $\{\mathbf{z}_n\}$.

Ενώ ο τύπος της συνάρτησης $\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$ δίνεται από

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &= \mathcal{Q}_{\text{MLE}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) = \sum_{\mathbf{Z}} p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}) \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta})), \end{aligned} \quad (3.38)$$

μπορούμε να ορίσουμε τη συνάρτηση $\mathcal{Q}_{\text{MAP}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$ ως εξής:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{\text{MAP}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &= \mathbb{E}_{\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta})) \\ &= \mathcal{Q}_{\text{MLE}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) + \mathbb{E}_{\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} (\ln p(\boldsymbol{\theta})) \\ &= \mathcal{Q}_{\text{MLE}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) + \ln p(\boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \quad (3.39)$$

όπως αναφέρθηκε προηγουμένως.

Μέχρι τώρα θεωρήσαμε τη χρήση του EM για να μεγιστοποιήσουμε μια συνάρτηση πιθανοφάνειας όταν υπάρχουν διακριτές λανθάνουσες μεταβλητές. Μπορεί όμως επίσης να εφαρμοστεί όταν οι αόρατες μεταβλητές αντιστοιχούν σε εξαφανισμένες τιμές του συνόλου των δεδομένων. Η κατανομή των παρατηρηθέντων τιμών προκύπτει παίρνοντας την από κοινού κατανομή όλων των μεταβλητών και αθροίζοντας πάνω στις εξαφανισμένες. Ο EM τότε μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να μεγιστοποιήσουμε τη συνάρτηση πιθανοφάνειας. Η διαδικασία αυτή είναι έγκυρη εάν οι εξαφανισμένες τιμές παραλείπονται τυχαία, που σημαίνει ότι ο μηχανισμός που προκαλεί τις παραλείψεις των τιμών δεν εξαρτάται από τις μη παρατηρούμενες τιμές. Σε πολλές περιπτώσεις αυτό δεν συμβαίνει, όταν για παράδειγμα ένας αισθητήρας αδυνατεί να καταγράψει μια τιμή όταν η ποσότητα που μετρά ξεπερνάει κάποιο όριο.

Ας επιστρέψουμε στη μίξη κανονικών κατανομών και ας θεωρήσουμε τώρα το πρόβλημα της μεγιστοποίησης της πιθανοφάνειας για το πλήρες σύνολο δεδομένων $\{\mathbf{X}, \mathbf{Z}\}$. Από τις (3.8) και (3.10), η συνάρτηση πιθανοφάνειας παίρνει τη μορφή

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \prod_{n=1}^N \prod_{k=1}^K \pi_k^{z_{nk}} \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)^{z_{nk}} \quad (3.40)$$

όπου z_{nk} είναι η k -οστή συντεταγμένη του \mathbf{z}_n . Παίρνοντας το λογάριθμο, έχουμε

$$\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K z_{nk} \{ \ln \pi_k + \ln \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \}. \quad (3.41)$$

Συγκρίνοντας την παραπάνω λογαριθμική πιθανοφάνεια με την λογαριθμική πιθανοφάνεια (3.13) των ελλειπών δεδομένων, παρατηρούμε ότι το άθροισμα ως προς k και ο λογάριθμος έχουν εναλλαχθεί μεταξύ τους, και πλέον ο λογάριθμος δρα απευθείας στην κανονική κατανομή, που ανήκει στην εκθετική οικογένεια κατανομών. Αυτά έχουν ως αποτέλεσμα να είναι ευκολότερη η λύση του προβλήματος μέγιστης πιθανοφάνειας. Η μεγιστοποίηση ως προς μία μέση τιμή ή μια διασπορά είναι ίδια με την απλή κανονική, με τη διαφορά ότι περιλαμβάνει μόνο το υποσύνολο των δεδομένων που αφορούν αυτό το στοιχείο. Για τη μεγιστοποίηση ως προς τους συντελεστές μίξης, πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν μας τον περιορισμό άθροισης (3.7), και χρησιμοποιώντας έναν πολλαπλασιαστή Lagrange, το αποτέλεσμα είναι

$$\pi_k = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N z_{nk} \quad (3.42)$$

δηλαδή οι συντελεστές μίξης ισούνται με το ποσοστό των δεδομένων που ανήκουν στην αντίστοιχη συνιστώσα μίξης.

Βλέπουμε λοιπόν ότι η λογαριθμική πιθανοφάνεια των πλήρων δεδομένων μπορεί να μεγιστοποιηθεί σε κλειστή μορφή. Στην πράξη βέβαια δε γνωρίζουμε τις τιμές των λανθανουσών μεταβλητών, και γι' αυτό θεωρούμε τη μέση τιμή της λογαριθμικής πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων ως προς την εκ των υστέρων κατανομή των λανθανουσών μεταβλητών. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3.8) και (3.10) μαζί με το θεώρημα του Bayes, βλέπουμε ότι η εκ των υστέρων κατανομή παίρνει τη μορφή

$$p(\mathbf{Z} | \mathbf{X}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}) \propto \prod_{n=1}^N \prod_{k=1}^K [\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)]^{z_{nk}} \quad (3.43)$$

και μπορεί να παραγοντοποιηθεί ως προς το n , επομένως υπό την εκ των υστέρων κατανομή τα $\{\mathbf{z}_n\}$ είναι ανεξάρτητα. Αυτό διαπιστώνεται εύκολα αν κοιτάξουμε το γράφο του Σχήματος 3.1 και κάνουμε χρήση του κριτηρίου δ -διαχωρισμού. Η μέση τιμή της μεταβλητής z_{nk} υπό την εκ των υστέρων κατανομή δίνεται από

$$\mathbb{E}[z_{nk}] = \frac{\sum_{\mathbf{z}_n} z_{nk} \prod_{k'} [\pi_{k'} \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_{k'}, \boldsymbol{\Sigma}_{k'})]^{z_{nk'}}}{\sum_{\mathbf{z}_n} \prod_j [\pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)]^{z_{nj}}} \quad (3.44)$$

$$= \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)} = \gamma(z_{nk}). \quad (3.45)$$

Επομένως η μέση τιμή της λογαριθμικής πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων δίνεται από

$$\mathbb{E}_{\mathbf{Z}}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\pi})] = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \gamma(z_{nk}) \{ \ln \pi_k + \ln \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \}. \quad (3.46)$$

Τώρα μπορούμε να κινηθούμε ως εξής. Ξεκινάμε διαλέγοντας αρχικές τιμές για τις παραμέτρους $\boldsymbol{\mu}^{\text{old}}, \boldsymbol{\Sigma}^{\text{old}}, \boldsymbol{\pi}^{\text{old}}$ και τις χρησιμοποιούμε για να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\gamma(z_{nk})$ (E βήμα). Ύστερα κρατάμε τις $\gamma(z_{nk})$ σταθερές και μεγιστοποιούμε την (3.46) ως προς τα $\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k$ και π_k (M βήμα). Αυτό οδηγεί στις λύσεις για τις $\boldsymbol{\mu}^{\text{old}}, \boldsymbol{\Sigma}^{\text{new}}, \boldsymbol{\pi}^{\text{new}}$ που δίνονται όπως πριν από τις (3.15), (3.17) και (3.20). Αυτός είναι ακριβώς ο αλγόριθμος EM για τη μίξη κανονικών όπως είχε προκύψει νωρίτερα.

Ας δώσουμε και ένα ακόμα παράδειγμα, αυτό της μίξης κατανομών Bernoulli. Θεωρούμε αρχικά ένα σύνολο από D δίτιμες μεταβλητές x_i καθεμία από τις οποίες ελέγχεται από μια κατανομή Bernoulli με παράμετρο μ_i , συνεπώς

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}) = \prod_{i=1}^D \mu_i^{x_i} (1 - \mu_i)^{(1-x_i)}. \quad (3.47)$$

Ας θεωρήσουμε τώρα μια πεπερασμένη μίξη αυτών των κατανομών που δίνεται από

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\pi}) = \sum_{k=1}^K \pi_k p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_k) \quad (3.48)$$

όπου

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_k) = \prod_{i=1}^D \mu_{ki}^{x_i} (1 - \mu_{ki})^{(1-x_i)}. \quad (3.49)$$

Εάν μας δοθεί ένα σύνολο δεδομένων $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ τότε η λογαριθμική πιθανοφάνεια του μοντέλου ισούται με

$$\ln p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\pi}) = \sum_{n=1}^N \ln \left\{ \sum_{k=1}^K \pi_k p(\mathbf{x}_n|\boldsymbol{\mu}_k) \right\}. \quad (3.50)$$

Πάλι βλέπουμε την παρουσία του αθροίσματος μέσα στο λογάριθμο, και επομένως πάλι η λύση μέγιστης πιθανοφάνειας δεν έχει κλειστή μορφή.

Θα παραθέσουμε τώρα τον αλγόριθμο EM για την μίξη των κατανομών Bernoulli. Πρώτα εισάγουμε μια K -διάστατη λανθάνουσα μεταβλητή $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_K)^T$, που έχει τη μία συντεταγμένη ίση με 1 και τις υπόλοιπες ίσες με 0. Μπορούμε τότε να γράψουμε

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}) = \prod_{k=1}^K p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_k)^{z_k} \quad (3.51)$$

$$p(\mathbf{z}|\boldsymbol{\pi}) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{z_k}. \quad (3.52)$$

Αρχικά γράφουμε τη λογαριθμική πιθανοφάνεια των πλήρων δεδομένων που δίνεται από

$$\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\pi}) = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K z_{nk} \left\{ \ln \pi_k + \sum_{i=1}^D [x_{ni} \ln \mu_{ki} + (1 - x_{ni}) \ln(1 - \mu_{ki})] \right\} \quad (3.53)$$

όπου $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_n\}$ και $\mathbf{Z} = \{z_{nk}\}$. Έπειτα παίρνουμε τη μέση τιμή της λογαριθμικής πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων ως προς την εκ των υστέρων πιθανότητα των λανθανουσών μεταβλητών για να πάρουμε

$$\mathbb{E}_{\mathbf{Z}}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\pi})] = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \gamma(z_{nk}) \left\{ \ln \pi_k + \sum_{i=1}^D [x_{ni} \ln \mu_{ki} + (1 - x_{ni}) \ln(1 - \mu_{ki})] \right\}. \quad (3.54)$$

Στο E βήμα έχουμε

$$\gamma(z_{nk}) = \mathbb{E}[z_{nk}] = \frac{\sum_{\mathbf{z}_n} z_{nk} \prod_{k'} [\pi_{k'} p(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_{k'})]^{z_{nk'}}}{\sum_{\mathbf{z}_n} \prod_j [\pi_j p(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_j)]^{z_{nj}}} \quad (3.55)$$

$$= \frac{\pi_k p(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j p(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_j)}. \quad (3.56)$$

Στο M βήμα μεγιστοποιούμε την (3.54) ως προς τις παραμέτρους $\boldsymbol{\mu}_k$ και π_k . Εάν θέσουμε την παράγωγο της (3.54) ως προς $\boldsymbol{\mu}_k$ ίση με μηδέν, θα πάρουμε

$$\boldsymbol{\mu}_k = \frac{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n}{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk})} = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n = \bar{\mathbf{x}}_k. \quad (3.57)$$

Για τη μεγιστοποίηση ως προς το π_k , θα πρέπει να εισάγουμε έναν πολλαπλασιαστή Lagrange, λόγω του περιορισμού $\sum_k \pi_k = 1$. Ακολουθώντας βήματα όμοια με αυτά που χρησιμοποιήσαμε στη μίξη κανονικών, παίρνουμε

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}. \quad (3.58)$$

Μέρος II

Κρυμμένα Μαρκοβιανά Μοντέλα και
Γραμμικά Δυναμικά Συστήματα

Κεφάλαιο 4

Κρυμμένα Μαρκοβιανά Μοντέλα

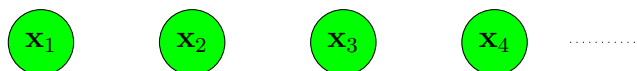
4.1 Μαρκοβιανά Μοντέλα

Ο απλούστερος τρόπος να διαχειριστούμε διαδοχικά δεδομένα, θα ήταν απλώς να θεωρήσουμε ότι είναι ανεξάρτητα και ισόνομα, όπως στο Σχήμα 4.1. Αυτή η προσέγγιση όμως αδυνατεί να ερμηνεύσει ορισμένες ιδιότητες, όπως συσχετίσεις μεταξύ παρατηρήσεων που είναι κοντά στην ακολουθία. Έστω για παράδειγμα ότι έχουμε μια δίτιμη τ.μ. που μας δείχνει εάν έβρεξε μια συγκεκριμένη μέρα. Δοθείσης μιας χρονοσειράς προσφάτων παρατηρήσεων της μεταβλητής, θέλουμε να προβλέψουμε εάν θα βρέξει την επόμενη μέρα. Εάν υποθέσουμε ότι τα δεδομένα είναι ανεξάρτητα και ισόνομα καταναμημένα, τότε η μόνη πληροφορία που μπορούμε να αποκτήσουμε από τα δεδομένα είναι το ποσοστό των βροχερών ημερών. Στην πράξη βέβαια, γνωρίζουμε ότι συχνά οι καιρικές συνθήκες μπορεί να παραμείνουν ίδιες για αρκετές ημέρες. Παρατηρώντας εάν βρέχει σήμερα ή όχι, μας δίνεται μια σημαντική πληροφορία για το εάν θα βρέξει αύριο.

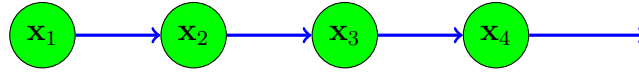
Θα πρέπει επομένως να χαλαρώσουμε την υπόθεση ανεξαρτησίας και ισονομίας. Ένας τρόπος για να γίνει αυτό είναι να θεωρήσουμε ένα *Μαρκοβιανό μοντέλο*. Στη γενική περίπτωση, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον κανόνα γινομένου για την από κοινού πιθανότητα μιας ακολουθίας παρατηρήσεων και να πάρουμε

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = p(\mathbf{x}_1) \prod_{n=2}^N p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}). \quad (4.1)$$

Εάν υποθέσουμε ότι καθεμία από τις δεσμευμένες πιθανότητες που βρίσκονται στη δεξιά πλευρά της ισότητας εξαρτάται μόνο από την πιο πρόσφατη παρατήρηση, παίρνουμε τη *Μαρκοβιανή αλυσίδα πρώτης τάξης*, η οποία φαίνεται γραφικά στο Σχήμα 4.2. Η από κοινού πιθανότητα μιας



Σχήμα 4.1: Μια ακολουθία από ανεξάρτητες και ισόνομες παρατηρήσεις.



Σχήμα 4.2: Μια Μαρκοβιανή αλυσίδα πρώτης τάξης των παρατηρήσεων $\{\mathbf{x}_n\}$.

ακολουθίας N παρατηρήσεων αυτού του μοντέλου δίνεται από

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = p(\mathbf{x}_1) \prod_{n=2}^N p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}). \quad (4.2)$$

Πράγματι, από το κριτήριο δ -διαχωρισμού βλέπουμε ότι κάθε μονοπάτι από οποιονδήποτε από τους κόμβους $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-2}$ προς τον κόμβο \mathbf{x}_n περνάει από τον κόμβο \mathbf{x}_{n-1} ο οποίος παρατηρείται. Επειδή όλα αυτά τα μονοπάτια είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{x}_{n-1} , ισχύει η δεσμευμένη ανεξαρτησία και παίρνουμε

$$p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) = p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}). \quad (4.3)$$

Άρα αν χρησιμοποιήσουμε αυτό το μοντέλο για να προβλέψουμε την επόμενη παρατήρηση μιας ακολουθίας, η κατανομή πρόβλεψης θα εξαρτάται μόνο από την πιο πρόσφατη παρατήρηση και θα είναι ανεξάρτητη από όλες τις προηγούμενες. Στις περισσότερες εφαρμογές αυτών των μοντέλων, τις πιθανότητες $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1})$ θα τις θεωρούμε σταθερές και το μοντέλο αυτό λέγεται ομογενής μαρκοβιανή αλυσίδα.

Αν και αυτό είναι πιο γενικό από το μοντέλο των ανεξάρτητων παρατηρήσεων, είναι πάλι περιοριστικό. Σε πολλές περιπτώσεις δεδομένων, οι επιρροές αρκετών διαδοχικών παρατηρήσεων θα μας παρέχουν σημαντική πληροφορία για να προβλέψουμε την επόμενη τιμή. Ένας τρόπος που επιτρέπει παλαιότερες παρατηρήσεις να έχουν επιρροή, είναι να χρησιμοποιήσουμε μαρκοβιανές αλυσίδες υψηλότερης τάξης. Στο Σχήμα 4.3, απεικονίζεται ένα μαρκοβιανό μοντέλο δεύτερης τάξης. Χρησιμοποιώντας δ -διαχωρισμό, βλέπουμε ότι κάθε μετάβαση από οποιονδήποτε από τους κόμβους $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-3}$ προς τον κόμβο \mathbf{x}_n περνάει από τον κόμβους \mathbf{x}_{n-2} και \mathbf{x}_{n-1} οι οποίοι παρατηρούνται. Επειδή όλα αυτά τα μονοπάτια είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς τους κόμβους \mathbf{x}_{n-2} και \mathbf{x}_{n-1} , ισχύει ότι η δεσμευμένη κατανομή της \mathbf{x}_n δοθέντων των \mathbf{x}_{n-1} και \mathbf{x}_{n-2} είναι ανεξάρτητη από τις παρατηρήσεις $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-3}$. Η από κοινού κατανομή επομένως δίνεται από

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = p(\mathbf{x}_1) p(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) \prod_{n=3}^N p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_{n-2}). \quad (4.4)$$

Μπορούμε παρομοίως να κάνουμε γενίκευση, για να πάρουμε μια μαρκοβιακή αλυσίδα M -τάξης, όπου η δεσμευμένη πιθανότητα μιας μεταβλητής εξαρτάται από τις M προηγούμενες μεταβλητές.

Ας υποθέσουμε ότι οι παρατηρήσεις είναι διακριτές τ.μ. που έχουν K διαφορετικές τιμές. Τότε η δεσμευμένη πιθανότητα $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1})$ ενός μαρκοβιανού μοντέλου πρώτης τάξης προσδιορίζεται από $K - 1$ παραμέτρους για καθεμία από τις K καταστάσεις της \mathbf{x}_{n-1} , δηλαδή συνολικά από $K(K - 1)$ παραμέτρους. Στην περίπτωση ενός μαρκοβιανού μοντέλου M -τάξης, αν οι μεταβλητές είναι διακριτές και αν οι δεσμευμένες πιθανότητες αναπαριστώνται από γενικευμένους πίνακες δεσμευμένης πιθανότητας, τότε το μοντέλο θα έχει συνολικά $K^M(K - 1)$ παραμέτρους,

άρα ο αριθμός τους αυξάνεται εκθετικά ως προς M και επομένως το μοντέλο θα είναι μη διαχειρήσιμο για μεγάλες τιμές του M .

Για συνεχείς τ.μ., μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε γραμμικές και κανονικές κατανομές στις οποίες κάθε κόμβος έχει κανονική κατανομή, με μέση τιμή που είναι γραμμική συνάρτηση των γονέων του κόμβου. Αυτό είναι γνωστό ως ένα αυτοπαλίνδρομο μοντέλο ή αλλιώς ως AR (*autoregressive*) μοντέλο.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε ένα μοντέλο για ακολουθίες που δεν περιορίζεται από τη μαρκοβιανή ιδιότητα οποιασδήποτε τάξης και ταυτόχρονα μπορεί να προσδιοριστεί από ένα μικρό αριθμό ελεύθερων παραμέτρων. Για να το πετύχουμε αυτό, μπορούμε να εισάγουμε επιπρόσθετες λανθάνουσες μεταβλητές, και έτσι χρησιμοποιώντας απλά στοιχεία μπορούμε να κατασκευάσουμε ένα ευρύ σύνολο μοντέλων, όπως κάναμε με τη μίξη κατανομών. Σε κάθε παρατήρηση \mathbf{x}_n αντιστοιχίζουμε μια λανθάνουσα μεταβλητή \mathbf{z}_n που μπορεί να είναι διαφορετικού τύπου ή διάστασης από την παρατηρήσιμη μεταβλητή. Αυτή τη φορά υποθέτουμε ότι είναι οι λανθάνουσες μεταβλητές αυτές που δημιουργούν μια μαρκοβιανή αλυσίδα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.4. Παρατηρήστε ότι αν δεσμεύσουμε στη \mathbf{z}_n , η μετάβαση από τη \mathbf{z}_{n-1} στη \mathbf{z}_{n+1} είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς τη \mathbf{z}_n και επομένως από το κριτήριο δ-διαχωρισμού

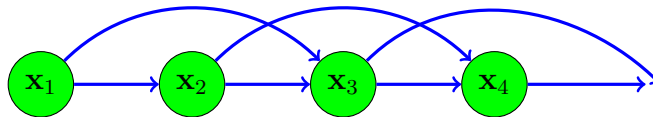
$$\mathbf{z}_{n+1} \perp\!\!\!\perp \mathbf{z}_{n-1} \mid \mathbf{z}_n. \quad (4.5)$$

Η από κοινού πιθανότητα του μοντέλου δίνεται από

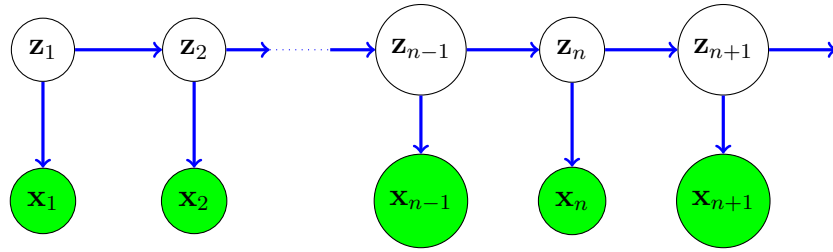
$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) = p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{n=2}^N p(\mathbf{z}_n \mid \mathbf{z}_{n-1}) \right] \prod_{n=1}^N p(\mathbf{x}_n \mid \mathbf{z}_n). \quad (4.6)$$

Χρησιμοποιώντας ξανά το κριτήριο δ-διαχωρισμού, βλέπουμε ότι υπάρχει πάντα ένα μονοπάτι που συνδέει οποιοσδήποτε δύο μεταβλητές \mathbf{x}_n και \mathbf{x}_m , και το μονοπάτι αυτό δεν είναι μπλοκαρισμένο. Άρα η κατανομή πρόβλεψης $p(\mathbf{x}_{n+1} \mid \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ δε διαθέτει καμία ιδιότητα δεσμευμένης ανεξαρτησίας, και συνεπώς η πρόβλεψη για τη \mathbf{x}_{n+1} εξαρτάται από όλες τις προηγούμενες παρατηρήσεις. Για τον ίδιο λόγο, η κατανομή $p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ των παρατηρηθέντων δεδομένων του Σχήματος 4.4 δεν ικανοποιεί κάποια ιδιότητα δεσμευμένης ανεξαρτησίας, και επομένως καμία μαρκοβιανή ιδιότητα οποιασδήποτε τάξης.

Υπάρχουν δύο ευρέως διαδεδομένα μοντέλα για ακολουθίες δεδομένων που περιγράφονται από το γράφο του Σχήματος 4.4. Αν οι λανθάνουσες μεταβλητές είναι διακριτές, τότε παίρνουμε το *κρυμμένο μαρκοβιανό μοντέλο* ή *KMM* (Elliott, 1995). Οι παρατηρήσιμες μεταβλητές ενός KMM μπορούν να είναι διακριτές ή συνεχείς. Εάν και οι λανθάνουσες και οι παρατηρήσιμες μεταβλητές είναι κανονικές (με γραμμική και κανονική εξάρτηση των δεσμευμένων κατανομών σε σχέση με τις μεταβλητές που είναι γονείς), τότε παίρνουμε το *γραμμικό δυναμικό σύστημα*.



Σχήμα 4.3: Μια Μαρκοβιανή αλυσίδα δεύτερης τάξης των παρατηρήσεων $\{\mathbf{x}_n\}$.



Σχήμα 4.4: Αυτό το σημαντικό γραφικό μοντέλο αναπαριστά τόσο τα κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα όσο και τα γραμμικά δυναμικά συστήματα.

4.2 Κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα

Τα κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα μπορούν να θεωρηθούν ειδική περίπτωση του Σχήματος 4.4, όπου οι λανθάνουσες μεταβλητές είναι διακριτές. Εντούτοις, αν παρατηρήσουμε ένα στιγμιότυπο του μοντέλου, βλέπουμε ότι μπορεί να θεωρηθεί ως κατανομή μίξης, με πυκνότητα κάθε στοιχείου μίξης ίση με $p(\mathbf{x}|\mathbf{z})$. Μπορεί επίσης να ερμηνευθεί σαν μια γενίκευση του μοντέλου μίξης, στην οποία η επιλογή του στοιχείου μίξης για κάθε παρατήρηση δεν γίνεται ανεξάρτητα, αλλά εξαρτάται από την επιλογή του στοιχείου μίξης της προηγούμενης παρατήρησης. Τα KMM εφαρμόζονται πολύ συχνά σε τομείς όπως η αναγνώριση ομιλίας, η χημεία, η ανάλυση ακολουθιών στη βιολογία όπως οι πρωτεΐνες και το DNA κ.ά.

Όπως στην περίπτωση ενός μοντέλου μίξης, οι λανθάνουσες διακριτές μεταβλητές \mathbf{z} είναι πολυωνυμικές και μας περιγράφουν ποιος από τους παράγοντες μίξης είναι υπεύθυνος για την παραγωγή της αντίστοιχης παρατήρησης \mathbf{x} . Αυτή τη φορά επιτρέπουμε στην κατανομή του \mathbf{z}_n να εξαρτάται από την κατάσταση της προηγούμενης μεταβλητής \mathbf{z}_{n-1} μέσω της δεσμευμένης πιθανότητας $p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1})$. Επειδή οι λανθάνουσες μεταβλητές είναι K -διάστατες και δίτιμες, αυτή η δεσμευμένη κατανομή αντιστοιχεί σε έναν πίνακα που συμβολίζουμε με \mathbf{A} , τα στοιχεία του οποίου είναι γνωστά ως πιθανότητες μετάβασης και συμβολίζονται με $A_{jk} \equiv p(z_{nk} = 1 | z_{n-1,j} = 1)$. Επειδή πρόκειται για πιθανότητες, ικανοποιούν τις σχέσεις $0 \leq A_{jk} \leq 1$ και $\sum_k A_{jk} = 1$, και συνεπώς ο πίνακας \mathbf{A} έχει $K(K-1)$ ανεξάρτητες παραμέτρους. Από τα παραπάνω, μπορούμε να γράψουμε τη δεσμευμένη πιθανότητα στη μορφή

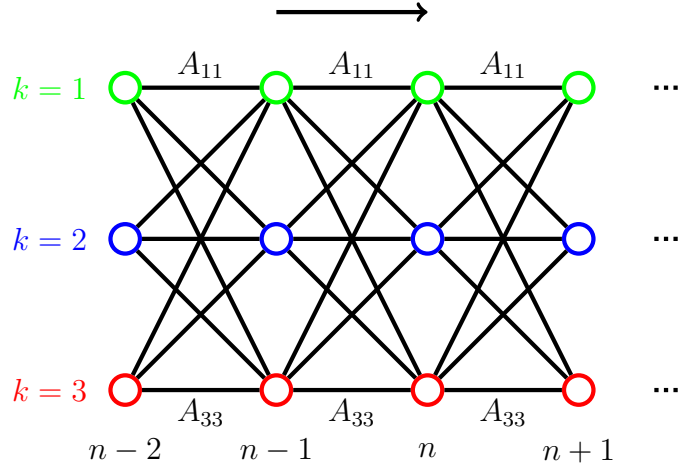
$$p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{A}) = \prod_{k=1}^K \prod_{j=1}^K A_{jk}^{z_{n-1,j} z_{nk}}. \quad (4.7)$$

Μπορούμε να αναπαραστήσουμε τον πίνακα μετάβασης χρησιμοποιώντας το διάγραμμα του Σχήματος 4.5.

Η αρχική λανθάνουσα μεταβλητή \mathbf{z}_1 είναι ιδιαίτερη, επειδή δεν έχει κάποιον κόμβο-γονέα. Η περιθώρια πιθανότητά της δίνεται από ένα διάνυσμα πιθανοτήτων $\boldsymbol{\pi}$ με συντεταγμένες $\pi_k \equiv p(z_{1k} = 1)$, και επομένως

$$p(\mathbf{z}_1|\boldsymbol{\pi}) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{z_{1k}} \quad (4.8)$$

όπου $\sum_k \pi_k = 1$.



Σχήμα 4.5: Διάγραμμα που αναπαριστά τον πίνακα μετάβασης \mathbf{A} . Κάθε στήλη του διαγράμματος αντιστοιχεί σε μία από τις λανθάνουσες μεταβλητές \mathbf{z}_n .

Για να προσδιοριστεί πλήρως το πιθανοθεωρητικό μοντέλο πρέπει να ορίσουμε τις δεσμευμένες πιθανότητες των παρατηρηθέντων μεταβλητών $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n, \boldsymbol{\phi})$, όπου το $\boldsymbol{\phi}$ είναι ένα σύνολο από παραμέτρους που ρυθμίζουν την κατανομή. Οι πιθανότητες αυτές αποκαλούνται *πιθανότητες εκπομπής* και θα μπορούσαν να δίνονται είτε από πίνακες δεσμευμένης πιθανότητας εάν τα στοιχεία του \mathbf{x} είναι διακριτές μεταβλητές, είτε για παράδειγμα από κανονικές της μορφής (3.9) εάν το \mathbf{x} αποτελείται από συνεχείς μεταβλητές. Επειδή η \mathbf{x}_n παρατηρείται, η πιθανότητα $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n, \boldsymbol{\phi})$ αποτελείται για μια δεδομένη τιμή του $\boldsymbol{\phi}$ από ένα διάνυσμα K αριθμών, που αντιστοιχούν στις K δυνατές τιμές του διανύσματος \mathbf{z}_n . Μπορούμε να γράψουμε τις πιθανότητες εκπομπής ως εξής

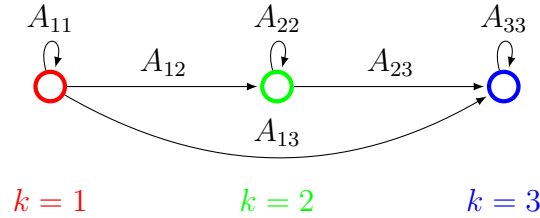
$$p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n, \boldsymbol{\phi}) = \prod_{k=1}^K p(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\phi}_k)^{z_{nk}}. \quad (4.9)$$

Θα επικεντρωθούμε σε *ομογενή* μοντέλα, στα οποία όλες οι δεσμευμένες πιθανότητες των λανθάνουσών μεταβλητών καθορίζονται από τις ίδιες παραμέτρους \mathbf{A} και οι πιθανότητες εκπομπής καθορίζονται από τις ίδιες παραμέτρους $\boldsymbol{\phi}$. Όταν έχουμε ένα σύνολο από ανεξάρτητα και ισόνομα δεδομένα, οι παράμετροι A_{jk} είναι ίδιες για όλες τις τιμές του j , ώστε πράγματι η δεσμευμένη πιθανότητα $p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1})$ να είναι ανεξάρτητη από τη \mathbf{z}_{n-1} . Αυτό σημαίνει ότι στο γράφο του Σχήματος 4.4, διαγράφουμε τους οριζόντιους συνδέσμους.

Η από κοινού πιθανότητα όλων των μεταβλητών δίνεται από

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{z}_1 | \boldsymbol{\pi}) \left[\prod_{n=2}^N p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{A}) \right] \prod_{m=1}^N p(\mathbf{x}_m | \mathbf{z}_m, \boldsymbol{\phi}) \quad (4.10)$$

όπου $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, $\mathbf{Z} = \{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N\}$, και το $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\phi}\}$ είναι το σύνολο όλων των παραμέτρων που ρυθμίζουν το μοντέλο. Αυτά που θα αναπτύξουμε στη συνέχεια σε σχέση με τα κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα, θα είναι κατά κύριο λόγο ανεξάρτητα από την επιλογή των πιθανοτήτων εκπομπής. Δηλαδή το μοντέλο είναι εύκολα διαχειρίσιμο για ένα μεγάλο εύρος πιθανοτήτων εκπομπής, όπως διακριτοί πίνακες, κανονικές και μίξη κανονικών κ.τ.λ.



Σχήμα 4.6: Διάγραμμα μετάβασης ενός αριστερά-προς-δεξιά KMM με 3 καταστάσεις.

Ας δούμε τώρα στην πράξη πώς λειτουργεί ένα κρυμμένο μαρκοβιανό μοντέλο. Όταν θέλαμε να δημιουργήσουμε δείγματα από μίξη κανονικών, αρχικά διαλέγαμε τυχαία μία από τις συνιστώσες μίξης με πιθανότητα ίση με π_k και ύστερα παρηγάγαμε ένα δειγματικό διάνυσμα \mathbf{x} από την συνιστώσα αυτή. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται N φορές και δημιουργείται ένα σύνολο δεδομένων από N ανεξάρτητα δείγματα. Παρομοίως στα κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα, αρχικά διαλέγουμε μια τιμή για τη μεταβλητή \mathbf{z}_1 , έστω τη j , με βάση το διάνυσμα πιθανοτήτων $\boldsymbol{\pi}$ και μετά παίρνουμε τη δειγματική τιμή της παρατήρησης \mathbf{x}_1 . Εν συνεχεία διαλέγουμε την τιμή της μεταβλητής \mathbf{z}_2 , έστω την k , με πιθανότητα ίση με A_{jk} για $k = 1, \dots, K$. Μόλις μάθουμε την τιμή της \mathbf{z}_2 μπορούμε να πάρουμε δειγματική τιμή για τη \mathbf{x}_2 , αλλά και για την επόμενη λανθάνουσα μεταβλητή \mathbf{z}_3 κ.ο.κ.

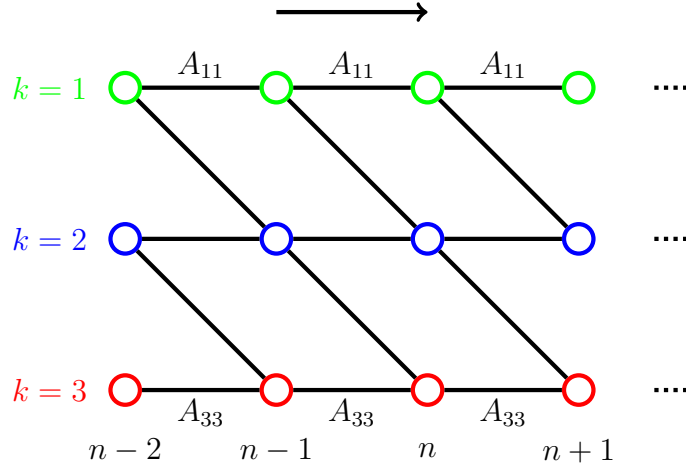
Υπάρχουν πολλές παραλλαγές του κλασικού KMM, που προκύπτουν για παράδειγμα επιβάλλοντας περιορισμούς στη μορφή του πίνακα μετάβασης \mathbf{A} . Για παράδειγμα το αριστερά-προς-δεξιά KMM προκύπτει θέτοντας τα στοιχεία A_{jk} του πίνακα πιθανοτήτων μετάβασης ίσα με μηδέν για $k < j$, όπως απεικονίζεται στο διάγραμμα του Σχήματος 4.6. Συνήθως σε αυτά τα μοντέλα κάθε ακολουθία κατασκευάζεται ώστε να ξεκινάει από την κατάσταση $j = 1$. Μπορούμε επίσης να κατασκευάσουμε τον πίνακα μετάβασης ώστε να μην συμβαίνουν μεγάλες αλλαγές στην τιμή της λανθάνουσας μεταβλητής, θέτοντας $A_{jk} = 0$ για $k > j + \Delta$. Αυτό το είδος μοντέλου παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.7.

4.3 Τρία βασικά προβλήματα και δύο υποθέσεις

Για να εφαρμόσουμε τα KMM, υπάρχουν τρία θεμελιώδη προβλήματα που πρέπει να λύσουμε:

1. Δοθέντων των παρατηρήσεων $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, πώς θα εκτιμήσουμε τις παραμέτρους $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\phi}\}$ του KMM ;
2. Δοθέντων των παραμέτρων ενός KMM $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\phi}\}$, ποια είναι η πιθανότητα μιας συγκεκριμένης ακολουθίας παρατηρήσεων ; Δηλαδή πώς υπολογίζουμε την $p(\mathbf{X}|\boldsymbol{\theta})$;
3. Δοθείσης της ακολουθίας παρατηρήσεων $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, πώς θα προσδιορίσουμε την αντίστοιχη ακολουθία $\mathbf{Z} = \{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N\}$;

Για να είμαστε πάντα σε θέση να αντιμετωπίζουμε τα παραπάνω προβλήματα, πρέπει να κάνουμε δύο βασικές υποθέσεις για τα KMM, οι οποίες όντως προκύπτουν από την κατασκευή τους που περιγράψαμε προηγουμένως:



Σχήμα 4.7: Διάγραμμα ενός αριστερά-προς-δεξιά ΚΜΜ τριών καταστάσεων, όπου η τιμή της λανθάνουσας μεταβλητής επιτρέπεται να αυξηθεί το πολύ κατά 1 σε κάθε μετάβαση.

1. **Μαρκοβιανή υπόθεση:** Για κάθε χρονική στιγμή n , η πιθανότητα παραγωγής της επόμενης τιμής της λανθάνουσας μεταβλητής εξαρτάται μόνο από την παρούσα τιμή, δηλαδή

$$p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}). \quad (4.11)$$

2. **Υπόθεση ανεξαρτησίας:** Η πιθανότητα της τιμής της τρέχουσας παρατήρησης εξαρτάται μόνο από την τρέχουσα τιμή της λανθάνουσας μεταβλητής. Η υπόθεση αυτή έχει ως αποτέλεσμα την εξής ισότητα

$$p(\mathbf{X} | \mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{n=1}^N p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n, \boldsymbol{\theta}). \quad (4.12)$$

4.4 Μέγιστη πιθανοφάνεια για τα ΚΜΜ

Έχοντας στη διάθεσή μας ένα σύνολο δεδομένων $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, μπορούμε να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους ενός ΚΜΜ χρησιμοποιώντας μέγιστη πιθανοφάνεια. Η συνάρτηση πιθανοφάνειας προκύπτει από την από κοινού πιθανότητα (4.2) αθροίζοντας ως προς τις λανθάνουσες μεταβλητές

$$p(\mathbf{X} | \boldsymbol{\theta}) = \sum_{\mathbf{Z}} p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}). \quad (4.13)$$

Επειδή η από κοινού πιθανότητα $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta})$ δεν παραγοντοποιείται ως προς n (εν αντιθέσει με την κατανομή μίξης που είδαμε στο κεφάλαιο του αλγορίθμου EM) δε μπορούμε να αντιμετωπίσουμε καθένα από τα αθροίσματα ως προς \mathbf{z}_n ανεξάρτητα. Ούτε μπορούμε να πραγματοποιήσουμε τα αθροίσματα αναλυτικά γιατί υπάρχουν N μεταβλητές προς άθροιση, καθεμία από τις οποίες έχει K τιμές, δηλαδή συνολικά K^N όροι. Αυτό σημαίνει ότι ο αριθμός των όρων του αθροίσματος αυξάνεται εκθετικά ως προς το μήκος της αλυσίδας. Συνεπώς το άθροισμα στη σχέση (4.13)

αντιστοιχεί σε άθροισμα εκθετικού το πλήθος αριθμού μονοπατιών στο διάγραμμα του Σχήματος 4.5.

Μια επιπλέον δυσκολία με την έκφραση (4.13) της συνάρτησης πιθανοφάνειας είναι το ότι συνιστά γενίκευση μιας κατανομής μίξης. Επομένως απευθείας μεγιστοποίηση της συνάρτησης πιθανοφάνειας οδηγεί σε πολύπλοκες εκφράσεις με λύσεις σε μη κλειστή μορφή, όπως στην περίπτωση των απλών μοντέλων μίξης, μιας και τα μοντέλα μίξης για ανεξάρτητα και ισόνομα δεδομένα είναι ειδική περίπτωση των KMM.

Θα στραφούμε λοιπόν στον αλγόριθμο EM για να βρούμε μια αποτελεσματική μέθοδο μεγιστοποίησης της συνάρτησης πιθανοφάνειας των KMM. Ο αλγόριθμος ξεκινά με μια αρχική επιλογή των παραμέτρων του μοντέλου, που συμβολίζουμε με θ^{old} . Στο E βήμα, παίρνουμε αυτές τις τιμές των παραμέτρων και βρίσκουμε την εκ των υστέρων πιθανότητα των λανθανουσών μεταβλητών $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \theta^{\text{old}})$. Έπειτα χρησιμοποιούμε αυτή την πιθανότητα για να υπολογίσουμε τη μέση τιμή του λογαρίθμου της συνάρτησης πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων, ως συνάρτηση των παραμέτρων θ , για να πάρουμε τη συνάρτηση $Q(\theta, \theta^{\text{old}})$ που ορίζεται από

$$Q(\theta, \theta^{\text{old}}) = \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{z}|\mathbf{X}, \theta^{\text{old}}) \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{z}|\theta). \quad (4.14)$$

Θα δώσουμε τώρα κάποιους επιπλέον ορισμούς. Συμβολίζουμε με $\gamma(\mathbf{z}_n)$ την εκ των υστέρων περιθώρια κατανομή της λανθάνουσας μεταβλητής \mathbf{z}_n , που είναι ένα $K \times 1$ διάνυσμα, και με $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$ την εκ των υστέρων από κοινού κατανομή δυο διαδοχικών λανθανουσών μεταβλητών, που είναι ένας $K \times K$ πίνακας, οπότε

$$\gamma(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}, \theta^{\text{old}}) \quad (4.15)$$

$$\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n|\mathbf{X}, \theta^{\text{old}}). \quad (4.16)$$

Ανάλογα, με $\gamma(z_{nk})$ συμβολίζουμε τη δεσμευμένη πιθανότητα του $z_{nk} = 1$, και με $\xi(z_{n-1,j}, z_{nk})$ τη δεσμευμένη πιθανότητα του $(z_{n-1,j}, z_{nk}) = (1, 1)$. Επειδή η μέση τιμή των δίτιμων μεταβλητών z_{nk} είναι απλά η πιθανότητά τους να πάρουν την τιμή 1, έχουμε

$$\gamma(z_{nk}) = \mathbb{E}[z_{nk}] = \sum_{\mathbf{z}_n} \gamma(\mathbf{z}_n) z_{nk} \quad (4.17)$$

$$\xi(z_{n-1,j}, z_{nk}) = \mathbb{E}[z_{n-1,j}, z_{nk}] = \sum_{\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n} \xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) z_{n-1,j} z_{nk}. \quad (4.18)$$

Αντικαθιστώντας την από κοινού κατανομή του KMM στην (4.14) και κάνοντας χρήση των ορισμών των γ και ξ παίρνουμε

$$Q(\theta, \theta^{\text{old}}) = \sum_{k=1}^K \gamma(z_{1k}) \ln \pi_k + \sum_{n=2}^N \sum_{j=1}^K \sum_{k=1}^K \xi(z_{n-1,j}, z_{nk}) \ln A_{jk} + \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \gamma(z_{nk}) \ln p(\mathbf{x}_n|\phi_k) \quad (4.19)$$

Στο E βήμα θα υπολογίσουμε τις ποσότητες $\gamma(\mathbf{z}_n)$ και $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$, κάτι που θα μελετήσουμε αργότερα. Στο M βήμα μεγιστοποιούμε την $Q(\theta, \theta^{\text{old}})$ ως προς τις παραμέτρους $\theta = \{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\phi}\}$, θεωρώντας τις ποσότητες $\gamma(\mathbf{z}_n)$ και $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$ ως σταθερές.

Ας δούμε κατ' αρχάς πώς γίνεται μεγιστοποίηση ως προς το $\boldsymbol{\pi}$. Κάνοντας χρήση ενός πολλαπλασιαστή Lagrange, έχουμε τα εξής:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \pi_k} \left(\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) + \lambda \left(\sum_{j=1}^K \pi_j - 1 \right) \right) = 0 \\
& \Rightarrow \frac{\gamma(z_{1k})}{\pi_k} + \lambda = 0 \\
& \Rightarrow \sum_j \gamma(z_{1j}) + \sum_j \lambda \pi_j = 1 + \lambda = 0 \Rightarrow \lambda = -1 \\
& \Rightarrow \frac{\gamma(z_{1k})}{\pi_k} = 1 \Rightarrow \pi_k = \frac{\gamma(z_{1k})}{1} = \frac{\gamma(z_{1k})}{\sum_{j=1}^K \gamma(z_{1j})}.
\end{aligned}$$

Ας μεγιστοποιήσουμε τώρα ως προς τον πίνακα \mathbf{A} . Ξανά θα χρησιμοποιήσουμε πολλαπλασιαστική Lagrange για να πάρουμε:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial A_{jk}} \left(\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) + \lambda \left(\sum_{l=1}^K A_{jl} - 1 \right) \right) = 0 \\
& \Rightarrow \sum_{n=2}^N \frac{\xi(z_{n-1,j}, z_{nk})}{A_{jk}} + \lambda = 0 \Rightarrow \sum_{n=2}^N \xi(z_{n-1,j}, z_{nk}) + \lambda A_{jk} = 0 \quad (*) \\
& \Rightarrow \sum_{n=2}^N \sum_{j=1}^K \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}, z_{nl}) + \lambda \sum_{j=1}^K \sum_{l=1}^K A_{jl} = N - 1 + \lambda K = 0 \Rightarrow \lambda = -\frac{N-1}{K}
\end{aligned}$$

Οπότε επιστρέφοντας στην (*) παίρνουμε

$$A_{jk} = \frac{K}{N-1} \sum_{n=2}^N \xi(z_{n-1,j}, z_{nk}). \quad (**)$$

Πάλι λόγω της (*) και αθροίζοντας τα δύο μέλη ως προς k παίρνουμε

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}, z_{nl}) + \lambda \sum_{l=1}^K A_{jl} = \sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}, z_{nl}) + \lambda = 0 \\
& \Rightarrow \sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}, z_{nl}) = \frac{N-1}{K}.
\end{aligned}$$

Αν τώρα αντικαταστήσουμε στην (**) θα πάρουμε

$$A_{jk} = \frac{\sum_{n=2}^N \xi(z_{n-1,j}, z_{nk})}{\sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}, z_{nl})}.$$

Ο αλγόριθμος EM για να ξεκινήσει, θα πρέπει να ορίσουμε αρχικές τιμές για τις παραμέτρους $\boldsymbol{\pi}$ και \mathbf{A} , τέτοιες ώστε συν τοις άλλοις να ικανοποιούν τους περιορισμούς άθροισης στη μονάδα που έχει καθενμία από τις παραμέτρους αυτές. Οποιαδήποτε από τις συνιστώσες των $\boldsymbol{\pi}$ και \mathbf{A} θέσουμε ίση με το μηδέν, αυτή θα παραμείνει μηδέν και στις επόμενες επαναλήψεις του EM. Πράγματι, έστω $\pi_k^{(1)} = p^{(1)}(z_{1k} = 1) = 0$. Τότε στο E βήμα υπολογίζουμε το διάνυσμα $\gamma^{(2)}(\mathbf{z}_1)$, από το οποίο θα πάρουμε $\gamma^{(2)}(z_{1k}) = 0$, γιατί αποκλείεται το ενδεχόμενο $\{z_{1k} = 1 | \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^1\}$. Στο M βήμα θα πάρουμε

$$\pi_k^{(2)} = \frac{\gamma^{(2)}(z_{1k})}{\sum_j \gamma^{(2)}(z_{1j})} = 0 \quad (4.20)$$

όπως επίσης και σε κάθε επόμενη επανάληψη. Έστω τώρα $A_{jk}^{(1)} = 0$. Στο E βήμα υπολογίζουμε τους πίνακες $\xi^{(2)}(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$ από τους οποίους θα πάρουμε $\xi^{(2)}(z_{n-1,j}, z_{nk}) = 0, \forall n = 2, \dots, N$. Συνεπώς στο M βήμα έχουμε

$$A_{jk}^{(2)} = \frac{\sum_{n=2}^N \xi^{(2)}(z_{n-1,j}, z_{nk})}{\sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi^{(2)}(z_{n-1,j}, z_{nl})} = 0 \quad (4.21)$$

όπως επίσης και σε κάθε επόμενη επανάληψη.

Για να μεγιστοποιήσουμε την $\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$ ως προς $\boldsymbol{\phi}_k$, βλέπουμε ότι μόνον ο τελευταίος όρος της σχέσης (4.19) εξαρτάται από το $\boldsymbol{\phi}_k$. Αν οι παράμετροι $\boldsymbol{\phi}_k$ είναι ανεξάρτητοι, τότε αυτός ο όρος μπορεί να σπάσει σε K το πλήθος αθροίσματα, ένα για κάθε τιμή του k , καθένα από τα οποία μπορεί να μεγιστοποιηθεί ανεξάρτητα. Έπειτα απλά μεγιστοποιούμε τη σταθμισμένη λογαριθμική πιθανοφάνεια για την κατανομή εκπομπής $p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\phi}_k)$ με συντελεστές στάθμισης τα $\gamma(z_{nk})$. Είναι σημαντικό να υποθέσουμε ότι αυτή η μεγιστοποίηση μπορεί να γίνει αναλυτικά.

Ας δούμε την περίπτωση όπου έχουμε κανονικές πιθανότητες εκπομπής και ας προσπαθήσουμε να μεγιστοποιήσουμε τη συνάρτηση $\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$ ως προς τις παραμέτρους $\boldsymbol{\mu}_k$ και $\boldsymbol{\Sigma}_k$.

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &\propto \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \ln p(\mathbf{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \gamma(z_{nk}) \\ &= \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(-\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k| - \frac{1}{2} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) \right) \gamma(z_{nk}) \\ &= \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(-\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k| - \frac{1}{2} \mathbf{x}_n^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{x}_n + \frac{1}{2} \mathbf{x}_n^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k + \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_k^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{x}_n - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_k^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k \right) \gamma(z_{nk}). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} = \mathbf{0} &\Rightarrow \sum_{n=1}^N \left(-\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{x}_n + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k \right) \gamma(z_{nk}) = \mathbf{0} \\
&\Rightarrow \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) = \mathbf{0} \Rightarrow \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n = \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \boldsymbol{\mu}_k \\
&\Rightarrow \boldsymbol{\mu}_k = \frac{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n}{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk})}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &\propto \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(-\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k| - \frac{1}{2} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) \right) \gamma(z_{nk}) \\
&= \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}| - \frac{1}{2} \text{tr}[(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)] \right) \gamma(z_{nk}) \\
&= \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}| - \frac{1}{2} \text{tr}[\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T] \right) \gamma(z_{nk}).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}} = \mathbf{0} &\Rightarrow \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}_k - \frac{1}{2} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \right) \gamma(z_{nk}) = \mathbf{0} \\
&\Rightarrow \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \boldsymbol{\Sigma}_k = \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \gamma(z_{nk}) \\
&\Rightarrow \boldsymbol{\Sigma}_k = \frac{\sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \gamma(z_{nk})}{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk})}.
\end{aligned}$$

Ας δούμε μια ακόμα περίπτωση, όπου υποθέτουμε ότι κατανομή εκπομπής είναι η πολυωνυμική με D δυνατές τιμές. Στόχος μας να εκτιμήσουμε τις τιμές των παραμέτρων μ_{ik} . Η δεσμευμένη συνάρτηση μάζας ισούται με

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \prod_{i=1}^D \prod_{k=1}^K \mu_{ik}^{x_i z_k}. \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &= \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \gamma(z_{nk}) \sum_{i=1}^D x_{ni} \ln(\mu_{ik}) \\
\frac{\partial}{\partial \mu_{ik}} \left(\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) + \lambda \left(\sum_{i=1}^D \mu_{ik} - 1 \right) \right) &= 0 \Rightarrow \frac{1}{\mu_{ik}} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) x_{ni} + \lambda = 0 \\
\Rightarrow \sum_{i=1}^D \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) x_{ni} + \lambda \sum_{i=1}^D \mu_{ik} &= 0 \Rightarrow \lambda = - \sum_{i=1}^D \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) x_{ni} \\
\Rightarrow \mu_{ik} &= \frac{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) x_{ni}}{\sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^D \gamma(z_{nk}) x_{ni}} = \frac{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) x_{ni}}{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk})}.
\end{aligned}$$

Ο αλγόριθμος EM απαιτεί αρχικές τιμές για τις παραμέτρους της κατανομής εκπομπής. Ένας τρόπος για να τις καθορίσουμε, είναι να θεωρήσουμε ότι τα δεδομένα είναι ανεξάρτητα και ισόνομα, και να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους με βάση τη μέγιστη πιθανοφάνεια. Οι εκτιμήσεις αυτές θα είναι οι αρχικές τιμές των παραμέτρων στον αλγόριθμο.

4.5 Επίλυση των προβλημάτων (1) και (2)

Το επόμενο πρόβλημά μας είναι να βρούμε έναν εύκολο τρόπο για να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\gamma(z_{nk})$ και $\xi(z_{n-1,j}, z_{nk})$ του βήματος του αλγορίθμου EM. Ο γράφος των KMM που φαίνεται στο Σχήμα 4.4 είναι ένα δέντρο, και συνεπώς ήδη γνωρίζουμε ότι η εκ των υστέρων πιθανότητα των λανθανουσών μεταβλητών μπορεί να υπολογιστεί μέσα από έναν διασταδιακό αλγόριθμο μετάδοσης μηνυμάτων. Ειδικότερα στην περίπτωση των KMM, αυτός είναι γνωστός ως αλγόριθμος *Baum-Welch*. Υπάρχουν πολλές παραλλαγές του βασικού αλγορίθμου, εμείς όμως θα επικεντρωθούμε στην πιο διαδεδομένη από αυτές, που είναι ο *άλφα-βήτα* αλγόριθμος.

Αξίζει να αναφερθεί ότι ο υπολογισμός των εκ των υστέρων πιθανοτήτων των λανθανουσών μεταβλητών είναι ανεξάρτητος τόσο από τη μορφή των πιθανοτήτων εκπομπής, όσο και από το αν οι παρατηρηθείσες μεταβλητές είναι διακριτές ή συνεχείς. Αυτό που χρειάζεται να γνωρίζουμε είναι τις ποσότητες $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n)$ για κάθε τιμή των \mathbf{z}_n και για κάθε n . Επίσης στα όσα ακολουθήσουν, θα παραλείψουμε την εξάρτηση επί των παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}^{\text{old}}$, διότι αυτές έχουν ήδη σταθεροποιηθεί.

Έστω $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$. Θα γράψουμε 8 ιδιότητες δεσμευμένης ανεξαρτησίας των KMM,

τις οποίες θα αποδείξουμε εφαρμόζοντας το κριτήριο δ-διαχωρισμού στο Σχήμα 4.4.

$$p(\mathbf{X}|\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n) \quad (4.23)$$

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_n) \quad (4.24)$$

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_{n-1}) \quad (4.25)$$

$$p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_{n+1}) \quad (4.26)$$

$$p(\mathbf{x}_{n+2}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{x}_{n+1}) = p(\mathbf{x}_{n+2}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_{n+1}) \quad (4.27)$$

$$p(\mathbf{X}|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_{n-1})p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n) \quad (4.28)$$

$$p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{X}, \mathbf{z}_{N+1}) = p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{z}_{N+1}) \quad (4.29)$$

$$p(\mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{z}_N, \mathbf{X}) = p(\mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{z}_N). \quad (4.30)$$

Ας αποδείξουμε τις παραπάνω σχέσεις με τη σειρά.

1. Παρατηρούμε ότι η μετάβαση οποιουδήποτε κόμβου που ανήκει στο σύνολο $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ προς το σύνολο $\{\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N\}$ περνά από τον κόμβο \mathbf{z}_n που παρατηρείται. Επειδή οι μεταβάσεις είναι είτε κεφάλι-με-ουρά είτε ουρά-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_n , ισχύει η δεσμευμένη ανεξαρτησία

$$\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \perp\!\!\!\perp \{\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N\} \mid \mathbf{z}_n. \quad (4.31)$$

2. Η μετάβαση οποιουδήποτε κόμβου που ανήκει στο $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}\}$ προς τον κόμβο \mathbf{x}_n περνά από τον παρατηρηθέντα κόμβο \mathbf{z}_n . Η μετάβαση είναι τύπου κεφάλι-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_n , άρα ισχύει

$$\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}\} \perp\!\!\!\perp \mathbf{x}_n \mid \mathbf{z}_n. \quad (4.32)$$

3. Η μετάβαση οποιουδήποτε κόμβου που ανήκει στο $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}\}$ προς τον κόμβο \mathbf{z}_n περνά από τον παρατηρηθέντα κόμβο \mathbf{z}_{n-1} . Οι μεταβάσεις είναι είτε κεφάλι-με-ουρά είτε ουρά-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_{n-1} , άρα ισχύει

$$\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}\} \perp\!\!\!\perp \mathbf{z}_n \mid \mathbf{z}_{n-1}. \quad (4.33)$$

4. Η μετάβαση οποιουδήποτε κόμβου που ανήκει στο $\{\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N\}$ προς τον κόμβο \mathbf{z}_n περνά από τον παρατηρηθέντα κόμβο \mathbf{z}_{n+1} . Η μετάβαση είναι τύπου κεφάλι-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_{n+1} , άρα ισχύει

$$\{\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N\} \perp\!\!\!\perp \mathbf{z}_n \mid \mathbf{z}_{n+1}. \quad (4.34)$$

5. Η μετάβαση οποιουδήποτε κόμβου που ανήκει στο $\{\mathbf{x}_{n+2}, \dots, \mathbf{x}_N\}$ προς τον κόμβο \mathbf{x}_{n+1} περνά από τον παρατηρηθέντα κόμβο \mathbf{z}_{n+1} . Η μετάβαση είναι τύπου ουρά-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_{n+1} , άρα ισχύει

$$\{\mathbf{x}_{n+2}, \dots, \mathbf{x}_N\} \perp\!\!\!\perp \mathbf{x}_{n+1} \mid \mathbf{z}_{n+1}. \quad (4.35)$$

6. Λόγω της ιδιότητας 1, και χρησιμοποιώντας ακριβώς αντίστοιχη επιχειρηματολογία, ισχύει η σχέση $p(\mathbf{X}|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_n, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$.

Λόγω της 3, έχουμε $p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}|\mathbf{z}_{n-1})$.

Λόγω της 4, έχουμε $p(\mathbf{x}_n, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n)$.

Λόγω της 1, έχουμε $p(\mathbf{x}_n, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n)$.

Οπότε έχουμε αποδείξει το ζητούμενο.

7. Η μετάβαση του κόμβου \mathbf{x}_{N+1} προς οποιονδήποτε κόμβο του συνόλου \mathbf{X} διέρχεται από τον παρατηρηθέντα κόμβο \mathbf{z}_{N+1} . Η μετάβαση είναι τύπου κεφάλι-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_{N+1} , άρα ισχύει

$$\mathbf{x}_{N+1} \perp\!\!\!\perp \mathbf{X} \mid \mathbf{z}_{N+1}. \quad (4.36)$$

8. Η μετάβαση από τον κόμβο \mathbf{z}_{N+1} προς οποιονδήποτε κόμβο του συνόλου \mathbf{X} διέρχεται από τον παρατηρηθέντα κόμβο \mathbf{z}_N . Οι μεταβάσεις είναι είτε κεφάλι-με-ουρά είτε ουρά-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_N , άρα ισχύει

$$\mathbf{z}_{N+1} \perp\!\!\!\perp \mathbf{X} \mid \mathbf{z}_N. \quad (4.37)$$

Οι παραπάνω σχέσεις μπορούν να αποδειχθούν και αλγεβρικά, αλλά με πολύ μεγαλύτερο υπολογιστικό κόπο, ξεκινώντας από την από κοινού πιθανότητα των KMM, και κάνοντας χρήση των κανόνων αθροίσματος και γινομένου της πιθανότητας. Θα δούμε το πώς γίνεται αυτό στις δύο πρώτες και στην τελευταία ιδιότητα.

1)

$$p(\mathbf{X}|\mathbf{z}_n) = \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{z}_n)} = \frac{1}{p(\mathbf{z}_n)} \sum_{\mathbf{z}_k: k \neq n} p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) = \frac{1}{p(\mathbf{z}_n)} \sum_{\mathbf{z}_k: k \neq n} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{n=2}^N p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}) \right] \prod_{n=1}^N p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)$$

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N|\mathbf{z}_n) &= \frac{p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{z}_n)} \frac{p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{z}_n)} \\ &= \frac{1}{p^2(\mathbf{z}_n)} \left(\sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n) \right) \left(\sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N) \right) \\ &= \frac{1}{p^2(\mathbf{z}_n)} \left(\sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^n p(\mathbf{z}_k|\mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_k) \right) \\ &\quad \left(\sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_n) \left[\prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{z}_k|\mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_k) \right) \\ &= \frac{1}{p(\mathbf{z}_n)} \sum_{\mathbf{z}_k: k \neq n} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{n=2}^N p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}) \right] \prod_{n=1}^N p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n) \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} | \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n) &= \frac{p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n)} \\
&= \frac{1}{p(\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n)} \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^n p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \\
&= \frac{1}{p(\mathbf{z}_n)} \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^n p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^{n-1} p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \\
p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} | \mathbf{z}_n) &= \frac{p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{z}_n)} \\
&= \frac{1}{p(\mathbf{z}_n)} \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^n p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^{n-1} p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k)
\end{aligned}$$

8)

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{z}_{N+1} | \mathbf{z}_N, \mathbf{X}) &= \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{z}_N, \mathbf{z}_{N+1})}{p(\mathbf{X}, \mathbf{z}_N)} \\
&= \frac{\sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{N-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^{N+1} p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k)}{\sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{N-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k)} \\
&= p(\mathbf{z}_{N+1} | \mathbf{z}_N).
\end{aligned}$$

Αν εξαιρέσουμε την ιδιότητα (8), και την ιδιότητα (7) που υπολογίζεται παρομοίως, βλέπουμε ότι το υπολογιστικό κόστος για τις υπόλοιπες ιδιότητες είναι αρκετά μεγάλο. Συνεπώς διαπιστώνουμε ότι το κριτήριο δ-διαχωρισμού αποτελεί σημαντικό εργαλείο για τη μελέτη των KMM.

Σειρά τώρα έχει ο υπολογισμός του K -διάστατου διανύσματος $\gamma(\mathbf{z}_n)$, δηλαδή της κατανομής $p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$. Λόγω του θεωρήματος Bayes έχουμε

$$\gamma(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{X}) = \frac{p(\mathbf{X} | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})}. \quad (4.38)$$

Ο παρονομαστής $p(\mathbf{X})$ είναι εμμέσως δεσμευμένος στις παραμέτρους $\boldsymbol{\theta}^{\text{old}}$ του KMM και αντιπροσωπεύει τη συνάρτηση πιθανοφάνειας. Χρησιμοποιώντας την πρώτη ιδιότητα και τον κανόνα γινομένου της πιθανότητας, παίρνουμε

$$\gamma(\mathbf{z}_n) = \frac{p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n) p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} = \frac{\alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \quad (4.39)$$

όπου έχουμε ορίσει

$$\alpha(\mathbf{z}_n) \equiv p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n) \quad (4.40)$$

$$\beta(\mathbf{z}_n) \equiv p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n). \quad (4.41)$$

Ξανά, τα διανύσματα $\alpha(\mathbf{z}_n)$ και $\beta(\mathbf{z}_n)$ έχουν K συντεταγμένες, μία για κάθε δυνατή διάταξη του διανύσματος \mathbf{z}_n . Συνεπώς $\alpha(z_{nk})$ είναι η τιμή του $\alpha(\mathbf{z}_n)$ όταν $z_{nk} = 1$, και ανάλογη ερμηνεία έχει το $\beta(z_{nk})$.

Τώρα θα παραθέσουμε αναδρομικές σχέσεις που μας επιτρέπουν να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\alpha(\mathbf{z}_n)$ και $\beta(\mathbf{z}_n)$, και ονομάζονται αντίστοιχα *εμπροσθοδρομικός* και *οπισθοδρομικός* αλγόριθμος. Αρχικά, η αναδρομική σχέση για τον υπολογισμό του $\alpha(\mathbf{z}_n)$ προκύπτει ακολούθως

$$\begin{aligned}
\alpha(\mathbf{z}_n) &= p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n) \\
&= p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n) \\
&= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n) \\
&= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \\
&= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \\
&= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_{n-1}) \\
&= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_{n-1}) \\
&= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}),
\end{aligned}$$

όπου στην τρίτη ισότητα κάναμε χρήση της δεύτερης ιδιότητας και στην έβδομη εξίσωση χρησιμοποιήσαμε την τρίτη ιδιότητα. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό του $\alpha(\mathbf{z}_n)$, παίρνουμε

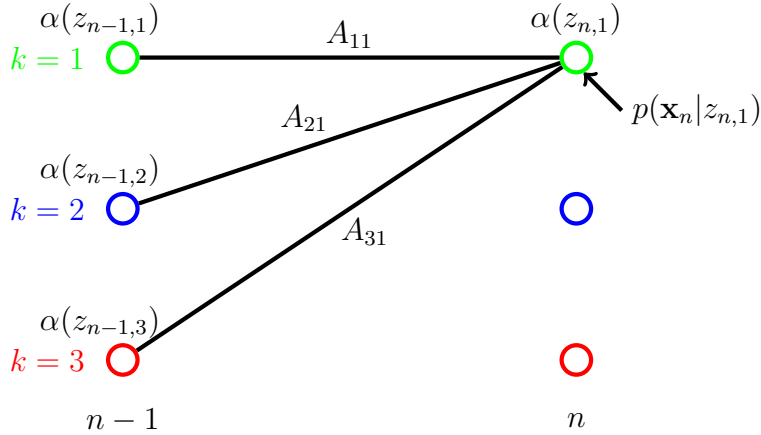
$$\alpha(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} \alpha(\mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) \quad (4.42)$$

που αναφέρεται ως εμπροσθοδρομικός αλγόριθμος. Υπάρχουν K όροι στο άθροισμα, και η δεξιά πλευρά της εξίσωσης πρέπει να υπολογιστεί για καθεμία από τις K τιμές του \mathbf{z}_n , συνεπώς ο αλγόριθμος που παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.8, έχει υπολογιστικό κόστος τάξεως $O(K^2)$.

Για να ξεκινήσει η αναδρομή, χρειαζόμαστε μια αρχική συνθήκη που δίνεται από

$$\alpha(\mathbf{z}_1) = p(\mathbf{x}_1, \mathbf{z}_1) = p(\mathbf{z}_1) p(\mathbf{x}_1 | \mathbf{z}_1) = \prod_{k=1}^K \{\pi_k p(\mathbf{x}_1 | \phi_k)\}^{z_{1k}} \quad (4.43)$$

που μας λέει ότι το $\alpha(z_{1k})$ παίρνει την τιμή $\pi_k p(\mathbf{x}_1 | \phi_k)$, για $k = 1, \dots, K$. Ουσιαστικά κάθε βήμα της αναδρομής περιλαμβάνει πολλαπλασιασμό με έναν $K \times K$ πίνακα, άρα το συνολικό κόστος για των υπολογισμό αυτών των ποσοτήτων για όλη την αλυσίδα είναι τάξης $O(K^2 N)$. Εάν θέλαμε να υπολογίσουμε απευθείας τις ποσότητες αυτές, το συνολικό κόστος θα ήταν τάξης $O(2N \times K^N)$.



Σχήμα 4.8: Παρουσίαση του εμπροσθοδρομικού αλγορίθμου για τον υπολογισμό των μεταβλητών α .

Μπορούμε παρομοίως να βρούμε αναδρομική σχέση και για τις ποσότητες $\beta(\mathbf{z}_n)$:

$$\begin{aligned}
 \beta(\mathbf{z}_n) &= p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n) \\
 &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) \\
 &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) \\
 &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) \\
 &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} p(\mathbf{x}_{n+2}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n).
 \end{aligned}$$

όπου η τέταρτη ισότητα ισχύει λόγω της τέταρτης ιδιότητας, και η πέμπτη ισότητα λόγω της πέμπτης ιδιότητας. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό του $\beta(\mathbf{z}_n)$, παίρνουμε

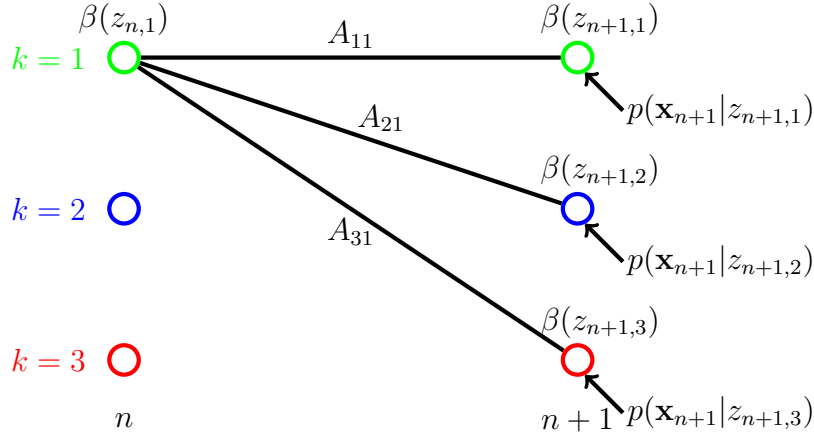
$$\beta(\mathbf{z}_n) = \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} \beta(\mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n). \quad (4.44)$$

Στην περίπτωση αυτή έχουμε τον οπισθοδρομικό αλγόριθμο που υπολογίζει το $\beta(\mathbf{z}_n)$ συναρτήσει του $\beta(\mathbf{z}_{n+1})$ και παρουσιάζεται διαγραμματικά στο Σχήμα 4.9.

Χρειαζόμαστε μια συνθήκη για το $\beta(\mathbf{z}_N)$ για να ξεκινήσει η αναδρομή. Αν θέσουμε $n = N$ στην (4.39) και αντικαταστήσουμε το $\alpha(\mathbf{z}_N)$ με τον ορισμό του, θα πάρουμε

$$p(\mathbf{z}_N | \mathbf{X}) = \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{z}_N) \beta(\mathbf{z}_N)}{p(\mathbf{X})} \quad (4.45)$$

που είναι σωστό μόνο αν πάρουμε $\beta(\mathbf{z}_{Nk}) = 1, \forall k = 1, \dots, K$.



Σχήμα 4.9: Παρουσίαση του οπισθοδρομικού αλγορίθμου για τον υπολογισμό των μεταβλητών β .

Στο M βήμα του EM η ποσότητα $p(\mathbf{X})$ θα απλοποιείται, όπως για παράδειγμα όταν κάνουμε εκτίμηση στην ποσότητα μ_k σε μιξη κανονικών, θα γίνεται

$$\mu_k = \frac{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n}{\sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk})} = \frac{\sum_{n=1}^N \alpha(z_{nk}) \beta(z_{nk}) \mathbf{x}_n}{\sum_{n=1}^N \alpha(z_{nk}) \beta(z_{nk})}. \quad (4.46)$$

Την ποσότητα $p(\mathbf{X})$ μπορούμε να την υπολογίσουμε αθροίζοντας και τις δύο πλευρές της (4.39) ως προς \mathbf{z}_n , για να πάρουμε

$$p(\mathbf{X}) = \sum_{\mathbf{z}_n} \alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n) \quad (4.47)$$

που σημαίνει ότι μπορούμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση πιθανοφάνειας για οποιαδήποτε τιμή του n . Έτσι, αν το μόνο που θέλουμε είναι να υπολογίσουμε τη συνάρτηση πιθανοφάνειας, μπορούμε να τρέξουμε τον εμπροσθοδρομικό αλγόριθμο για το α από την αρχή ως το τέλος της αλυσίδας και να χρησιμοποιήσουμε το παραπάνω αποτέλεσμα για $n = N$, μαζί με το γεγονός ότι $\beta(z_{Nk}) = 1, \forall k = 1, \dots, K$. Συνεπώς δε χρειάζεται καθόλου να κάνουμε αναδρομή για τα β και απλά έχουμε

$$p(\mathbf{X}) = \sum_{\mathbf{z}_N} \alpha(\mathbf{z}_N). \quad (4.48)$$

Συνοψίζοντας, για να υπολογίσουμε την πιθανοφάνεια πρέπει να πάρουμε την από κοινού κατανομή $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ και να αθροίσουμε πάνω σε όλες τις δυνατές τιμές του \mathbf{Z} , δηλαδή σε όλα τα δυνατά μονοπάτια του διαγράμματος στο Σχήμα 4.5, που είναι εκθετικά τον αριθμό. Εκφράζοντας όμως τη συνάρτηση πιθανοφάνειας στη μορφή (4.48), μειώνουμε το κόστος από εκθετικό σε γραμμικό και σε κάθε στιγμή n αθροίζουμε τις συνεισφορές από όλα τα μονοπάτια που περνούν από τις καταστάσεις z_{nk} για να πάρουμε τις ποσότητες $\alpha(\mathbf{z}_n)$ και τελικά την $\alpha(\mathbf{z}_N)$.

Εν συνεχεία, επιθυμούμε να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$, δηλαδή τις πιθανότητες $p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | \mathbf{X})$. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό της $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$ και εφαρμόζοντας το θεώρημα Bayes έχουμε

$$\begin{aligned} \xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) &= p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | \mathbf{X}) \\ &= \frac{p(\mathbf{X} | \mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \\ &= \frac{p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_{n-1})}{p(\mathbf{X})} \\ &= \frac{\alpha(\mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) \beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \end{aligned} \quad (4.49)$$

όπου η τρίτη ισότητα ισχύει λόγω της έκτης ιδιότητας. Ο αλγόριθμος Baum-Welch είναι λοιπόν μια φόρμουλα επανεκτίμησης των παραμέτρων $\theta = \{\pi, \mathbf{A}, \phi\}$, που έχουμε ήδη υπολογίσει συναρτήσει των $\gamma(\mathbf{z}_n)$ και $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$, και επομένως συναρτήσει των ποσοτήτων $\alpha(\mathbf{z}_n)$ και $\beta(\mathbf{z}_n)$.

Ας συνοψίσουμε τα βήματα που χρειάζονται για να κάνουμε εκτίμηση των παραμέτρων ενός KMM μέσω του αλγορίθμου EM. Πρώτα κάνουμε μια αρχική επιλογή για τις παραμέτρους θ^{old} όπου $\theta = \{\pi, \mathbf{A}, \phi\}$. Οι παράμετροι π και \mathbf{A} μπορούν για παράδειγμα να αρχικοποιηθούν ομοιόμορφα. Η αρχικοποίηση των παραμέτρων ϕ εξαρτάται από τη μορφή της κατανομής. Όταν έχουμε π.χ. κανονικές, οι παράμετροι μ_k μπορούν να αρχικοποιηθούν εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο K -μέσων στα δεδομένα και ο Σ_k μπορεί να αρχικοποιηθεί από τον πίνακα συνδιασποράς της k -οστής συστάδας του αλγορίθμου K -μέσων. Ύστερα τρέχουμε τον εμπροσθοδρομικό και τον οπισθοδρομικό αλγόριθμο για να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\gamma(\mathbf{z}_n)$ και $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$ και την πιθανοφάνεια. Έτσι ολοκληρώνεται το E βήμα, και χρησιμοποιούμε αυτά τα αποτελέσματα για να βρούμε μια νέα εκτίμηση των παραμέτρων θ^{new} χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις του M βήματος που είδαμε σε προηγούμενη παράγραφο. Συνεχίζουμε κάνοντας εναλλαγές μεταξύ των βημάτων E και M μέχρι να ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο σύγκλισης.

Στις αναδρομικές σχέσεις οι παρατηρήσεις εμφανίζονται μόνο μέσα από τις δεσμευμένες πιθανότητες του τύπου $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n)$. Επομένως οι αναδρομές είναι ανεξάρτητες από τον τύπο και τη διάσταση των παρατηρήσιμων μεταβλητών καθώς και από τη μορφή αυτών των δεσμευμένων κατανομών, εφόσον αυτές μπορούν να υπολογιστούν για όλες τις K τιμές της \mathbf{z}_n .

Ένα KMM μπορούμε να το χειριστούμε αποτελεσματικά χρησιμοποιώντας μέγιστη πιθανοφάνεια, αρκεί η ακολουθία των παρατηρήσεων να είναι επαρκώς μεγάλη. Εναλλακτικά μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε πολλές μικρότερες ακολουθίες κάνοντας μερικές απλές τροποποιήσεις στον αλγόριθμο EM. Ας υποθέσουμε ότι τα δεδομένα αποτελούνται από R ανεξάρτητες ακολουθίες παρατηρήσεων (για ευκολία ίδιου μήκους) που συμβολίζονται με $\mathbf{X}^{(r)}$ όπου $r = 1, \dots, R$. Στο E βήμα στόχος μας είναι να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\gamma(\mathbf{z}_n)$ και $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$. Αντί αυτού, και επειδή οι ακολουθίες των παρατηρήσεων είναι ανεξάρτητες, μας βολεύει να τρέξουμε τον $\alpha - \beta$ αλγόριθμο ανεξάρτητα για κάθε ακολουθία. Αυτό σημαίνει ότι υπολογίζουμε τις ποσότητες $\alpha(\mathbf{z}_n^{(r)}) \equiv p(\mathbf{x}_1^{(r)}, \dots, \mathbf{x}_n^{(r)} | \mathbf{z}_n^{(r)})$ και $\beta(\mathbf{z}_n^{(r)}) \equiv p(\mathbf{x}_{n+1}^{(r)}, \dots, \mathbf{x}_N^{(r)} | \mathbf{z}_n^{(r)})$ και τελικά τις ποσότητες

$$\gamma(\mathbf{z}_n^{(r)}) = \frac{\alpha(\mathbf{z}_n^{(r)}) \beta(\mathbf{z}_n^{(r)})}{p(\mathbf{X}^{(r)})} \quad \text{και} \quad \xi(\mathbf{z}_{n-1}^{(r)}, \mathbf{z}_n^{(r)}) = \frac{\alpha(\mathbf{z}_{n-1}^{(r)}) p(\mathbf{x}_n^{(r)} | \mathbf{z}_n^{(r)}) p(\mathbf{z}_n^{(r)} | \mathbf{z}_{n-1}^{(r)}) \beta(\mathbf{z}_n^{(r)})}{p(\mathbf{X}^{(r)})} \quad \forall r. \quad (4.50)$$

Στο M βήμα, αρχικά εφαρμόζουμε τα αποτελέσματα του απλού KMM σε καθεμία από τις $\mathbf{X}^{(r)}$

για να πάρουμε

$$\pi_k^{(r)} = \frac{\gamma(z_{1k}^{(r)})}{\sum_{j=1}^K \gamma(z_{1j}^{(r)})} \quad \text{και} \quad A_{jk}^{(r)} = \frac{\sum_{n=2}^N \xi(z_{n-1,j}^{(r)}, z_{nk}^{(r)})}{\sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}^{(r)}, z_{nl}^{(r)})} \quad \forall r.$$

Επειδή τα $\pi_k, \pi_k^{(r)}, A_{jk}$ και $A_{jk}^{(r)}$ είναι πιθανότητες, οι εκτιμήσεις των π_k και A_{jk} δίνονται από τους μέσους όρους των $\pi_k^{(r)}$ και $A_{jk}^{(r)}$ αντίστοιχα, δηλαδή

$$\pi_k = \frac{\sum_{r=1}^R \pi_k^{(r)}}{R} = \frac{\sum_{r=1}^R \gamma(z_{1k}^{(r)})}{\sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^K \gamma(z_{1j}^{(r)})} \quad (4.51)$$

$$A_{jk} = \frac{\sum_{r=1}^R A_{jk}^{(r)}}{R} = \frac{\sum_{r=1}^R \sum_{n=2}^N \xi(z_{n-1,j}^{(r)}, z_{nk}^{(r)})}{\sum_{r=1}^R \sum_{n=2}^N \sum_{l=1}^K \xi(z_{n-1,j}^{(r)}, z_{nl}^{(r)})}. \quad (4.52)$$

Για να δούμε την τροποποίηση του M βήματος του αλγορίθμου, ας δούμε πώς γίνεται η εκτίμηση του $\boldsymbol{\mu}_k$ στη μίξη κανονικών.

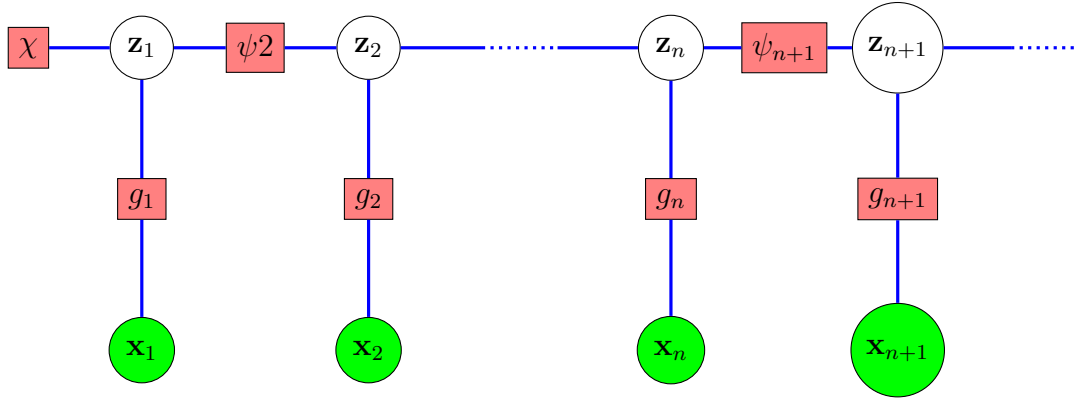
$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &\propto \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \ln p(\mathbf{x}_n^{(r)} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \gamma(z_{nk}^{(r)}) \\ &= \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(-\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k| - \frac{1}{2} (\mathbf{x}_n^{(r)} - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\mathbf{x}_n^{(r)} - \boldsymbol{\mu}_k) \right) \gamma(z_{nk}^{(r)}) \\ &= \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \left(-\frac{1}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}_k| - \frac{1}{2} \mathbf{x}_n^{(r)T} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{x}_n^{(r)} + \frac{1}{2} \mathbf{x}_n^{(r)T} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k + \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_k^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{x}_n^{(r)} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_k^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k \right) \gamma(z_{nk}^{(r)}). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} = \mathbf{0} &\Rightarrow \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \left(-\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{x}_n^{(r)} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \boldsymbol{\mu}_k \right) \gamma(z_{nk}^{(r)}) = \mathbf{0} \\
&\Rightarrow \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}^{(r)}) (\mathbf{x}_n^{(r)} - \boldsymbol{\mu}_k) = \mathbf{0} \\
&\Rightarrow \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}^{(r)}) \mathbf{x}_n^{(r)} = \sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}^{(r)}) \boldsymbol{\mu}_k \\
&\Rightarrow \boldsymbol{\mu}_k = \frac{\sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}^{(r)}) \mathbf{x}_n^{(r)}}{\sum_{r=1}^R \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}^{(r)})}.
\end{aligned}$$

Άλλη μια ποσότητα που μας ενδιαφέρει είναι η κατανομή πρόβλεψης, δηλαδή η κατανομή της \mathbf{x}_{N+1} δοθέντων των δεδομένων \mathbf{X} , που σε ορισμένες εφαρμογές μπορεί να είναι πολύ σημαντική όπως π.χ. για οικονομικές προβλέψεις.

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{X}) &= \sum_{\mathbf{z}_{N+1}} p(\mathbf{x}_{N+1}, \mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{X}) \\
&= \sum_{\mathbf{z}_{N+1}} p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{z}_{N+1})p(\mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{X}) \\
&= \sum_{\mathbf{z}_{N+1}} p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{z}_{N+1}) \sum_{\mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_{N+1}, \mathbf{z}_N|\mathbf{X}) \\
&= \sum_{\mathbf{z}_{N+1}} p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{z}_{N+1}) \sum_{\mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{z}_N)p(\mathbf{z}_N|\mathbf{X}) \\
&= \sum_{\mathbf{z}_{N+1}} p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{z}_{N+1}) \sum_{\mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{z}_N) \frac{p(\mathbf{z}_N, \mathbf{X})}{p(\mathbf{X})} \\
&= \frac{1}{p(\mathbf{X})} \sum_{\mathbf{z}_{N+1}} p(\mathbf{x}_{N+1}|\mathbf{z}_{N+1}) \sum_{\mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_{N+1}|\mathbf{z}_N) \alpha(\mathbf{z}_N). \tag{4.53}
\end{aligned}$$

Η δεύτερη ισότητα ισχύει λόγω της έβδομης ιδιότητας και η τέταρτη ισότητα λόγω της όγδοης ιδιότητας δεσμευμένης ανεξαρτησίας. Παρατηρήστε ότι για να γίνει ο υπολογισμός πρέπει αρχικά να τρέξουμε τον εμπροσθοδρομικό αλγόριθμο και μετά να πραγματοποιήσουμε τα αθροίσματα ως προς \mathbf{z}_N και \mathbf{z}_{N+1} . Το αποτέλεσμα της εσωτερικής άθροισης ως προς \mathbf{z}_N μπορεί να αποθηκευτεί και να χρησιμοποιηθεί μόλις παρατηρηθεί η \mathbf{x}_{N+1} , ώστε να τρέξουμε τον εμπροσθοδρομικό αλγόριθμο ένα βήμα μπροστά, και να έχουμε τη δυνατότητα να προβλέψουμε την επόμενη τιμή \mathbf{x}_{N+2} . Παρατηρήστε επίσης ότι στην (4.53), η επίδραση των δεδομένων \mathbf{X} συνοψίζεται στο διάνυσμα $\alpha(\mathbf{z}_N)$. Μπορούμε συνεπώς -εάν το απαιτεί η εφαρμογή που εξετάζουμε- να επαναλάβουμε την κατανομή πρόβλεψης κατά άπειρο αριθμό βημάτων.



Σχήμα 4.10: Ένας γράφος παραγόντων που αναπαριστά τα KMM.

Συζητήσαμε παραπάνω την εκτίμηση των παραμέτρων ενός KMM με βάση τη μέγιστη πιθανοφάνεια. Μπορούμε και εδώ να ορίσουμε εκ των προτέρων πιθανότητες στις παραμέτρους π , \mathbf{A} και ϕ οι τιμές των οποίων εκτιμώνται μεγιστοποιώντας την εκ των υστέρων πιθανότητά τους. Αυτό μπορεί να γίνει πάλι μέσω του EM, όπου το E βήμα παραμένει το ίδιο, ενώ στο M βήμα η ποσότητα προς μεγιστοποίηση δίνεται από $Q(\theta, \theta^{\text{old}}) + \ln p(\theta)$, όπως έχουμε ήδη αναφέρει στο προηγούμενο κεφάλαιο.

4.6 Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου για τα KMM

Ο διατεταγμένος γράφος του Σχήματος 4.4 των KMM είναι ένα δέντρο, και συνεπώς μπορούμε να βρούμε περιθώριες πιθανότητες των λανθανουσών μεταβλητών χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινομένου. Θα δείξουμε τώρα ότι αυτός είναι ισοδύναμος με τον εμπροσθοδρομικό-οπισθοδρομικό αλγόριθμο, και έτσι ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου μας παρέχει έναν εύκολο τρόπο για να πάρουμε το επαναληπτικό σχήμα $\alpha - \beta$.

Αρχικά θα πρέπει να μετατρέψουμε το διατεταγμένο γράφο του Σχήματος 4.4 των KMM σε ένα γράφο παραγόντων, όπως στο Σχήμα 4.10, όπου εμφανίζονται αναλυτικά τόσο οι παρατηρήσιμες όσο και οι κρυμμένες μεταβλητές. Μπορούμε όμως να απλοποιήσουμε το γράφο παραγόντων, ενσωματώνοντας τις κατανομές εκπομπής στους παράγοντες πιθανοτήτων μετάβασης, και να οδηγηθούμε στον πιο απλοποιημένο γράφο παραγόντων του Σχήματος 4.11, στον οποίο οι παράγοντες δίνονται από

$$h(\mathbf{z}_1) = p(\mathbf{z}_1)p(\mathbf{x}_1|\mathbf{z}_1) \quad (4.54)$$

$$f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1})p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n). \quad (4.55)$$

Για να δείξουμε την ισοδυναμία των δύο αλγορίθμων, ορίζουμε την τελευταία κρυμμένη μεταβλητή \mathbf{z}_N να είναι η ρίζα του δέντρου, και αρχικά περνάμε μηνύματα από το φύλλο h προς τη ρίζα. Από τα γενικά αποτελέσματα της παραγράφου του αλγορίθμου αθροίσματος-γινομένου για τη μετάδοση μηνυμάτων, βλέπουμε ότι τα μηνύματα που μεταδίδονται στα KMM παίρνουν

τη μορφή

$$\mu_{\mathbf{z}_{n-1} \rightarrow f_n}(\mathbf{z}_{n-1}) = \mu_{f_{n-1} \rightarrow \mathbf{z}_{n-1}}(\mathbf{z}_{n-1}) \quad (4.56)$$

$$\mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) = \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \mu_{\mathbf{z}_{n-1} \rightarrow f_n}(\mathbf{z}_{n-1}). \quad (4.57)$$

Αυτές οι εξισώσεις περιγράφουν τη μετάδοση των μηνυμάτων προς τα εμπρός στην αλυσίδα, και τώρα θα δείξουμε ότι ταυτίζονται με τις εξισώσεις για τα α . Επειδή οι μεταβλητές \mathbf{z}_n έχουν μόνο δύο γείτονες, τα μηνύματα απλώς περνούν μέσα από αυτές και δεν δημιουργούν καμία αλλαγή στους υπολογισμούς.

Στην εξίσωση (4.57) αντικαθιστούμε το $\mu_{\mathbf{z}_{n-1} \rightarrow f_n}(\mathbf{z}_{n-1})$ χρησιμοποιώντας την (4.56), για να πάρουμε την παρακάτω αναδρομική σχέση

$$\mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) = \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \mu_{f_{n-1} \rightarrow \mathbf{z}_{n-1}}(\mathbf{z}_{n-1}). \quad (4.58)$$

Αν τώρα αντικαταστήσουμε τον ορισμό (4.55) και αν ορίσουμε

$$\alpha(\mathbf{z}_n) = \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) \quad (4.59)$$

θα πάρουμε τον εμπροσθοδρομικό αλγόριθμο (4.42). Αρκεί πλέον να ταυτίζονται οι αρχικές τιμές προκειμένου να αποδείξουμε ότι οι ποσότητες $\alpha(\mathbf{z}_n)$ είναι οι ίδιες με αυτές που ορίσαμε στην προηγούμενη ενότητα. Πράγματι η ποσότητα

$$\alpha(\mathbf{z}_1) = \mu_{h \rightarrow \mathbf{z}_1}(\mathbf{z}_1) = h(\mathbf{z}_1) = p(\mathbf{z}_1)p(\mathbf{x}_1|\mathbf{z}_1) \quad (4.60)$$

ισούται με την (4.43), που σημαίνει ότι αποδείξαμε το ζητούμενο.

Ένας εναλλακτικός τρόπος να αποδείξουμε την ισοδυναμία των δύο ορισμών είναι χρησιμοποιώντας τον τύπο $\mu_{f_s \rightarrow x}(x) \equiv \sum_{X_s} F_s(x, X_s)$, από τον οποίο παίρνουμε

$$\begin{aligned} \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} h(\mathbf{z}_1) \prod_{k=2}^n f_k(\mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{z}_k) \\ &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=2}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \\ &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k). \end{aligned}$$



Σχήμα 4.11: Ένας απλούστερος γράφος παραγόντων που αναπαριστά τα ΚΜΜ.

Από την άλλη μεριά, έχουμε

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n) \\ &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_1) \left[\prod_{k=2}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k). \end{aligned}$$

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε τα μηνύματα που κατευθύνονται από τη ρίζα προς τα φύλλα, τα οποία έχουν τη μορφή

$$\mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) = \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} f_{n+1}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \mu_{f_{n+2} \rightarrow \mathbf{z}_{n+1}}(\mathbf{z}_{n+1}) \quad (4.61)$$

όπου έχουμε απομονώσει τα μηνύματα της μορφής $\mathbf{z} \rightarrow f$, επειδή οι κόμβοι μεταβλητών δεν μεταβάλλουν τους υπολογισμούς. Χρησιμοποιούμε τον ορισμό (4.55), τον αντικαθιστούμε στο $f_{n+1}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1})$ και ορίζουμε

$$\beta(\mathbf{z}_n) = \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) \quad (4.62)$$

για να πάρουμε τελικά τον οπισθοδρομικό αλγόριθμο (4.44). Μπορούμε πάλι να επιβεβαιώσουμε ότι οι ποσότητες $\beta(\mathbf{z}_n)$ είναι ίσες με αυτές που ορίστηκαν στην προηγούμενη ενότητα. Πράγματι, το αρχικό μήνυμα που στέλνεται από τη ρίζα ισούται με $\mu_{\mathbf{z}_N \rightarrow f_N}(\mathbf{z}_N) = 1$, που είναι ίσο με την αρχικοποίηση του $\beta(\mathbf{z}_N)$ στην προηγούμενη ενότητα.

Αναλόγως έχουμε τη δυνατότητα να δείξουμε την ισοδυναμία των δύο ορισμών χρησιμοποιώντας τη σχέση $\mu_{f_s \rightarrow x}(x) \equiv \sum_{X_s} F_s(x, X_s)$ από την οποία έπεται ότι

$$\begin{aligned} \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} \prod_{k=n+1}^N f_k(\mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{z}_k) \\ &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} \left[\prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \end{aligned}$$

και επιπλέον

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n) &= \frac{p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{z}_n)} \\ &= \frac{\sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_n) \left[\prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k)}{p(\mathbf{z}_n)} \\ &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} \left[\prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) \right] \prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k). \end{aligned}$$

Ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου μας δίνει τη δυνατότητα να υπολογίζουμε τις περιθώριες πιθανότητες, αφού πρώτα έχουμε υπολογίσει όλα τα μηνύματα. Γνωρίζουμε ήδη ότι η

περιθώρια πιθανότητα μιας μεταβλητής \mathbf{z}_n ισούται με το γινόμενο όλων των εισερχόμενων μη-νυμάτων σε αυτή. Επειδή έχουμε παρατηρήσει τις μεταβλητές $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$, η από κοινού τους πιθανότητα ισούται με

$$p(\mathbf{z}_n, \mathbf{X}) = \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) = \alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n) \quad (4.63)$$

και διαιρώντας με την $p(\mathbf{X})$ παίρνουμε

$$\gamma(\mathbf{z}_n) = \frac{p(\mathbf{z}_n, \mathbf{X})}{p(\mathbf{X})} = \frac{\alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \quad (4.64)$$

όπως ακριβώς και στην (4.39). Επιπλέον μπορούμε να υπολογίσουμε τις ποσότητες $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$ χρησιμοποιώντας το αποτέλεσμα $p(\mathbf{x}_s) = f_s(\mathbf{x}_s) \prod_{i \in \text{ne}(f_s)} \mu_{x_i \rightarrow f_s}(x_i)$, από το οποίο έπεται ότι

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n, \mathbf{X}) &= f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \mu_{\mathbf{z}_n \rightarrow f_n}(\mathbf{z}_n) \mu_{\mathbf{z}_{n-1} \rightarrow f_n}(\mathbf{z}_{n-1}) \\ &= p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) \mu_{f_{n-1} \rightarrow \mathbf{z}_{n-1}}(\mathbf{z}_{n-1}) \\ &= p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \alpha(\mathbf{z}_{n-1}) \beta(\mathbf{z}_n). \end{aligned} \quad (4.65)$$

Επομένως

$$\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | \mathbf{X}) = \frac{p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n, \mathbf{X})}{p(\mathbf{X})} = \frac{p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \alpha(\mathbf{z}_{n-1}) \beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \quad (4.66)$$

σε συμφωνία με την (4.49).

4.7 Παράγοντες κλιμάκωσης

Από την αναδρομική σχέση (4.42) παρατηρούμε ότι κάθε τιμή $\alpha(\mathbf{z}_n)$ προκύπτει από την προηγούμενη $\alpha(\mathbf{z}_{n-1})$, πολλαπλασιάζοντάς την με τις ποσότητες $p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1})$ και $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n)$. Επειδή αυτές οι πιθανότητες είναι συχνά πολύ μικρότερες της μονάδας, και καθώς προχωράμε εμπρός στην αλυσίδα, οι τιμές του $\alpha(\mathbf{z}_n)$ μπορούν να μηδενιστούν σε εκθετικό βαθμό γρήγορα. Οπότε ακόμη και για μικρό σχετικά μήκος αλυσίδας, ο υπολογισμός του $\alpha(\mathbf{z}_n)$ θα είναι ουσιαστικά αδύνατος καθώς θα υπερβαίνει την ακρίβεια του υπολογιστή. Όταν είχαμε ανεξάρτητα και ισόνομα δεδομένα, ξεπεράσαμε το πρόβλημα του υπολογισμού συναρτήσεων πιθανοφάνειας παίρνοντας το λογάριθμό τους. Αυτό όμως δε μπορεί να μας ωφελήσει εδώ, γιατί έχουμε να κάνουμε με αθροίσματα από γινόμενα μικρών αριθμών. Για το λόγο αυτό εργαζόμαστε με τροποποιημένες μορφές των $\alpha(\mathbf{z}_n)$ και $\beta(\mathbf{z}_n)$, που οι τιμές τους είναι σχετικά κοντά στη μονάδα. Θα δείξουμε ότι αυτοί οι παράγοντες κλιμάκωσης εξαφανίζονται όταν χρησιμοποιούμε αυτές τις τροποποιημένες μορφές στον αλγόριθμο EM.

Μέχρι στιγμής έχουμε δει τον ορισμό $\alpha(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n)$. Θα ορίσουμε τώρα μια κανονικοποιημένη εκδοχή του α που δίνεται από

$$\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \frac{\alpha(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)} \quad (4.67)$$

και πρόκειται για μια συνάρτηση πιθανότητας πάνω σε K μεταβλητές για κάθε n , οπότε αναμένουμε να συμπεριφέρεται καλά αριθμητικά. Για να συνδέσουμε την αυθεντική μεταβλητή α με την κλιμακωτή, εισάγουμε τους παρακάτω παράγοντες κλιμάκωσης

$$c_n = p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}). \quad (4.68)$$

Από τον κανόνα γινομένου της πιθανότητας, έχουμε

$$p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \prod_{m=1}^n c_m \quad (4.69)$$

και επιπλέον

$$\alpha(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \left(\prod_{m=1}^n c_m \right) \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n). \quad (4.70)$$

Μπορούμε επομένως να μετατρέψουμε τον εμπροσθοδρομικό αλγόριθμο (4.42) για το α στον αντίστοιχο για το $\hat{\alpha}$ που δίνεται από

$$c_n \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} \hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}). \quad (4.71)$$

Παρατηρήστε ότι σε κάθε στάδιο του αλγορίθμου στο οποίο υπολογίζουμε το $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$, πρέπει να υπολογίσουμε και να αποθηκεύσουμε την τιμή c_n . Αυτό δεν αποτελεί μεγάλη δυσκολία, καθώς είναι ο αριθμός εκείνος που κανονικοποιεί το δεξιό μέρος της (4.71) και δίνει το $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$, που οι συντεταγμένες του πρέπει να αθροίζονται στη μονάδα.

Μπορούμε παρομοίως να ορίσουμε τις κλιμακωτές μεταβλητές $\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$ ίσες με το λόγο δύο δεσμευμένων πιθανοτήτων

$$\hat{\beta}(\mathbf{z}_n) = \frac{p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)}. \quad (4.72)$$

Κάνοντας χρήση του ορισμού $\beta(\mathbf{z}_n)$ και του κανόνα γινομένου συμπεραίνουμε ότι

$$\beta(\mathbf{z}_n) = \left(\prod_{m=n+1}^N c_m \right) \hat{\beta}(\mathbf{z}_n). \quad (4.73)$$

Η αναδρομική σχέση (4.44) για το β συνεπάγεται για το $\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$ την αναδρομική σχέση

$$c_{n+1} \hat{\beta}(\mathbf{z}_n) = \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} \hat{\beta}(\mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) \quad (4.74)$$

στην οποία κάνουμε χρήση των ποσοτήτων c_n που είναι ήδη γνωστές από την αναδρομή για το α .

Από τη σχέση (4.69), βλέπουμε ότι η συνάρτηση πιθανοφάνειας μπορεί να υπολογιστεί από

$$p(\mathbf{X}) = \prod_{n=1}^N c_n. \quad (4.75)$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.39) έχουμε

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{z}_n) &= \frac{\alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} = \frac{\left(\prod_{m=1}^n c_m \right) \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) \left(\prod_{m=n+1}^N c_m \right) \hat{\beta}(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \\ &= \frac{\left(\prod_{m=1}^N c_m \right) \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) \hat{\beta}(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} = \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) \hat{\beta}(\mathbf{z}_n) \end{aligned} \quad (4.76)$$

ενώ από την ισότητα (4.49) παίρνουμε τις περιθώριες πιθανότητες

$$\begin{aligned}\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) &= \frac{\alpha(\mathbf{z}_{n-1})p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1})\beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X})} \\ &= \frac{\alpha(\mathbf{z}_{n-1})p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1})\beta(\mathbf{z}_n)}{\left(\prod_{m=1}^{n-1} c_m\right) c_n \left(\prod_{m=n+1}^N c_m\right)} \\ &= c_n^{-1} \hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1})p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1})\hat{\beta}(\mathbf{z}_n).\end{aligned}\quad (4.77)$$

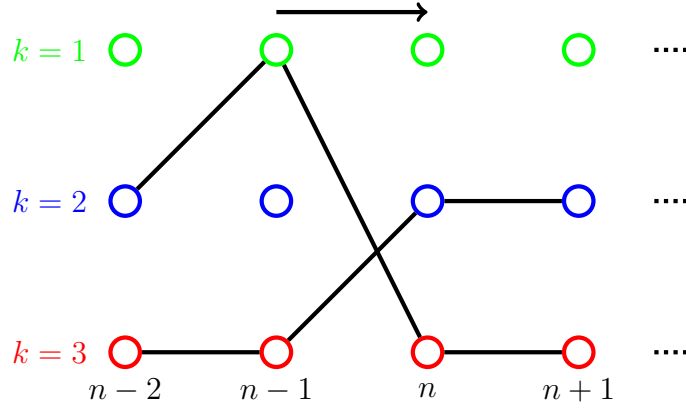
Τέλος να αναφέρουμε ότι υπάρχει μια παραλλαγή του εμπροσθοδρομικού-οπισθοδρομικού αλγορίθμου, στον οποίο οι οπισθοδρομικές αναδρομές βασίζονται στις ποσότητες $\gamma(\mathbf{z}_n) = \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$ αντί για τις $\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$. Αυτή η $\alpha - \gamma$ αναδρομή απαιτεί πρώτα την ολοκλήρωση των εμπροσθοδρομικών εξισώσεων ώστε να είναι διαθέσιμες οι ποσότητες $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$ για την οπισθοδρομική αναδρομή, ενώ οι αναδρομές στην $\alpha - \beta$ εκδοχή μπορούν να γίνουν ανεξάρτητα. Η $\alpha - \beta$ εκδοχή είναι συνηθέστερη στα KMM, ενώ όταν χειριζόμαστε γραμμικά δυναμικά συστήματα χρησιμοποιούμε συνήθως μια αναδρομή που είναι ανάλογη της μορφής $\alpha - \gamma$.

4.8 Επίλυση του προβλήματος (3) - Αλγόριθμος Viterbi

Σε πολλές εφαρμογές των KMM εμφανίζεται η ανάγκη να γνωρίζουμε την πιο πιθανή ακολουθία ακολουθία λανθανουσών τιμών για μια δεδομένη ακολουθία παρατηρήσεων. Επειδή ο γράφος των KMM είναι ένα διατεταγμένο δέντρο, αυτό το πρόβλημα μπορεί να επιλυθεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο μεγίστου-αθροίσματος. Υπενθυμίζουμε κάτι που έχει ήδη αναφερθεί στην παράγραφο του αλγορίθμου, ότι η πιο πιθανή ακολουθία λανθανουσών τιμών δεν είναι η ίδια με την ακολουθία των τιμών που είναι ξεχωριστά οι πιο πιθανές. Το τελευταίο πρόβλημα μπορεί να επιλυθεί τρέχοντας τον αλγόριθμο αθροίσματος γινομένου ή ισοδύναμα τον εμπροσθοδρομικό-οπισθοδρομικό αλγόριθμο για να βρούμε τις περιθώριες πιθανότητες $\gamma(\mathbf{z}_n)$ και ύστερα μεγιστοποιούμε καθεμία από αυτές ξεχωριστά. Το σύνολο αυτών των τιμών στη γενική περίπτωση δεν θα αντιστοιχεί στην πιο πιθανή ακολουθία τιμών, και μάλιστα πιθανόν να αποτελεί ακολουθία τιμών που έχουν μηδενική από κοινού πιθανότητα.

Συνήθως ενδιαφερόμαστε να βρούμε την πιο πιθανή ακολουθία τιμών, κάτι που επιτυγχάνεται με τη χρήση του αλγορίθμου μεγίστου-αθροίσματος, ο οποίος στην περίπτωση των KMM είναι γνωστός ως αλγόριθμος *Viterbi* (Viterbi,1967). Επειδή ο αλγόριθμος μεγίστου-αθροίσματος χρησιμοποιεί λογαρίθμους πιθανοτήτων, δε χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε κλιμακωτές μεταβλητές όπως στον εμπροσθοδρομικό-οπισθοδρομικό αλγόριθμο. Στο Σχήμα 4.12 παρουσιάζεται ένα τμήμα ενός KMM σε διαγραμματική μορφή. Όπως έχουμε ήδη διαπιστώσει, το πλήθος των δυνατών μονοπατιών του διαγράμματος αυξάνεται εκθετικά με το μήκος της αλυσίδας. Ο αλγόριθμος Viterbi μας δίνει τη δυνατότητα να εντοπίζει από όλα τα μονοπάτια αυτό με τη μεγαλύτερη πιθανότητα, και μάλιστα με υπολογιστικό κόστος που αυξάνεται μόνο γραμμικά σε σχέση με το μήκος της αλυσίδας.

Θα χρησιμοποιήσουμε τον γράφο παραγόντων του Σχήματος 4.11. Ξανά, θα θεωρήσουμε τη μεταβλητή \mathbf{z}_N ως τη ρίζα, και θα περάσουμε μηνύματα από τα φύλλα προς τη ρίζα. Χρησιμοποιώντας τα ήδη γνωστά αποτελέσματα του αλγορίθμου μεγίστου-αθροίσματος, βλέπουμε ότι



Σχήμα 4.12: Τμήμα ενός διαγράμματος KMM που δείχνει δύο διαφορετικά μονοπάτια. Ο αλγόριθμος Viterbi εντοπίζει το πιο πιθανό μονοπάτι ανάμεσα σε όλα, που είναι εκθετικά τον αριθμό.

τα μηνύματα δίνονται από

$$\mu_{\mathbf{z}_n \rightarrow f_{n+1}}(\mathbf{z}_n) = \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) \quad (4.78)$$

$$\mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_{n+1}}(\mathbf{z}_{n+1}) = \max_{\mathbf{z}_n} \{ \ln f_{n+1}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) + \mu_{\mathbf{z}_n \rightarrow f_{n+1}}(\mathbf{z}_n) \}. \quad (4.79)$$

Αν αντικαταστήσουμε την (4.78) στην (4.79) και κάνουμε χρήση του ορισμού (4.55), παίρνουμε για τα μηνύματα του τύπου $f \rightarrow \mathbf{z}$ την αναδρομική σχέση

$$\omega(\mathbf{z}_{n+1}) = \ln p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) + \max_{\mathbf{z}_n} \{ \ln p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) + \omega(\mathbf{z}_n) \} \quad (4.80)$$

όπου έχουμε δώσει τον ορισμό $\omega(\mathbf{z}_n) = \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n)$. Χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.54), προκύπτει ότι το αρχικό μήνυμα ισούται με

$$\omega(\mathbf{z}_1) = \ln h(\mathbf{z}_1) = \ln p(\mathbf{x}_1, \mathbf{z}_1) = \ln p(\mathbf{z}_1) + \ln p(\mathbf{x}_1 | \mathbf{z}_1). \quad (4.81)$$

Στα παραπάνω αποτελέσματα έχουμε παραλείψει την εξάρτηση από τις παραμέτρους του μοντέλου, οι οποίες θεωρήθηκαν ως σταθερές καθώς βρήκαμε την πιο πιθανή ακολουθία.

Ο αλγόριθμος Viterbi μπορεί επίσης να προκύψει απευθείας από την από κοινού πιθανότητα (4.6) των KMM, παίρνοντας λογαρίθμους και εναλλάσσοντας αθροίσματα και μεγιστοποιήσεις. Θα δείξουμε τώρα ότι μπορούμε να δώσουμε στις ποσότητες $\omega(\mathbf{z}_n)$ τον εξής εναλλακτικό ορισμό

$$\omega(\mathbf{z}_n) = \max_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} \ln p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n). \quad (4.82)$$

Πράγματι,

$$\begin{aligned}
\omega(\mathbf{z}_{n+1}) &= \max_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n} \ln p(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n+1}) \\
&= \max_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n} \left\{ \ln p(\mathbf{z}_1) + \sum_{k=2}^{n+1} p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) + \sum_{k=1}^{n+1} p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \right\} \\
&= \max_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n} \left\{ \ln p(\mathbf{z}_1) + \ln p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) + \sum_{k=2}^n p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) + \ln p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) + \sum_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \right\} \\
&= \ln p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) + \max_{\mathbf{z}_n} \left\{ \ln p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) + \max_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} \left\{ \ln p(\mathbf{z}_1) + \sum_{k=2}^n p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}) + \sum_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \right\} \right\} \\
&= \ln p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{z}_{n+1}) + \max_{\mathbf{z}_n} \{ \ln p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) + \omega(\mathbf{z}_n) \}
\end{aligned}$$

και επιπλέον η αρχική συνθήκη

$$\omega(\mathbf{z}_1) = \ln p(\mathbf{x}_1, \mathbf{z}_1) = \ln p(\mathbf{z}_1) + \ln p(\mathbf{x}_1 | \mathbf{z}_1) \quad (4.83)$$

ταυτίζεται με αυτήν που ήδη έχουμε αναφέρει, συνεπώς δείξαμε το ζητούμενο.

Μόλις ολοκληρώσουμε την τελική μεγιστοποίηση ως προς το \mathbf{z}_N , θα πάρουμε την τιμή της από κοινού κατανομής $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ που αντιστοιχεί στο πιο πιθανό μονοπάτι. Για να βρούμε την πιθανότερη ακολουθία, χρησιμοποιούμε την οπισθοδρομική ιχνηλασία της παραγράφου του αλγορίθμου. Συγκεκριμένα, παρατηρούμε ότι για να κάνουμε μεγιστοποίηση του \mathbf{z}_n , αυτή θα πρέπει να γίνει για όλες τις K τιμές του \mathbf{z}_{n+1} . Σημειώνουμε εκείνες τις τιμές του \mathbf{z}_n που αντιστοιχούν σε μέγιστο για καθεμία από τις K τιμές του \mathbf{z}_{n+1} , και τις συμβολίζουμε με τις μεταβλητές $\psi(k_n), \forall k = 1, \dots, K, \forall n = 1, \dots, N$. Μόλις στείλουμε μηνύματα μέχρι τη ρίζα της αλυσίδας και βρούμε την πιο πιθανή τιμή της \mathbf{z}_N , μπορούμε να εφαρμόσουμε αυτή τη συνάρτηση αναδρομικά στην αλυσίδα, δηλαδή

$$k_{n-1}^{\max} = \psi(k_n^{\max}). \quad (4.84)$$

Συνοψίζοντας, μπορούμε να περιγράψουμε τον αλγόριθμο Viterbi ως εξής. Αντί να λάβουμε υπ' όψιν μας όλα τα μονοπάτια του διαγράμματος, μπορούμε να επιτύχουμε μια σημαντική βελτίωση στο υπολογιστικό κόστος ως εξής. Υπολογίζουμε την πιθανότητα κάθε μονοπατιού αθροίζοντας γινόμενα πιθανοτήτων μετάβασης και πιθανοτήτων εκπομπής καθώς κινούμαστε εμπρός σε κάθε μονοπάτι του διαγράμματος. Θεωρούμε μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή n και μια συγκεκριμένη κατάσταση k τη στιγμή αυτή. Υπάρχουν πολλά μονοπάτια που συγκλίνουν στο συγκεκριμένο κόμβο του διαγράμματος, αλλά εμείς ενδιαφερόμαστε να συγκρατήσουμε μόνο εκείνο που έχει τη μεγαλύτερη μέχρι στιγμής πιθανότητα. Υπάρχουν K διαφορετικές καταστάσεις τη στιγμή n , οπότε χρειάζεται να αποθηκεύσουμε K τέτοια μονοπάτια. Τη χρονική στιγμή $n+1$ θα υπάρχουν K δυνατά μονοπάτια που φεύγουν από καθεμία από τις K καταστάσεις της στιγμής n , συνεπώς έχουμε να ασχοληθούμε με K^2 δυνατά μονοπάτια, όμως χρειάζεται να κρατήσουμε μόνο τα K από αυτά, που είναι τα πιθανότερα μονοπάτια για καθεμία από τις καταστάσεις τη χρονική στιγμή $n+1$. Όταν φτάσουμε στην τελευταία χρονική στιγμή N , βρίσκουμε την κατάσταση εκείνη που αντιστοιχεί στο συνολικά πιθανότερο μονοπάτι. Επειδή υπάρχει ένα και μοναδικό μονοπάτι που περνά από την κατάσταση αυτή, μπορούμε να γυρίσουμε πίσω στην αλυσίδα και να εντοπίσουμε ποια είναι η κατάσταση του μονοπατιού τη στιγμή $N-1$ κ.ο.κ. μέχρι τη στιγμή $n=1$.

Στο σημείο αυτό αξίζει να αναφέρουμε μια εναλλακτική μέθοδο για την επίλυση του προβλήματος 1 (εκτίμηση των παραμέτρων του KMM). Ο *τμηματικός αλγόριθμος K-μέσων* βασίζεται στο κριτήριο μέγιστης πιθανοφάνειας και βελτίστων καταστάσεων, δηλαδή θέλουμε να μεγιστοποιήσουμε την $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{Z}^*, \mathbf{X})$, που είναι η συνάρτηση πιθανοφάνειας του $\boldsymbol{\theta}$ δοθείσης της ακολουθίας βέλτιστων καταστάσεων \mathbf{Z}^* και της ακολουθίας των παρατηρήσεων \mathbf{X} . Στις περισσότερες περιπτώσεις η ακολουθία \mathbf{Z}^* είναι η ακολουθία Viterbi.

Όπως ο αλγόριθμος Baum-Welch, έτσι και ο τμηματικός αλγόριθμος K-μέσων περιλαμβάνει επαναληπτικές διαδικασίες, ώστε μετά από κάποιον αριθμό επαναλήψεων θα φτάσουμε σε ένα τοπικό μέγιστο για τις παραμέτρους ως προς την $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{Z}^*, \mathbf{X})$. Δεδομένου του ότι κάθε λανθάνουσα μεταβλητή έχει K καταστάσεις και ότι η ακολουθία των παρατηρήσεων έχει επαρκώς μεγάλο μήκος ίσο με N , τα κύρια βήματα του αλγορίθμου είναι τα εξής:

1. Διαλέγουμε K παρατηρήσεις να είναι τα κέντρα των συστάδων και στέλνουμε καθεμία από τις υπόλοιπες $N - K$ παρατηρήσεις στην πλησιέστερη συστάδα με βάση την απόσταση από το κέντρο. Οι παρατηρήσεις που ανήκουν στην ίδια συστάδα θα υποθέτουμε ότι αντιστοιχούν στην ίδια λανθάνουσα κατάσταση και αντιστρόφως. Η επιλογή των κέντρων είναι σημαντική για να επιτευχθεί ταχύτερη σύγκλιση.
2. Εκτιμούμε το διάνυσμα $\boldsymbol{\pi}$ και τον πίνακα \mathbf{A} ως εξής

$$\pi_k = \frac{\text{Αριθμός χρονικών στιγμών στις οποίες } z_{1k} = 1}{\text{Αριθμός των παρατηρήσεων της ακολουθίας}}$$

$$A_{jk} = \frac{\text{Αριθμός μεταβάσεων από το } j \text{ στο } k}{\text{Αριθμός μεταβάσεων από το } j.}$$

3. Υπολογίζουμε τις παραμέτρους των κατανομών εκπομπής.
4. Βρίσκουμε την καινούργια βέλτιστη ακολουθία καταστάσεων \mathbf{Z}^* βασιζόμενοι στο νέο σύνολο παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}^{\text{new}}$.
5. Αν υπάρχει αλλαγή στο \mathbf{Z}^* επιστρέφουμε στο βήμα 2.

Ο αλγόριθμος EM είναι κατά μία έννοια καλύτερος από τον τμηματικό αλγόριθμο K-μέσων επειδή δεν απαιτεί τη γνώση του \mathbf{Z}^* . Αν και βασιζόμαστε σε διαφορετικά κριτήρια, εντούτοις και στις δύο περιπτώσεις οι εκτιμήσεις των παραμέτρων δεν διαφέρουν πολύ, ειδικά όταν είναι μεγάλος ο αριθμός των παραμέτρων προς εκτίμηση. Συγκριτικά με τον EM, ο τμηματικός αλγόριθμος K-μέσων είναι συνήθως πιο εύκολος στην εκτέλεση και πιο αποδοτικός όταν εμπλέκονται τεράστιες ποσότητες δεδομένων, επειδή είναι πιο απλά τα βήματα επανεκτίμησης.

4.9 Γενικεύσεις των κρυμμένων μαρκοβιανών μοντέλων

Το κλασικό KMM μαζί με τον αλγόριθμο που βασίζεται στη μέγιστη πιθανοφάνεια έχει πολυάριθμες επεκτάσεις, προκειμένου να καλύψει τις ανάγκες ορισμένων εφαρμογών. Στη συνέχεια θα συζητήσουμε για μερικές από τις πιο συνήθεις παραλλαγές.

Μια σημαντική αδυναμία των κλασικών KMM είναι ο τρόπος με τον οποίο αναπαριστούν την κατανομή των χρόνων στους οποίους το σύστημα παραμένει στην ίδια λανθάνουσα κατάσταση.

Για παράδειγμα η πιθανότητα ένα KMM να διατηρηθεί για T βήματα στην κατάσταση k και ύστερα να μεταπηδήσει σε μια άλλη κατάσταση δίνεται από

$$p(T) = (A_{kk})^T (1 - A_{kk}) \propto \exp(T \ln A_{kk}) \quad (4.85)$$

δηλαδή είναι εκθετικά φθίνουσα ως προς το χρόνο. Για πολλές εφαρμογές όμως, αυτό αποκλίνει κατά πολύ από την πραγματική χρονική διάρκεια μιας κατάστασης. Μπορούμε να λύσουμε αυτό το πρόβλημα καθορίζοντας απευθείας τη χρονική διάρκεια κάθε κατάστασης. Συγκεκριμένα υποθέτουμε ότι κάθε κατάσταση k συνδέεται με μια συνάρτηση πιθανότητας $p(T|k)$ του πιθανού χρόνου διάρκειας. Όταν μπαίνουμε σε μια κατάσταση k , επιλέγεται μια τιμή T που προέρχεται από την $p(T|k)$ και μας δείχνει τον αριθμό των χρονικών βημάτων που θα παραμείνουμε στην κατάσταση αυτή. Το μοντέλο στη συνέχεια μας δίνει T τιμές της παρατηρήσιμης μεταβλητής \mathbf{x}_t που υποθέτουμε ότι είναι ανεξάρτητες, και συνεπώς η κατανομή εκπομπής δίνεται από $\prod_{t=1}^T p(\mathbf{x}_t|k)$. Η προσέγγιση αυτή απαιτεί κάποιες τροποποιήσεις στον αλγόριθμο EM.

Ένας ακόμη περιορισμός του κλασικού KMM είναι η αδυναμία του να ερμηνεύσει συσχετίσεις μεταξύ παρατηρήσιμων μεταβλητών που απέχουν μεταξύ τους πολλά χρονικά βήματα, γιατί αυτές πρέπει να αποτυπωθούν μέσω μιας μαρκοβιανής αλυσίδας πρώτης τάξης για τις λανθάνουσες μεταβλητές. Τέτοιες ιδιότητες ευρύτερης κλίμακας, για να απεικονιστούν, χρειάζεται να προσθέσουμε επιπλέον συνδέσμους στο Σχήμα 4.4 του απλού KMM. Μπορούμε έτσι να γενικεύσουμε το KMM για να πάρουμε το αυτοπαλίνδρομο KMM ή ARHMM, ένα παράδειγμα του οποίου φαίνεται στο Σχήμα 4.13. Όπως δείχνει και το όνομα, ένα ARHMM είναι συνδυασμός μιας αυτοπαλίνδρομης χρονοσειράς και ενός KMM. Συγκεκριμένα, η αυτοπαλίνδρομη κατασκευή είναι αυτή που επιτρέπει την ύπαρξη δεσμεύσεων μεταξύ των παρατηρήσεων, ενώ η λανθάνουσα μαρκοβιανή αλυσίδα θα μπορούσε να αποδόσει ικανοποιητικά τα χαρακτηριστικά των πιθανοτήτων μετάβασης των λανθανουσών καταστάσεων. Στην οικονομετρία, τα ARHMM αναφέρονται και ως *χρονοσειρές με αλλαγή στο καθεστώς (στις καταστάσεις)*. Όταν έχουμε διακριτές παρατηρήσεις, οι κατανομές εκπομπής είναι γενικευμένοι πίνακες δεσμευμένων πιθανοτήτων. Από την άλλη μεριά, όταν έχουμε κανονικές κατανομές εκπομπής, θα θεωρούμε ότι η δεσμευμένη κατανομή του \mathbf{x}_n δοθέντων των τιμών των προηγούμενων παρατηρήσεων και της τιμής της \mathbf{z}_n , είναι μια κανονική με μέση τιμή ίση με έναν γραμμικό συνδυασμό των τιμών των δεσμευμένων μεταβλητών. Σε κάθε περίπτωση θα πρέπει να χρησιμοποιούμε περιορισμένο αριθμό από επιπρόσθετους συνδέσμους στο γράφο, ώστε να έχουμε ένα διαχειρίσιμο πλήθος από ελεύθερες παραμέτρους.

Στις χρονοσειρές, λέμε ότι ένα μοντέλο είναι AR(p) (αυτοπαλίνδρομο τάξης p) αν θεωρούμε ότι οι παρατηρήσεις έχουν τη μορφή

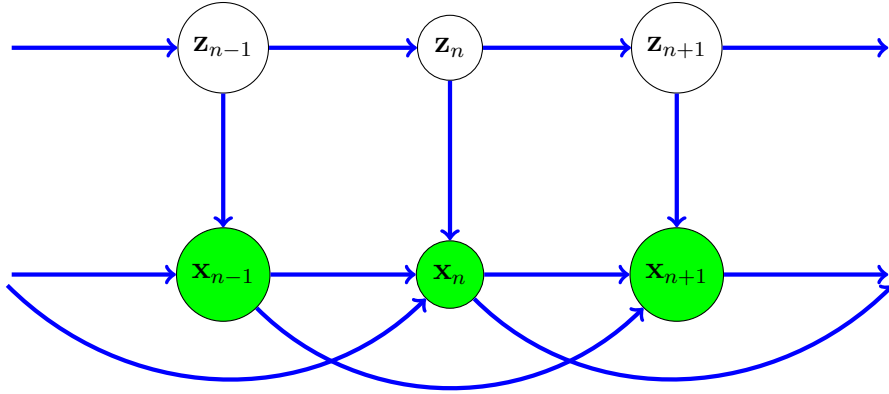
$$x_t = \beta_0 + \beta_1 x_{t-1} + \dots + \beta_p x_{t-p} + \varepsilon_t, \quad \varepsilon_t \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2). \quad (4.86)$$

Στα ARHMM η ακολουθία $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ είναι μια AR(p) διαδικασία που μπορεί να γραφτεί ως

$$\mathbf{x}_n = \beta_0^{(\mathbf{z}_n)} + \beta_1^{(\mathbf{z}_n)} \mathbf{x}_{n-1} + \dots + \beta_p^{(\mathbf{z}_n)} \mathbf{x}_{n-p} + \varepsilon_n \quad (4.87)$$

ή ισοδύναμα

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{S}_n^T \boldsymbol{\beta}^{(\mathbf{z}_n)} + \varepsilon_n \quad (4.88)$$



Σχήμα 4.13: Τμήμα ενός αυτοπαλίνδρομου KMM, στο οποίο κάθε παρατηρήσιμη μεταβλητή εξαρτάται από την αντίστοιχη λανθάνουσα, αλλά και τις δύο προηγούμενες παρατηρήσιμες.

όπου

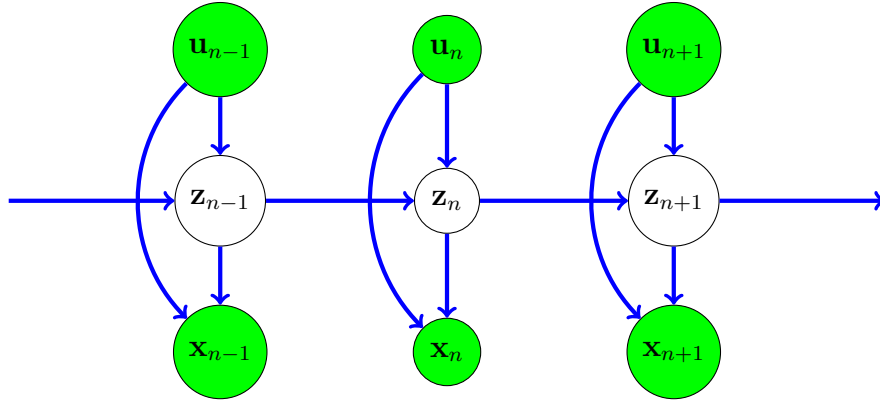
$$\begin{aligned} \mathbf{S}_n &= (\mathbf{1}, \mathbf{x}_{n-1}, \dots, \mathbf{x}_{n-p})^T \\ \boldsymbol{\beta}^{(\mathbf{z}_n)} &= (\beta_0^{(\mathbf{z}_n)}, \beta_1^{(\mathbf{z}_n)}, \dots, \beta_p^{(\mathbf{z}_n)})^T \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n &\sim i.i.d \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}). \end{aligned}$$

Στη γενικότερη περίπτωση του ARHMM με ετεροσκεδαστικότητα, ο όρος $\boldsymbol{\varepsilon}_n$ αντικαθίσταται με $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{z}_n}$, δηλαδή εξαρτάται από την τιμή του \mathbf{z}_n .

Στο Σχήμα 4.13 μπορούμε να εφαρμόσουμε το κριτήριο δ-διαχωρισμού προκειμένου να εξετάσουμε περιπτώσεις δεσμευμένης ανεξαρτησίας. Αν δεσμεύσουμε πάνω στο \mathbf{z}_n , βλέπουμε ότι κάθε μονοπάτι που κατευθύνεται από τη \mathbf{z}_{n-1} στη \mathbf{z}_{n+1} περνά από τουλάχιστον μια παρατηρήσιμη μεταβλητή που είναι τύπου κεφάλι-με-ουρά ως προς τη \mathbf{z}_n , συνεπώς ισχύει όπως και στο κλασικό KMM η δεσμευμένη ανεξαρτησία $\mathbf{z}_{n+1} \perp\!\!\!\perp \mathbf{z}_{n-1} \mid \mathbf{z}_n$. Η ιδιότητα αυτή είναι σημαντική γιατί μας δίνει τη δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε μια εμπροσθοδρομική-οπισθοδρομική αναδρομή στο E βήμα του αλγορίθμου EM, για να υπολογίσουμε τις εκ των υστέρων κατανομές των λανθάνουσών μεταβλητών σε υπολογιστικό χρόνο που είναι γραμμικός ως προς το μήκος της αλυσίδας. Στο M βήμα συμπεριλαμβάνονται λίγες μόνο τροποποιήσεις των εξισώσεων του κλασικού EM.

Άλλη μια περίπτωση είναι το KMM εισαγωγής-εξαγωγής, στο οποίο εκτός από τις μεταβλητές εξαγωγής $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$, έχουμε μια ακολουθία παρατηρήσιμων μεταβλητών $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$, των οποίων οι τιμές επηρεάζουν είτε την κατανομή των λανθάνουσών μεταβλητών, είτε των μεταβλητών εξαγωγής, είτε και τις δύο. Ένα παράδειγμα φαίνεται στο Σχήμα 4.14. Χρησιμοποιώντας το κριτήριο δ-διαχωρισμού και δεσμεύοντας πάνω στη \mathbf{z}_n , παρατηρούμε ότι υπάρχει ένα και μόνο μονοπάτι που συνδέει τους κόμβους \mathbf{z}_{n-1} και \mathbf{z}_{n+1} , το οποίο είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς τον κόμβο \mathbf{z}_n . Επομένως ισχύει και πάλι η δεσμευμένη ανεξαρτησία $\mathbf{z}_{n+1} \perp\!\!\!\perp \mathbf{z}_{n-1} \mid \mathbf{z}_n$. Σαν αποτέλεσμα της ιδιότητας αυτής, μπορούμε να προσδιορίσουμε τις παραμέτρους $\boldsymbol{\theta}$ του μοντέλου μεγιστοποιώντας τη συνάρτηση πιθανοφάνειας $L(\boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{X}|\mathbf{U}, \boldsymbol{\theta})$ (όπου ο \mathbf{U} είναι ένας πίνακας του οποίου οι γραμμές ισούνται με \mathbf{u}_n^T) χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο EM, στον οποίο το E βήμα αποτελείται από εμπροσθοδρομικές και οπισθοδρομικές αναδρομές.

Όπως είναι εμφανές στο Σχήμα 4.14, η συνάρτηση πιθανότητας των πλήρων δεδομένων του



Σχήμα 4.14: Τμήμα ενός ΚΜΜ εισαγωγής-εξαγωγής, στο οποίο τόσο οι πιθανότητες εκπομπής όσο και οι πιθανότητες μετάβασης εξαρτώνται από την ακολουθία των παρατηρήσεων $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$.

ΚΜΜ εισαγωγής-εξαγωγής δίνεται από

$$p(\mathbf{U}, \mathbf{Z}, \mathbf{X}) = p(\mathbf{u}_1)p(\mathbf{z}_1|\mathbf{u}_1)p(\mathbf{x}_1|\mathbf{u}_1, \mathbf{z}_1) \prod_{n=2}^N p(\mathbf{u}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{u}_n)p(\mathbf{x}_n|\mathbf{u}_n, \mathbf{z}_n). \quad (4.89)$$

Συνεπώς μπορούμε να γράψουμε

$$p(\mathbf{U}, \mathbf{Z}, \mathbf{X}) = h(\mathbf{z}_1) \prod_{n=2}^N f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \quad (4.90)$$

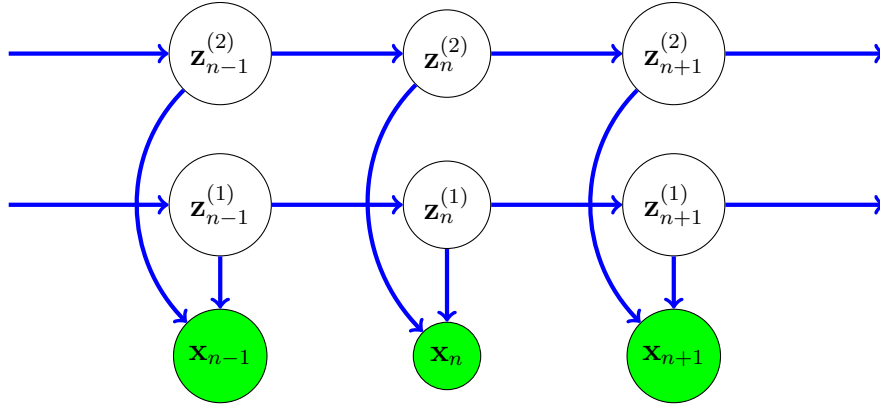
θέτοντας

$$h(\mathbf{z}_1) = p(\mathbf{u}_1)p(\mathbf{z}_1|\mathbf{u}_1)p(\mathbf{x}_1|\mathbf{u}_1, \mathbf{z}_1) \quad (4.91)$$

$$f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{u}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{u}_n)p(\mathbf{x}_n|\mathbf{u}_n, \mathbf{z}_n), \forall n = 2, \dots, N. \quad (4.92)$$

Επομένως μπορούμε να αναγάγουμε τη μελέτη μας από το διατεταγμένο γράφο του Σχήματος 4.14 στο γράφο παραγόντων του Σχήματος 4.11. Αυτό διευκολύνει τη μελέτη μας, γιατί ισχύουν οι αναδρομικές σχέσεις (4.58) και (4.61), οπότε θέτοντας $\alpha(\mathbf{z}_n) = \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n)$ και $\beta(\mathbf{z}_n) = \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n)$, ο εμπροσθοδρομικός αλγόριθμος έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} f_n(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) \alpha(\mathbf{z}_{n-1}) \\ &= \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{u}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{u}_n)p(\mathbf{x}_n|\mathbf{u}_n, \mathbf{z}_n) \alpha(\mathbf{z}_{n-1}) \\ &= p(\mathbf{u}_n)p(\mathbf{x}_n|\mathbf{u}_n, \mathbf{z}_n) \sum_{\mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{u}_n) \alpha(\mathbf{z}_{n-1}) \end{aligned}$$



Σχήμα 4.15: Τμήμα ενός factorial HMM .

και αντίστοιχα ο οπισθοδρομικός αλγόριθμος δίνεται από

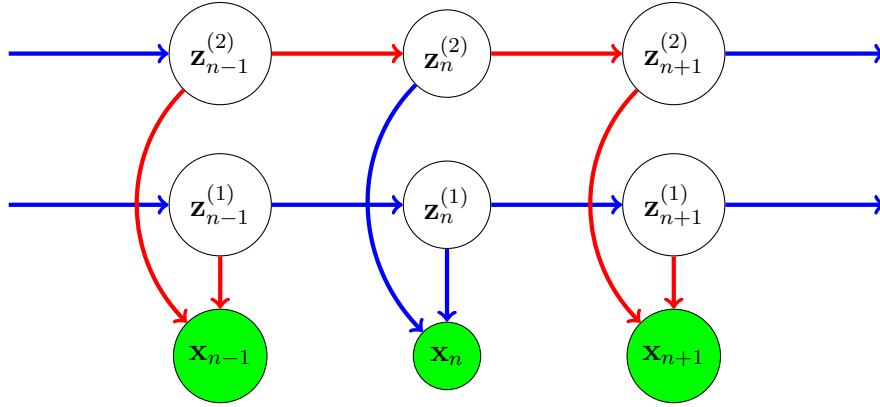
$$\begin{aligned}
 \beta(\mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} f_{n+1}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \beta(\mathbf{z}_{n+1}) \\
 &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} p(\mathbf{u}_{n+1}) p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n, \mathbf{u}_{n+1}) p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{z}_{n+1}) \beta(\mathbf{z}_{n+1}) \\
 &= p(\mathbf{u}_{n+1}) \sum_{\mathbf{z}_{n+1}} p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n, \mathbf{u}_{n+1}) p(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{z}_{n+1}) \beta(\mathbf{z}_{n+1}).
 \end{aligned}$$

Η ποσότητα $\alpha(\mathbf{z}_n)$ ισούται με

$$\begin{aligned}
 \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} h(\mathbf{z}_1) \prod_{k=2}^n f_k(\mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{z}_k) \\
 &= \sum_{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n-1}} p(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\
 &= p(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n)
 \end{aligned}$$

ενώ η $\beta(\mathbf{z}_n)$ με

$$\begin{aligned}
 \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) &= \sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} \prod_{k=n+1}^N f_k(\mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{z}_k) \\
 &= \frac{\sum_{\mathbf{z}_{n+1}, \dots, \mathbf{z}_N} p(\mathbf{z}_n) \prod_{k=n+1}^N p(\mathbf{u}_k) p(\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{u}_k) p(\mathbf{x}_k | \mathbf{u}_k, \mathbf{z}_k)}{p(\mathbf{z}_n)} \\
 &= \frac{p(\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{z}_n)} \\
 &= p(\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{x}_{n+1}, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{z}_n).
 \end{aligned}$$



Σχήμα 4.16: Παράδειγμα ενός μονοπατιού στο factorial HMM που αποτυπώνεται με κόκκινο χρώμα, το οποίο είναι κεφάλι-με-ουρά ως προς τους μη παρατηρήσιμους κόμβους $\mathbf{z}_n^{(2)}$ και $\mathbf{z}_{n+1}^{(2)}$, και είναι κεφάλι-με-κεφάλι ως προς τους παρατηρήσιμους κόμβους \mathbf{x}_{n-1} και \mathbf{x}_{n+1} . Επομένως δεν ισχύει η δεσμευμένη ανεξαρτησία (4.5) και δεν υπάρχει ακριβές E βήμα για το μοντέλο.

Η αρχική συνθήκη για το α είναι

$$\alpha(\mathbf{z}_1) = p(\mathbf{u}_1)p(\mathbf{z}_1|\mathbf{u}_1)p(\mathbf{x}_1|\mathbf{u}_1, \mathbf{z}_1) = \prod_{k=1}^{K_u} \prod_{j=1}^{K_z} \{\pi_k p(\mathbf{z}_1|\phi_k) p(\mathbf{x}_1|\varphi_{kj})\}^{u_{1k} z_{1j}} \quad (4.93)$$

όπου το π είναι το διάνυσμα των πιθανοτήτων της περιθώριας κατανομής $p(\mathbf{u}_1)$, το ϕ είναι το σύνολο των παραμέτρων που ρυθμίζει την κατανομή εκπομπής $p(\mathbf{z}_1|\mathbf{u}_1)$ και το φ είναι το σύνολο των παραμέτρων που ρυθμίζει την κατανομή εκπομπής $p(\mathbf{x}_1|\mathbf{u}_1, \mathbf{z}_1)$.

Όσον αφορά την αρχική συνθήκη για το β , αρχικά μπορούμε να εφαρμόσουμε το αποτέλεσμα (4.63) του αλγορίθμου αθροίσματος γινομένου στο KMM εισαγωγής-εξαγωγής για να πάρουμε

$$p(\mathbf{z}_n, \mathbf{X}, \mathbf{U}) = \mu_{f_n \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) \mu_{f_{n+1} \rightarrow \mathbf{z}_n}(\mathbf{z}_n) = \alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n) \quad (4.94)$$

$$\Rightarrow \gamma(\mathbf{z}_n) = \frac{p(\mathbf{z}_n, \mathbf{X}, \mathbf{U})}{p(\mathbf{X}, \mathbf{U})} = \frac{\alpha(\mathbf{z}_n) \beta(\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{X}, \mathbf{U})}. \quad (4.95)$$

Θέτοντας $n = N$ παίρνουμε

$$\gamma(\mathbf{z}_N) = p(\mathbf{z}_N|\mathbf{X}, \mathbf{U}) = \frac{p(\mathbf{z}_N, \mathbf{X}, \mathbf{U}) \beta(\mathbf{z}_N)}{p(\mathbf{X}, \mathbf{U})} \quad (4.96)$$

που είναι σωστό μόνο αν πάρουμε $\beta(\mathbf{z}_{Nk}) = 1$ για κάθε συνιστώσα του \mathbf{z}_N .

Μια ακόμα παραλλαγή του KMM που είναι άξια αναφοράς είναι το *factorial HMM*, στο οποίο υπάρχουν πολλαπλές ανεξάρτητες μαρκοβιανές αλυσίδες από λανθάνουσες μεταβλητές και η κατανομή μιας παρατηρήσιμης μεταβλητής σε μια οποιαδήποτε χρονική στιγμή εξαρτάται από τις τιμές των λανθάνουσών μεταβλητών την ίδια χρονική στιγμή. Ο κύριος λόγος για να χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο αυτό, είναι ότι αν θέλουμε επί παραδείγματι να συνδυάσουμε 10 διαφορετικές δίτιμες πληροφορίες, ένα σύνηθες KMM θα χρειαζόταν $K = 2^{10}$ λανθάνουσες καταστάσεις, ενώ ένα factorial HMM χρησιμοποιεί 10 δίτιμες λανθάνουσες αλυσίδες. Ωστόσο το

κύριο μειονέκτημα του μοντέλου αυτού είναι η πολυπλοκότητα στη διαχείρισή του. Αν και στο Μ βήμα δεν εμφανίζονται αλλαγές, στο Ε βήμα παρουσιάζονται δυσκολίες γιατί η παρατήρηση των μεταβλητών \mathbf{x} δημιουργεί εξαρτήσεις μεταξύ των λανθάνουσών αλυσίδων. Για παράδειγμα στο Σχήμα 4.15 οι μεταβλητές $\mathbf{z}_n^{(1)}$ και $\mathbf{z}_n^{(2)}$ συνδέονται με ένα μονοπάτι που είναι κεφάλι-με-κεφάλι ως προς τη μεταβλητή \mathbf{x}_n , οπότε δεν είναι δ-διαχωρισμένες. Επιπλέον δεν ισχύει η ιδιότητα $\mathbf{z}_{n+1} \perp\!\!\!\perp \mathbf{z}_{n-1} \mid \mathbf{z}_n$ για καμία από τις μαρκοβιανές αλυσίδες, όπως μπορούμε να δούμε στο γράφο του Σχήματος 4.16 χρησιμοποιώντας το κριτήριο δ-διαχωρισμού. Επομένως το Ε βήμα δεν αποτελείται από M ανεξάρτητες εμπροσθοδρομικές και οπισθοδρομικές αναδρομές για καθεμία από τις M μαρκοβιανές αλυσίδες. Ας υποθέσουμε ότι όλες οι λανθάνουσες μεταβλητές έχουν K καταστάσεις. Υπάρχουν K^M συνδυασμοί από λανθάνουσες μεταβλητές σε κάθε δεδομένη χρονική στιγμή, επομένως μπορούμε να μετατρέψουμε το μοντέλο σε ένα ισοδύναμο κλασικό KMM με μία αλυσίδα από λανθάνουσες μεταβλητές, που καθεμία έχει K^M λανθάνουσες καταστάσεις, και να τρέξουμε τις συνήθεις εμπροσθοδρομικές και οπισθοδρομικές αναδρομές του Ε βήματος. Το υπολογιστικό κόστος των αναδρομών είναι τάξης $O(NK^{2M})$, δηλαδή είναι εκθετικό ως συνάρτηση του αριθμού M των λανθάνουσών αλυσίδων, και επομένως διαχειρίσιμο μόνο για πολύ μικρές τιμές του M . Μια λύση του προβλήματος αυτού θα ήταν να κάνουμε χρήση μεθόδων δειγματοληψίας.

Κεφάλαιο 5

Γραμμικά Δυναμικά Συστήματα

5.1 Γραμμικά δυναμικά συστήματα

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να μετρήσουμε την τιμή μιας άγνωστης ποσότητας \mathbf{z} χρησιμοποιώντας έναν αισθητήρα που δίνει μια παρατήρηση \mathbf{x} που αντιστοιχεί στην τιμή του \mathbf{z} συν ένα σφάλμα που ακολουθεί κανονική κατανομή με μέση τιμή μηδέν. Πέραν της προφανούς λύσης να υποθέσουμε ότι $\mathbf{z}=\mathbf{x}$, μπορούμε να πάρουμε τον μέσο όρο από πολλές μετρήσεις, ώστε τα τυχαία σφάλματα να ακυρώσουν το ένα το άλλο. Υποθέτουμε τώρα ότι θέλουμε να μετρήσουμε μια ποσότητα \mathbf{z} η οποία αλλάζει με το χρόνο. Κάποια χρονική στιγμή έχουμε πάρει μετρήσεις του \mathbf{x} , έστω τις $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ και θέλουμε να βρούμε τις αντίστοιχες τιμές $\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N$. Για να εκτιμήσουμε την τιμή του \mathbf{z}_N μπορούμε να πάρουμε μόνο τις πιο πρόσφατες μετρήσεις, έστω τις $\mathbf{x}_{N-L}, \dots, \mathbf{x}_N$, και να πάρουμε το μέσο όρο τους. Εάν το \mathbf{z} αλλάζει με αργό ρυθμό και το επίπεδο σφάλματος του αισθητήρα είναι μεγάλο, το λογικότερο είναι να πάρουμε τον μέσο όρο μιας μεγάλης ακολουθίας παρατηρήσεων. Αντίθετα, αν το \mathbf{z} αλλάζει γρήγορα και το επίπεδο σφάλματος είναι μικρό, συμφέρει να χρησιμοποιήσουμε απευθείας το \mathbf{x}_N σαν εκτίμηση του \mathbf{z}_N . Ίσως να ήταν καλύτερη επιλογή αν παίρναμε μια σταθμισμένη μέση τιμή, στην οποία οι πιο πρόσφατες παρατηρήσεις έχουν μεγαλύτερη βαρύτητα σε σχέση με τις παλαιότερες.

Όλα αυτά τα επιχειρήματα δείχνουν λογικά, όμως δεν μας δείχνουν το πώς θα φτιάχνουμε κάθε φορά το βέλτιστο σταθμισμένο μέσο όρο. Ευτυχώς μπορούμε να αντιμετωπίσουμε τέτοια προβλήματα πιο συστηματικά, χρησιμοποιώντας πιθανοθεωρητικά μοντέλα που συν τοις άλλοις εφαρμόζουν για τη συμπερασματολογία μεθόδους που έχουμε ήδη δει στις προηγούμενες ενότητες. Ένα τέτοιο μοντέλο είναι και το *γραμμικό δυναμικό σύστημα*.

Τα KMM έχουμε δει ότι αντιστοιχούν στο μοντέλο του Σχήματος 4.4, όπου οι λανθάνουσες μεταβλητές είναι διακριτές αλλά οι κατανομές εκπομπής είναι αυθαίρετες. Ο γράφος φυσικά περιγράφει μια ευρύτερη κλάση κατανομών, που όλες τους παραγοντοποιούνται σύμφωνα με την (4.6). Θεωρούμε λοιπόν συνεχείς λανθάνουσες μεταβλητές οι οποίες διατηρούν την ίδια γενική μορφή των αλγορίθμων συμπερασματολογίας όπως αυτή των KMM, με τη διαφορά ότι τα αθροίσματα ως προς \mathbf{z} μετατρέπονται σε ολοκληρώματα.

Ένα στοιχείο που θέλουμε οπωσδήποτε είναι οι αλγόριθμοι της συμπερασματολογίας να έχουν γραμμικό αριθμό υπολογισμών σε σχέση με το μήκος της αλυσίδας. Όπως για παράδειγμα στην (4.71), θέλουμε η $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1})$ και η $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$ να έχουν την ίδια συναρτησιακή μορφή. Με λίγα λόγια η κατανομή δεν πρέπει να γίνεται πολυπλοκότερη σε κάθε στάδιο, παρά μόνο να αλλάζουν οι τιμές των παραμέτρων της. Οι μοναδικές κατανομές που έχουν αυτή την ιδιότητα της

κλειστότητας ως προς τον πολλαπλασιασμό είναι αυτές που ανήκουν στην εκθετική οικογένεια κατανομών.

Εδώ θα ασχοληθούμε με την πιο σημαντική από πρακτικής σημασίας κατανομή, που είναι η κανονική. Θεωρούμε λοιπόν ένα μοντέλο που αναπαριστάται με το γράφο του Σχήματος 4.4, στο οποίο τόσο οι λανθάνουσες όσο και οι παρατηρήσιμες μεταβλητές είναι πολυδιάστατες κανονικές κατανομές με μέση τιμή που είναι γραμμική συνάρτηση των τιμών των γονέων τους στο γράφο. Τα μοντέλα αυτά ονομάζονται *γραμμικά-κανονικά μοντέλα*. Αποδεικνύεται ότι ένας διατεταγμένος γράφος από κανονικά στοιχεία με τέτοιες μέσες τιμές είναι ισοδύναμος με μια από κοινού κανονική κατανομή για όλες τις μεταβλητές. Επιπλέον, περιθώριες κατανομές όπως η $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$ είναι επίσης κανονική, επομένως η συναρτησιακή μορφή των μηνυμάτων παραμένει ίδια και θα πάρουμε έναν αποτελεσματικό αλγόριθμο συμπερασματολογίας. Αν όμως για παράδειγμα πάρουμε κατανομές εκπομπής $p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)$ ίσες με μίξη K κανονικών που καθεμία έχει μέση τιμή γραμμική ως προς \mathbf{z}_n , τότε ακόμα και αν η $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_1)$ είναι κανονική, η ποσότητα $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_2)$ θα είναι μια μίξη K κανονικών, η $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_3)$ θα είναι μια μίξη K^2 κανονικών κ.ο.κ., οπότε δεν θα έχει αξία η ακριβής συμπερασματολογία.

Επειδή το μοντέλο αναπαριστάται από ένα διατεταγμένο δέντρο, τα προβλήματα συμπερασματολογίας μπορούν να επιλυθούν χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινομένου. Οι εμπροσθοδρομικές αναδρομές που είναι ανάλογες με τα α μηνύματα των KMM, είναι γνωστές ως *εξισώσεις φιλτραρίσματος Kalman*, ενώ οι οπισθοδρομικές αναδρομές που είναι ανάλογες με τα β μηνύματα, είναι γνωστές ως *εξισώσεις λείανσης Kalman*, ή αλλιώς ως *εξισώσεις Rauch-Tung-Striebel (RTS)*.

Επειδή τα γραμμικά δυναμικά συστήματα είναι γραμμικά-κανονικά μοντέλα, η από κοινού κατανομή όλων των μεταβλητών είναι κανονική, και επομένως όλες οι δεσμευμένες και περιθώριες κατανομές θα είναι κανονικές. Αποδεικνύεται επομένως ότι η ακολουθία των ξεχωριστά πιο πιθανών λανθάνουσών μεταβλητών ταυτίζεται με την πιο πιθανή λανθάνουσα ακολουθία, και κατά συνέπεια δεν χρειάζεται να βρούμε τον ανάλογο του αλγορίθμου Viterbi για τα γραμμικά δυναμικά συστήματα. Πράγματι, έστω $p(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N|\mathbf{X})$ η από κοινού εκ των υστέρων κατανομή των λανθάνουσών μεταβλητών δοθέντων των παρατηρήσεων. Γνωρίζουμε ότι η από κοινού κατανομή όλων των μεταβλητών είναι κανονική, άρα και η $p(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N|\mathbf{X})$ θα είναι επίσης κανονική με μέση τιμή έστω $(\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_N)$. Επειδή η μέγιστη πυκνότητα της κανονικής κατανομής επιτυγχάνεται στη μέση τιμή, η πιο πιθανή ακολουθία λανθάνουσών μεταβλητών είναι η $(\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_N)$. Επιπροσθέτως η $p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X})$ όπου $n = 1, \dots, N$, ως περιθώρια της $p(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N|\mathbf{X})$ θα είναι και αυτή κανονική με μέση τιμή ίση με $\boldsymbol{\mu}_n$. Ξανά, επειδή η πυκνότητα της κανονικής μεγιστοποιείται στη μέση τιμή, η πιο πιθανή τιμή του \mathbf{z}_n δοθέντων των παρατηρήσεων ισούται με $\boldsymbol{\mu}_n$. Επομένως η ακολουθία των πιο πιθανών τιμών (ξεχωριστά) των λανθάνουσών μεταβλητών είναι $(\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_N)$.

Επειδή το μοντέλο έχει γραμμικές-κανονικές δεσμευμένες κατανομές, μπορούμε να γράψουμε τις κατανομές μετάβασης και εκπομπής στη μορφή

$$p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n|\mathbf{A}\mathbf{z}_{n-1}, \boldsymbol{\Gamma}) \quad (5.1)$$

$$p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n|\mathbf{C}\mathbf{z}_n, \boldsymbol{\Sigma}). \quad (5.2)$$

Η αρχική λανθάνουσα μεταβλητή έχει επίσης κανονική κατανομή που δίνεται από

$$p(\mathbf{z}_1) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_1|\boldsymbol{\mu}_0, \mathbf{P}_0). \quad (5.3)$$

Για να είναι απλούστερος ο συμβολισμός έχουμε παραλείψει τις σταθερές στις μέσες τιμές, κάτι που δεν περιορίζει τη γενικότητα. Πράγματι έστω

$$p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{A}\mathbf{z}_{n-1} + \mathbf{a}, \mathbf{\Gamma}) \quad (5.4)$$

$$p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{C}\mathbf{z}_n + \mathbf{c}, \mathbf{\Sigma}). \quad (5.5)$$

Παρατηρούμε ότι

$$\mathbf{A}\mathbf{z} + \mathbf{a} = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1K} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{K1} & \dots & A_{KK} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_K \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^K A_{1j}z_j + a_1 \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^K A_{Kj}z_j + a_K \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

και επιπλέον

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{z}} = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1K} & a_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ A_{K1} & \dots & A_{KK} & a_K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_K \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^K A_{1j}z_j + a_1 \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^K A_{Kj}z_j + a_K \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Άρα ισοδύναμα $p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) = p(\mathbf{z}_n | \tilde{\mathbf{z}}_{n-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{z}}_{n-1}, \mathbf{\Gamma})$.

Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο, ορίζοντας

$$\tilde{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & \dots & C_{1K} & c_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ C_{K1} & \dots & C_{KK} & c_K \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

παίρνουμε ότι $\mathbf{C}\mathbf{z}_n + \mathbf{c} = \tilde{\mathbf{C}}\tilde{\mathbf{z}}_n$ και συνεπώς $p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n | \tilde{\mathbf{z}}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \tilde{\mathbf{C}}\tilde{\mathbf{z}}_n, \mathbf{\Sigma})$.

Μπορούμε να διατυπώσουμε αυτές τις κατανομές με έναν εναλλακτικό ισοδύναμο τρόπο, ως γραμμικές εξισώσεις με σφάλμα που δίνεται από

$$\mathbf{z}_n = \mathbf{A}\mathbf{z}_{n-1} + \mathbf{w}_n \quad (5.9)$$

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{C}\mathbf{z}_n + \mathbf{v}_n \quad (5.10)$$

$$\mathbf{z}_1 = \boldsymbol{\mu}_0 + \mathbf{u} \quad (5.11)$$

όπου τα σφάλματα ακολουθούν τις κατανομές

$$\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{w} | \mathbf{0}, \mathbf{\Gamma}) \quad (5.12)$$

$$\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{v} | \mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}) \quad (5.13)$$

$$\mathbf{u} \sim \mathcal{N}(\mathbf{u} | \mathbf{0}, \mathbf{P}_0). \quad (5.14)$$

5.2 Συμπερασματολογία στα ΓΔΣ

Οι παράμετροι του μοντέλου $\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{A}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{\Sigma}, \mathbf{C}, \boldsymbol{\mu}_0, \mathbf{P}_0\}$ μπορούν να προσδιοριστούν μέσω του αλγορίθμου EM. Αρχικά, στο E βήμα πρέπει να λύσουμε το πρόβλημα του προσδιορισμού των

περιθώριων πιθανοτήτων των λανθάνουσών μεταβλητών δοθέντων των παρατηρήσεων. Επίσης σε πολλές εφαρμογές πραγματικού χρόνου θέλουμε να κάνουμε πρόβλεψη τόσο για την επόμενη λανθάνουσα μεταβλητή \mathbf{z}_n όσο και για την επόμενη παρατήρηση \mathbf{x}_n δοθέντων των παρατηρήσεων $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$. Αυτά τα προβλήματα μπορούν να επιλυθούν αποτελεσματικά χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο αθροίσματος-γινομένου, που στα ΓΔΣ δίνει τη θέση του στις εξισώσεις φίλτρα-ρίσματος Kalman και στις εξισώσεις λείανσης Kalman.

Επειδή τα ΓΔΣ είναι γραμμικά-κανονικά μοντέλα, η από κοινού κατανομή όλων των μεταβλητών είναι κανονική, και έτσι θα μπορούσαμε να λύσουμε προβλήματα συμπερασματολογίας χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα από τη θεωρία της πολυδιάστατης κανονικής κατανομής για τις δεσμευμένες και τις περιθώριες πιθανότητες. Όμως ο αλγόριθμος αθροίσματος-γινομένου μας παρέχει έναν πιο αποτελεσματικό τρόπο για τους υπολογισμούς αυτούς.

Τα ΓΔΣ έχουν και αυτά την παραγοντοποίηση (4.6), όπως και τα KMM, και μπορούν να περιγραφούν από τους γράφους παραγόντων των Σχημάτων 4.10 και 4.11. Γι' αυτό το λόγο οι αλγόριθμοι συμπερασματολογίας έχουν την ίδια ακριβώς μορφή με τη διαφορά ότι τα αθροίσματα ως προς τις λανθάνουσες μεταβλητές αντικαθίστανται από ολοκληρώματα. Αρχικά θα ασχοληθούμε με τις εμπροσθοδρομικές εξισώσεις. Θεωρούμε ως ρίζα τη \mathbf{z}_N και στέλνουμε μηνύματα από το φύλλο $h(\mathbf{z}_1)$ προς τη ρίζα. Από την (5.3), το αρχικό μήνυμα είναι κανονικό, και επειδή όλοι οι παράγοντες είναι κανονικοί, όλα τα επακόλουθα μηνύματα θα είναι επίσης κανονικά. Από σύμβαση, τα μηνύματα που θα στείλουμε είναι κανονικοποιημένες περιθώριες κατανομές που αντιστοιχούν στην $p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ και ορίζονται από

$$\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n|\boldsymbol{\mu}_n, \mathbf{V}_n). \quad (5.15)$$

Αυτό είναι ακριβώς αντίστοιχο με τη μετάδοση των μηνυμάτων κλιμάκωσης στα KMM που δίνονται από την (4.71), και συνεπώς η αναδρομή τώρα παίρνει τη μορφή

$$c_n \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n) \int \hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}) d\mathbf{z}_{n-1}. \quad (5.16)$$

Αν αντικαταστήσουμε τις σχέσεις (5.1) και (5.2) στις δύο δεσμευμένες κατανομές και την (5.15), η (5.16) γίνεται

$$c_n \mathcal{N}(\mathbf{z}_n|\boldsymbol{\mu}_n, \mathbf{V}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n|\mathbf{C}\mathbf{z}_n, \boldsymbol{\Sigma}) \int \mathcal{N}(\mathbf{z}_n|\mathbf{A}\mathbf{z}_{n-1}, \boldsymbol{\Gamma}) \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1}|\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{V}_{n-1}) d\mathbf{z}_{n-1}. \quad (5.17)$$

Υποθέτουμε ότι τα $\boldsymbol{\mu}_{n-1}$ και \mathbf{V}_{n-1} είναι γνωστά και θέλουμε να προσδιορίσουμε τις τιμές των $\boldsymbol{\mu}_n$ και \mathbf{V}_n . Σε πρώτο στάδιο πρέπει να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα. Στη συνέχεια θα χρειαστεί να θέσουμε ορισμένες ποσότητες ίσες με x και y , κάτι που δεν πρέπει να μας δημιουργεί σύγχυση ούτε να μας παραπέμπει στις παρατηρήσιμες και στις λανθάνουσες μεταβλητές. Απλά θα βοηθήσουν στην καλύτερη κατανόηση των αποτελεσμάτων.

Θέτουμε $y = \mathbf{z}_n|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$ και $x = \mathbf{z}_{n-1}|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$. Τότε

$$\begin{aligned} p(x) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1}|\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{V}_{n-1}) \\ p(y|x) &= p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) = p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n|\mathbf{A}\mathbf{z}_{n-1}, \boldsymbol{\Gamma}). \end{aligned}$$

Επομένως, με βάση το αποτέλεσμα (1.48) της Ενότητας 1.6, έπεται ότι

$$\begin{aligned}
& \int \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{A}\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{\Gamma}) \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1} | \boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{V}_{n-1}) d\mathbf{z}_{n-1} \\
&= \int p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) d\mathbf{z}_{n-1} \\
&= p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) = p(y) \\
&= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{A}\mathbf{V}_{n-1}\mathbf{A}^T + \mathbf{\Gamma}) \\
&= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{P}_{n-1}), \tag{5.18}
\end{aligned}$$

όπου έχουμε θέσει

$$\mathbf{P}_{n-1} = \mathbf{A}\mathbf{V}_{n-1}\mathbf{A}^T + \mathbf{\Gamma}. \tag{5.19}$$

Έστω τώρα ότι $y = \mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$ και $x = \mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$. Τότε επειδή

$$\begin{aligned}
p(y|x) &= p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{z}_n) = p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{C}\mathbf{z}_n, \mathbf{\Sigma}) \\
p(x) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{P}_{n-1})
\end{aligned}$$

συνεπάγεται λόγω της (1.48) ότι

$$c_n = p(y) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T + \mathbf{\Sigma}) \tag{5.20}$$

και λόγω των (1.49) και (1.50) ότι

$$\begin{aligned}
p(x|y) &= p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\
&= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | (\mathbf{P}_{n-1}^{-1} + \mathbf{C}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1} \{ \mathbf{C}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}_n + \mathbf{P}_{n-1}^{-1}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} \}, (\mathbf{P}_{n-1}^{-1} + \mathbf{C}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1}). \tag{5.21}
\end{aligned}$$

Όμως

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}_n &= (\mathbf{P}_{n-1}^{-1} + \mathbf{C}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1} \\
&= \mathbf{P}_{n-1} - \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T(\mathbf{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1} \\
&= (\mathbf{I} - \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T(\mathbf{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C})\mathbf{P}_{n-1} \\
&= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n\mathbf{C})\mathbf{P}_{n-1} \tag{5.22}
\end{aligned}$$

όπου στη δεύτερη ισότητα έχουμε χρησιμοποιήσει την ταυτότητα αντιστροφής πινάκων (1.34), και επιπλέον ο πίνακας

$$\mathbf{K}_n = \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T(\mathbf{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T)^{-1} \tag{5.23}$$

ορίζεται ως ο πίνακας κέρδους *Kalman*. Επίσης, λόγω της ταυτότητας αντιστροφής πινάκων (1.32) έχουμε

$$(\mathbf{P}_{n-1}^{-1} + \mathbf{C}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}^T\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}_n = \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T(\mathbf{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{x}_n = \mathbf{K}_n\mathbf{x}_n. \tag{5.24}$$

Άρα

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}_n &= \mathbf{K}_n\mathbf{x}_n + (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n\mathbf{C})\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{P}_{n-1}^{-1}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} \\
&= \mathbf{K}_n\mathbf{x}_n + (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n\mathbf{C})\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} \\
&= \mathbf{K}_n\mathbf{x}_n + \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} - \mathbf{K}_n\mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} \\
&= \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} + \mathbf{K}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}). \tag{5.25}
\end{aligned}$$

Ανακεφαλαιώνοντας, έχουμε τα εξής αποτελέσματα

$$\boldsymbol{\mu}_n = \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} + \mathbf{K}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}) \quad (5.26)$$

$$\mathbf{V}_n = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n\mathbf{C})\mathbf{P}_{n-1} \quad (5.27)$$

$$c_n = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T + \boldsymbol{\Sigma}). \quad (5.28)$$

Επομένως, δοθέντων των τιμών των $\boldsymbol{\mu}_{n-1}$ και \mathbf{V}_{n-1} και της νέας παρατήρησης \mathbf{x}_n , μπορούμε να υπολογίσουμε την ποσότητα $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$ με μέση τιμή $\boldsymbol{\mu}_n$ και συνδιασπορά ίση με \mathbf{V}_n , καθώς και τη σταθερά c_n .

Οι αρχικές συνθήκες για τις αναδρομικές εξισώσεις προκύπτουν από την

$$c_1 \hat{\alpha}(\mathbf{z}_1) = p(\mathbf{z}_1)p(\mathbf{x}_1 | \mathbf{z}_1). \quad (5.29)$$

Επειδή $p(\mathbf{x}_1 | \mathbf{z}_1) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_1 | \mathbf{C}\mathbf{z}_1, \boldsymbol{\Sigma})$ και $p(\mathbf{z}_1) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_1 | \boldsymbol{\mu}_0, \mathbf{P}_0)$, η c_1 δίνεται από

$$c_1 = p(\mathbf{x}_1) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_1 | \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_0, \mathbf{C}\mathbf{P}_0\mathbf{C}^T + \boldsymbol{\Sigma}) \quad (5.30)$$

και επιπλέον

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}_1 | \mathbf{x}_1) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_1 | \boldsymbol{\mu}_1, \mathbf{V}_1) \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_1 | (\mathbf{P}_0^{-1} + \mathbf{C}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1} \{ \mathbf{C}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}_0 + \mathbf{P}_0^{-1}\boldsymbol{\mu}_0 \}, (\mathbf{P}_0^{-1} + \mathbf{C}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1}) \end{aligned} \quad (5.31)$$

όπου

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_1 &= (\mathbf{P}_0^{-1} + \mathbf{C}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1} \\ &= \mathbf{P}_0 - \mathbf{P}_0\mathbf{C}^T(\boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_0\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{P}_0 \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{P}_0\mathbf{C}^T(\boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_0\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C})\mathbf{P}_0 \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_1\mathbf{C})\mathbf{P}_0 \end{aligned} \quad (5.32)$$

και στη δεύτερη ισότητα έχουμε εφαρμόσει την ισότητα (1.34), και επιπλέον

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{P}_0\mathbf{C}^T(\boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_0\mathbf{C}^T)^{-1}. \quad (5.33)$$

Επίσης λόγω της ισότητας (1.32), έχουμε

$$(\mathbf{P}_0^{-1} + \mathbf{C}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}_1 = \mathbf{P}_0\mathbf{C}^T(\boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_0\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{x}_1 = \mathbf{K}_1\mathbf{x}_1. \quad (5.34)$$

Άρα

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_1 &= \mathbf{K}_1\mathbf{x}_1 + (\mathbf{I} - \mathbf{K}_1\mathbf{C})\mathbf{P}_0\mathbf{P}_0^{-1}\boldsymbol{\mu}_0 \\ &= \mathbf{K}_1\mathbf{x}_1 + (\mathbf{I} - \mathbf{K}_1\mathbf{C})\boldsymbol{\mu}_0 \\ &= \boldsymbol{\mu}_0 + \mathbf{K}_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_0). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Να σημειωθεί ότι η συνάρτηση πιθανοφάνειας για τα $\Gamma\Delta\Sigma$ δίνεται από την (4.75), όπου οι παράγοντες c_n βρίσκονται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις φιλτραρίσματος Kalman.

Μπορούμε τώρα να δώσουμε μια ερμηνεία για τα βήματα που χρειάζονται για τον υπολογισμό της πειθώριας πιθανότητας $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$, ξεκινώντας από την $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1})$. Στην (5.26), η ποσότητα $\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}$

μπορεί να θεωρηθεί ως πρόβλεψη της μέσης τιμής της \mathbf{z}_n , που προκύπτει παίρνοντας τη μέση τιμή της \mathbf{z}_{n-1} και προωθώντας την ένα βήμα μπροστά χρησιμοποιώντας τον πίνακα μετάβασης \mathbf{A} . Η προβλεφθείσα μέση τιμή $\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}$ για την \mathbf{z}_n συνεπάγεται μια προβλεφθείσα παρατήρηση για την \mathbf{x}_n αν πολλαπλασιαστεί με τον πίνακα εκπομπής \mathbf{C} , δηλαδή την τιμή $\mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}$. Οπότε επιστρέφοντας στην εξίσωση (5.26), βλέπουμε ότι η μέση τιμή της $\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{z}_n)$ προκύπτει παίρνοντας την προβλεφθείσα μέση τιμή $\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}$ και προσθέτοντας μια διόρθωση που είναι ανάλογη του σφάλματος $\mathbf{x}_n - \mathbf{C}\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1}$ ανάμεσα στην προβλεφθείσα παρατήρηση και στην πραγματική παρατήρηση. Αυτός ο συντελεστής αναλογίας της διόρθωσης δίνεται από τον πίνακα κέρδους Kalman. Επομένως μπορούμε να δούμε τις εξισώσεις φιλτραρίσματος Kalman σαν μια διαδικασία για να κάνουμε διαδοχικές προβλέψεις και στη συνέχεια να διορθώνουμε τις προβλέψεις αυτές με τη βοήθεια των νέων παρατηρήσεων.

Μια ενδιαφέρουσα διαπίστωση είναι ότι όταν εφαρμόζουμε τις εξισώσεις φιλτραρίσματος Kalman σε ανεξάρτητες παρατηρήσεις, το αποτέλεσμα είναι η εκτίμηση μέγιστης πιθανοφάνειας για μια κανονική κατανομή. Ας θεωρήσουμε το πρόβλημα της εύρεσης της μέσης τιμής μ μιας κανονικής τ.μ. x , από την οποία διαθέτουμε ένα σύνολο ανεξαρτήτων παρατηρήσεων $\{x_1, \dots, x_N\}$. Για να το μοντελοποιήσουμε, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα ΓΔΣ με λανθάνουσες μεταβλητές $\{z_1, \dots, z_N\}$ και παραμέτρους ίσες με $\mathbf{A} = 1, \mathbf{\Gamma} = 0, \mathbf{\Sigma} = \sigma^2, \mathbf{C} = 1, \boldsymbol{\mu}_0 = \mu_0, \mathbf{P}_0 = \sigma_0^2$. Αυτό που θα δείξουμε είναι ότι οι εξισώσεις φιλτραρίσματος Kalman είναι ισοδύναμες με τις παρακάτω εξισώσεις για την εκ των υστέρων πιθανότητα του μ δοθέντων των δεδομένων. Αυτή δίνεται από

$$p(\mu|\mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mu|\mu_N, \sigma_N^2) \quad (5.36)$$

όπου

$$\mu_N = \frac{\sigma^2}{N\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0 + \frac{N\sigma_0^2}{N\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_{\text{ML}} \quad (5.37)$$

$$\frac{1}{\sigma_N^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{N}{\sigma^2} \quad (5.38)$$

είναι οι δύο εξισώσεις προς απόδειξη και

$$\mu_{\text{ML}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n. \quad (5.39)$$

Θα αποδείξουμε το ζητούμενο επαγωγικά. Για αρχή έχουμε

$$K_1 = \frac{\sigma_0^2}{\sigma^2 + \sigma_0^2}$$

και

$$\mu_1 = \mu_0 + K_1(x_1 - \mu_0) = \mu_0 + \frac{\sigma_0^2}{\sigma^2 + \sigma_0^2}(x_1 - \mu_0) = \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0 + \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}x_1$$

$$\sigma_1^2 = (1 - K_1C)P_0 = \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\sigma_0^2 \Rightarrow \frac{1}{\sigma_1^2} = \frac{\sigma_0^2 + \sigma^2}{\sigma^2\sigma_0^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}.$$

Έστω τυχαίο n . Τότε

$$\begin{aligned} P_{n-1} &= AV_{n-1}A^T + \Gamma = V_{n-1} \\ K_n &= P_{n-1}C^T(\Sigma + CP_{n-1}C^T)^{-1} = V_{n-1}(\sigma^2 + V_{n-1})^{-1} \\ \mu_n &= \mu_{n-1} + \frac{V_{n-1}}{\sigma^2 + V_{n-1}}(x_n - \mu_{n-1}) = \frac{V_{n-1}}{\sigma^2 + V_{n-1}}x_n + \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + V_{n-1}}\mu_{n-1} \\ V_n &= \left(1 - \frac{V_{n-1}}{\sigma^2 + V_{n-1}}\right)V_{n-1} = \frac{\sigma^2 V_{n-1}}{\sigma^2 + V_{n-1}} \\ &\Rightarrow \frac{1}{\sigma_n^2} = \frac{1}{\sigma_{n-1}^2} + \frac{1}{\sigma^2} \end{aligned}$$

Έστω ότι για κάποιο n ισχύουν

$$\begin{aligned} \mu_n &= \frac{\sigma^2 \mu_0}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} + \frac{n\sigma_0^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \\ \frac{1}{\sigma_n^2} &= \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2}. \end{aligned}$$

Τότε

$$\frac{1}{\sigma_n^2} = \frac{\sigma^2 + n\sigma_0^2}{\sigma^2 \sigma_0^2} \Rightarrow \sigma_n^2 = \frac{\sigma^2 \sigma_0^2}{\sigma^2 + n\sigma_0^2}$$

και

$$\begin{aligned} K_{n+1} &= \frac{V_n}{\sigma^2 + V_n} = \frac{\sigma_n^2}{\sigma^2 + \sigma_n^2} = \frac{\frac{\sigma^2 \sigma_0^2}{\sigma^2 + n\sigma_0^2}}{\frac{\sigma^2(\sigma^2 + n\sigma_0^2) + \sigma_0^2 \sigma^2}{\sigma^2 + n\sigma_0^2}} \\ &= \frac{\sigma_0^2}{\sigma^2 + n\sigma_0^2 + \sigma_0^2} = \frac{\sigma_0^2}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2}. \end{aligned}$$

Επομένως

$$\begin{aligned} \mu_{n+1} &= \mu_n + K_{n+1}(x_{n+1} - \mu_n) = K_{n+1}x_{n+1} + (1 - K_{n+1})\mu_n \\ &= K_{n+1}x_{n+1} + \frac{\sigma^2 + n\sigma_0^2}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2} \mu_n \\ &= \frac{\sigma_0^2}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2} x_{n+1} + \frac{\sigma^2 \mu_0}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2} + \frac{n\sigma_0^2}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2} \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \\ &= \frac{\sigma^2 \mu_0}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2} + \frac{(n+1)\sigma_0^2}{\sigma^2 + (n+1)\sigma_0^2} \frac{\sum_{i=1}^{n+1} x_i}{n+1} \end{aligned}$$

και

$$\frac{1}{\sigma_{n+1}^2} = \frac{1}{\sigma_n^2} + \frac{1}{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n+1}{\sigma^2}$$

οπότε το ζητούμενο έχει αποδειχθεί.

Ας πάρουμε μια άλλη ειδική περίπτωση των ΓΔΣ. Συγκεκριμένα, έστω $\mathbf{A} = \mathbf{0}$, $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{I}$, $\mathbf{\Sigma} = \sigma^2\mathbf{I}$, $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$, δηλαδή

$$p(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}|\mathbf{0}, \mathbf{I}) \quad (5.40)$$

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mathbf{Cz}, \sigma^2\mathbf{I}). \quad (5.41)$$

Τότε θα δείξουμε ότι

$$p(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}|\mathbf{M}^{-1}\mathbf{C}^T\mathbf{x}, \sigma^2\mathbf{M}^{-1}) \quad (5.42)$$

όπου

$$\mathbf{M} = \mathbf{C}^T\mathbf{C} + \sigma^2\mathbf{I}. \quad (5.43)$$

Το ιδιαίτερο της περίπτωσης αυτής, είναι το γεγονός ότι αποτελεί ένα κλασικό αποτέλεσμα στη θεωρία της πιθανοθεωρητικής ανάλυσης σε κύριες συνιστώσες.

Αρχικά βλέπουμε ότι για κάθε n , ισχύει ότι $\mathbf{P}_n = \mathbf{I}$. Για τον υπολογισμό των \mathbf{K}_n έχουμε τα εξής

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_n &= \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T(\mathbf{\Sigma} + \mathbf{C}\mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T)^{-1} = \mathbf{C}^T(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1} \\ &(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1} = (\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{I}\mathbf{C}^T)^{-1} = \sigma^{-2}\mathbf{I} - \sigma^{-2}\mathbf{C}(\mathbf{I} + \mathbf{C}^T\sigma^{-2}\mathbf{I}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}^T\sigma^{-2}\mathbf{I} \\ &= \sigma^{-2}\mathbf{I} - \sigma^{-2}\mathbf{C}\sigma^2(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}^T\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}^T\sigma^{-2}\mathbf{I} \\ &\Rightarrow \mathbf{K}_n = \sigma^{-2}\mathbf{C}^T - \sigma^{-2}\mathbf{C}^T\mathbf{C}(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}^T\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}^T. \end{aligned}$$

Επίσης

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{-1}\mathbf{C}^T &= (\mathbf{C}^T\mathbf{C} + \sigma^2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{C}^T = (\sigma^{-2}\mathbf{I} - \sigma^{-2}\mathbf{C}^T(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C})\mathbf{C}^T \\ &= \sigma^{-2}\mathbf{C}^T - \sigma^{-2}\mathbf{C}^T(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{C}^T. \end{aligned}$$

Λόγω της ιδιότητας των πινάκων $(\mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ έχουμε

$$\begin{aligned} (\sigma^2\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^T)^{-1} &= (\mathbf{C}^{-1})^{-1}(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}^T\mathbf{C})^{-1} \\ (\sigma^2\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^T)^{-1} &= (\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}(\mathbf{C}^{-1})^{-1}. \end{aligned}$$

Επομένως $\mathbf{K}_n = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{C}^T$. Για τον πίνακα συνδιασποράς ισχύουν τα παρακάτω

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_n &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n\mathbf{C})\mathbf{P}_{n-1} = \mathbf{I} - \mathbf{C}^T(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C} \\ \mathbf{M}^{-1} &= (\mathbf{C}^T\mathbf{C} + \sigma^2\mathbf{I})^{-1} = \sigma^{-2}\mathbf{I} - \sigma^{-2}\mathbf{C}^T(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C} \\ &\Rightarrow \sigma^2\mathbf{M}^{-1} = \sigma^2(\mathbf{C}^T\mathbf{C} + \sigma^2\mathbf{I})^{-1} = \mathbf{I} - \mathbf{C}^T(\sigma^2\mathbf{I} + \mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{C}. \end{aligned}$$

Άρα $\mathbf{V}_n = \sigma^2\mathbf{M}^{-1}$.

Ας θεωρήσουμε μια περίπτωση στην οποία το σφάλμα μέτρησης είναι ελάχιστο συγκριτικά με το βαθμό στον οποίο εξελίσσεται η λανθάνουσα μεταβλητή, δηλαδή ένα ΓΔΣ στο οποίο $\mathbf{\Sigma} = \mathbf{0}$. Τότε

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_n &= \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{C}^T(\mathbf{C}^T)^{-1}\mathbf{P}_{n-1}^{-1}\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^{-1} \\ \mathbf{V}_n &= (\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}\mathbf{C})\mathbf{P}_{n-1} = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\mu}_n &= \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} + \mathbf{C}^{-1}\mathbf{x}_n - \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{n-1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{x}_n. \end{aligned}$$

Αν επιπρόσθετα απαιτήσουμε τη συνθήκη $\mathbf{C} = \mathbf{I}$, η τελευταία ισότητα μετατρέπεται σε $\boldsymbol{\mu}_n = \mathbf{x}_n$. Αυτό συμπίπτει με τη διαίσθησή μας ότι αν δεν υπάρχει σφάλμα, πρέπει απλά να χρησιμοποιούμε την πρόσφατη παρατήρηση \mathbf{x}_n για να εκτιμήσουμε τη μεταβλητή \mathbf{z}_n , και να αγνοήσουμε τις υπόλοιπες παρατηρήσεις.

Από την άλλη μεριά ως υποθέσουμε ότι η λανθάνουσα μεταβλητή εξελίσσεται αργά συγκριτικά με το επίπεδο σφάλματος της παρατήρησης. Θεωρούμε λοιπόν μια ειδική περίπτωση ενός ΓΔΣ στο οποίο η λανθάνουσα μεταβλητή \mathbf{z}_n κατασκευάζεται να είναι ίση με την προηγούμενη \mathbf{z}_{n-1} , που σημαίνει ότι απαιτούμε $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ και $\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{0}$. Για ευκολία, υποθέτουμε επίσης ότι $\mathbf{C} = \mathbf{I}$ και ότι $\mathbf{P}_0 \rightarrow \infty$, που σημαίνει ότι οι αρχικές συνθήκες για την \mathbf{z}_1 δεν είναι σημαντικές, και επομένως όλες οι προβλέψεις εξαρτώνται αποκλειστικά από τα δεδομένα. Θα δείξουμε ότι η εκ των υστέρων μέση τιμή της \mathbf{z}_n ισούται με τον μέσο όρο των παρατηρήσεων $\{x_1, \dots, x_N\}$. Αυτό συμφωνεί με το διαισθητικό αποτέλεσμα ότι αν η τιμή της λανθάνουσας μεταβλητής παραμένει σταθερή, η καλύτερη εκτίμηση επιτυγχάνεται παίρνοντας τον μέσο όρο όλων των παρατηρήσεων μέχρι εκείνη την στιγμή. Επομένως

$$p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{0})$$

$$p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n, \boldsymbol{\Sigma}).$$

Η απόδειξη θα γίνει με επαγωγή. Έχουμε

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{P}_0(\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} \rightarrow \mathbf{I}$$

$$\mathbf{I} - \mathbf{K}_1\mathbf{C} = \mathbf{I} - \mathbf{P}_0(\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} = (\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})(\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} - \mathbf{P}_0(\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1}$$

$$\mathbf{V}_1 = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_1\mathbf{C})\mathbf{P}_0 = \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{P}_0 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1}\mathbf{P}_0 \rightarrow \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{V}_1 = \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\mathbf{K}_2 = \mathbf{P}_1(\mathbf{P}_1 + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} = \frac{1}{2}\mathbf{I}$$

$$\mathbf{V}_2 = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_2\mathbf{C})\mathbf{P}_1 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{P}_2.$$

Υποθέτουμε ότι για κάποιο n ισχύουν οι σχέσεις

$$\mathbf{K}_n = \frac{1}{n}\mathbf{I}, \quad \mathbf{V}_n = \frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{P}_n.$$

Τότε

$$\mathbf{K}_{n+1} = \mathbf{P}_n(\mathbf{P}_n + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} = \frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma} \frac{n}{n+1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \frac{1}{n+1}\mathbf{I}$$

$$\mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{V}_{n+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_{n+1}\mathbf{C})\mathbf{P}_n = \frac{n}{n+1} \frac{1}{n} \boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n+1}\boldsymbol{\Sigma}$$

επομένως οι δύο παραπάνω σχέσεις ισχύουν για κάθε n .

Η μέση εκ των υστέρων τιμή της \mathbf{z}_1 δοθείσης της \mathbf{x}_1 ισούται με

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \boldsymbol{\mu}_0 + \mathbf{K}_1(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_0) = \boldsymbol{\mu}_0 + \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_0 = \mathbf{x}_1.$$

Έστω ότι για κάποιο n ισχύει

$$\boldsymbol{\mu}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i}{n}.$$

Τότε

$$\boldsymbol{\mu}_{n+1} = \boldsymbol{\mu}_n + \frac{1}{n+1}(\mathbf{x}_{n+1} - \boldsymbol{\mu}_n) = \frac{n}{n+1}\boldsymbol{\mu}_n + \frac{1}{n+1}\mathbf{x}_{n+1} = \frac{\sum_{i=1}^{n+1} \mathbf{x}_i}{n+1}$$

άρα η υπόθεσή μας ισχύει για κάθε n .

Μέχρι στιγμής, ασχοληθήκαμε και επιλύσαμε το πρόβλημα της εύρεσης της εκ των υστέρων περιθώριας πιθανότητας μιας μεταβλητής \mathbf{z}_n δοθέντων των παρατηρήσεων $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$. Στη συνέχεια θα στραφούμε στο πρόβλημα της εύρεσης της εκ των υστέρων περιθώριας πιθανότητας μιας μεταβλητής \mathbf{z}_n δοθέντων όλων των παρατηρήσεων $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$. Στην περίπτωση που τα δεδομένα είναι χρονικά, αυτό σημαίνει ότι συμπεριλαμβάνουμε τόσο τις προηγούμενες όσο και τις μελλοντικές παρατηρήσεις. Αν και αυτό δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να κάνουμε προβλέψεις σε πραγματικό χρόνο, εντούτοις είναι πολύ βοηθητικό για τον προσδιορισμό των παραμέτρων του μοντέλου. Σε αντιστοιχία με τα κρυμμένα μαρκοβιανά μοντέλα, αυτό το πρόβλημα μπορεί να επιλυθεί μεταδίδοντας μηνύματα από τον κόμβο \mathbf{x}_N προς τον κόμβο \mathbf{x}_1 και συνδυάζοντας αυτήν την πληροφορία με αυτήν που πήραμε στον εμπροσθοδρομικό αλγόριθμο για τον υπολογισμό του $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$.

Στη βιβλιογραφία των ΓΔΣ, συνήθως η οπισθοδρομική αναδρομή κατασκευάζεται με βάση τις ποσότητες $\gamma(\mathbf{z}_n) = \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$ παρά με τις $\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$. Επειδή η $\gamma(\mathbf{z}_n)$ πρέπει να είναι και αυτή κανονικά κατανοημένη, τη γράφουμε στη μορφή

$$\gamma(\mathbf{z}_n) = \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)\hat{\beta}(\mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \hat{\boldsymbol{\mu}}_n, \hat{\mathbf{V}}_n). \quad (5.44)$$

Για να προσδιορίσουμε την οπισθοδρομική αυτή αναδρομή, ξεκινάμε από την αναδρομή (4.74) για τα $\hat{\beta}(\mathbf{z}_n)$, που για συνεχείς λανθάνουσες μεταβλητές παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} c_{n+1}\hat{\beta}(\mathbf{z}_n) &= \int \hat{\beta}(\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)d\mathbf{z}_{n+1} \\ \Rightarrow c_{n+1}\gamma(\mathbf{z}_n) &= \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) \int \hat{\beta}(\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)d\mathbf{z}_{n+1} \\ \Rightarrow \gamma(\mathbf{z}_n) &= c_{n+1}^{-1}\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) \int \hat{\beta}(\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)d\mathbf{z}_{n+1} \\ &= c_{n+1}^{-1}\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n) \int \hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n+1})^{-1}\gamma(\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)d\mathbf{z}_{n+1} \\ &= p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)^{-1}p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \int p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1})^{-1}p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{X})p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)d\mathbf{z}_{n+1}. \end{aligned}$$

Λόγω του κανόνα του Bayes έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)} &= p(x|y) \\ \Rightarrow \frac{p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1})p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)}{p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)} &= p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}) = p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n) \end{aligned} \quad (5.45)$$

$$\frac{p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)}{p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1})} = p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1}). \quad (5.46)$$

Έστω $y = \mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}$ και $x = \mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$. Τότε

$$\begin{aligned} p(y|x) &= p(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{A}\mathbf{z}_n, \mathbf{\Gamma}) \\ p(x) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \boldsymbol{\mu}_n, \mathbf{V}_n). \end{aligned}$$

Επομένως

$$\begin{aligned} p(x|y) &= p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1}) \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | (\mathbf{V}_n^{-1} + \mathbf{A}^T \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A})^{-1} \{ \mathbf{A}^T \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{z}_{n+1} + \mathbf{V}_n^{-1} \boldsymbol{\mu}_n \}, (\mathbf{V}_n^{-1} + \mathbf{A}^T \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A})^{-1}). \end{aligned}$$

Όμως

$$\begin{aligned} (\mathbf{V}_n^{-1} + \mathbf{A}^T \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A})^{-1} &= \mathbf{V}_n - \mathbf{V}_n \mathbf{A}^T (\mathbf{\Gamma} + \mathbf{A} \mathbf{V}_n \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{A} \mathbf{V}_n \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{V}_n \mathbf{A}^T \mathbf{P}_n^{-1} \mathbf{A}) \mathbf{V}_n \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{J}_n \mathbf{A}) \mathbf{V}_n \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$(\mathbf{V}_n^{-1} + \mathbf{A}^T \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{V}_n \mathbf{A}^T (\mathbf{\Gamma} + \mathbf{A} \mathbf{V}_n \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{J}_n \mathbf{z}_{n+1} \quad (5.48)$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{J}_n \mathbf{A}) \mathbf{V}_n \mathbf{V}_n^{-1} \boldsymbol{\mu}_n = (\mathbf{I} - \mathbf{J}_n \mathbf{A}) \boldsymbol{\mu}_n \quad (5.49)$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1}} = \mathbf{J}_n \mathbf{z}_{n+1} + (\mathbf{I} - \mathbf{J}_n \mathbf{A}) \boldsymbol{\mu}_n = \boldsymbol{\mu}_n + \mathbf{J}_n (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_n). \quad (5.50)$$

Στο σημείο αυτό θα παραθέσουμε μια ακόμη ιδιότητα δεσμευμένης ανεξαρτησίας η οποία θα μας χρησιμεύσει. Συγκεκριμένα θα δείξουμε ότι

$$\mathbf{z}_n \perp\!\!\!\perp \mathbf{X}_{n+2:N} \mid \{ \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1} \}. \quad (5.51)$$

Πράγματι, στο Σχήμα 4.4 παρατηρούμε ότι κάθε μονοπάτι που ξεκινά από τον κόμβο \mathbf{z}_n προς οποιονδήποτε κόμβο του συνόλου $\mathbf{X}_{n+2:N}$ περνά υποχρεωτικά από έναν τουλάχιστον κόμβο του συνόλου $\{ \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1} \}$. Όλα αυτά τα μονοπάτια είναι μπλοκαρισμένα, επομένως έχουμε

$$p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1}, \mathbf{X}_{n+2:N}) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{X}_{1:n+1}). \quad (5.52)$$

Θέτουμε $x = \mathbf{z}_{n+1} | \mathbf{X}$ και $y = \mathbf{z}_n | \mathbf{X}$. Έχουμε

$$\begin{aligned} p(y|x) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \boldsymbol{\mu}_n + \mathbf{J}_n (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_n), (\mathbf{I} - \mathbf{J}_n \mathbf{A}) \mathbf{V}_n) \\ p(x) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n+1} | \hat{\boldsymbol{\mu}}_{n+1}, \hat{\mathbf{V}}_{n+1}). \end{aligned}$$

Επομένως

$$p(y) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \hat{\boldsymbol{\mu}}_n, \hat{\mathbf{V}}_n)$$

όπου

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_n = \boldsymbol{\mu}_n + \mathbf{J}_n (\hat{\boldsymbol{\mu}}_{n+1} - \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_n) \quad (5.53)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{V}}_n &= (\mathbf{I} - \mathbf{J}_n \mathbf{A}) \mathbf{V}_n + \mathbf{J}_n \hat{\mathbf{V}}_{n+1} \mathbf{J}_n^T \\ &= \mathbf{V}_n - \mathbf{J}_n \mathbf{P}_n \mathbf{J}_n^T + \mathbf{J}_n \hat{\mathbf{V}}_{n+1} \mathbf{J}_n^T \\ &= \mathbf{V}_n + \mathbf{J}_n (\hat{\mathbf{V}}_{n+1} - \mathbf{P}_n) \mathbf{J}_n^T \end{aligned} \quad (5.54)$$

είναι οι εξισώσεις λείανσης Rauch-Tung-Striebel (RTS), και επιπλέον έχουμε ορίσει

$$\mathbf{J}_n = \mathbf{V}_n \mathbf{A}^T \mathbf{P}_n^{-1} \quad (5.55)$$

και έχουμε χρησιμοποιήσει την ιδιότητα $\mathbf{A} \mathbf{V}_n = \mathbf{P}_n \mathbf{J}_n^T$. Παρατηρήστε ότι αυτές οι αναδρομές απαιτούν πρώτα την ολοκλήρωση του εμπροσθοδρομικού αλγορίθμου, ώστε να είναι διαθέσιμες οι ποσότητες $\boldsymbol{\mu}_n$ και \mathbf{V}_n για την οπισθοδρομική αναδρομή.

Ο αλγόριθμος EM επιπλέον απαιτεί την γνώση των ποσοτήτων $\xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n)$, οι οποίες ξεκινώντας από την (4.77) καταλήγουν στη μορφή

$$\begin{aligned} \xi(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n) &= c_n^{-1} \hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) \hat{\beta}(\mathbf{z}_n) \\ &= \frac{\hat{\alpha}(\mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) \hat{\gamma}(\mathbf{z}_n)}{c_n \hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)} \\ &= \frac{\mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1} | \boldsymbol{\mu}_{n-1}, \mathbf{V}_{n-1}) \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{C} \mathbf{z}_n, \boldsymbol{\Sigma}) \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1}, \boldsymbol{\Gamma}) \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \hat{\boldsymbol{\mu}}_n, \hat{\mathbf{V}}_n)}{c_n \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \boldsymbol{\mu}_n, \mathbf{V}_n)}. \end{aligned} \quad (5.56)$$

Έχουμε

$$p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | \mathbf{X}) = \frac{p(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{X})}{p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)} \quad (5.57)$$

και επιπλέον

$$\frac{p(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_n) p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1})}{p(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1})} = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) \quad (5.58)$$

$$\frac{p(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_{n-1}) p(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1})}{p(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)} = p(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{1:n}). \quad (5.59)$$

Από τις εξισώσεις (5.50), (5.47) και (5.52) συμπεραίνουμε ότι

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{z}_n, \mathbf{X}) &= p(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{1:n}) \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1} | \boldsymbol{\mu}_{n-1} + \mathbf{J}_{n-1}(\mathbf{z}_n - \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_{n-1}), (\mathbf{I} - \mathbf{J}_{n-1} \mathbf{A}) \mathbf{V}_{n-1}). \end{aligned} \quad (5.60)$$

Αν θέσουμε

$$x = \mathbf{z}_n | \mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \hat{\boldsymbol{\mu}}_n, \hat{\mathbf{V}}_n) \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} y | x = \mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{z}_n, \mathbf{X} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1} | \boldsymbol{\mu}_{n-1} + \mathbf{J}_{n-1}(\mathbf{z}_n - \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_{n-1}), (\mathbf{I} - \mathbf{J}_{n-1} \mathbf{A}) \mathbf{V}_{n-1}) \\ &\sim \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1} | \mathbf{J}_{n-1} \mathbf{z}_n + (\mathbf{I} - \mathbf{J}_{n-1} \mathbf{A}) \boldsymbol{\mu}_{n-1}, (\mathbf{I} - \mathbf{J}_{n-1} \mathbf{A}) \mathbf{V}_{n-1}) \end{aligned} \quad (5.62)$$

τότε από τις ιδιότητες (1.46) και (1.47) της κανονικής κατανομής έπεται ότι η από κοινού εκ των υστέρων κατανομή δύο διαδοχικών λανθάνουσών μεταβλητών δοθέντων των δεδομένων δίνεται από

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | \mathbf{X}) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | (\mathbf{J}_{n-1} \hat{\boldsymbol{\mu}}_n + (\mathbf{I} - \mathbf{J}_{n-1} \mathbf{A}) \boldsymbol{\mu}_{n-1}, \hat{\boldsymbol{\mu}}_n)^T, \hat{\mathbf{V}}_{n-1,n}) \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n | (\hat{\boldsymbol{\mu}}_{n-1}, \hat{\boldsymbol{\mu}}_n)^T, \hat{\mathbf{V}}_{n-1,n}) \end{aligned} \quad (5.63)$$

όπου

$$\hat{\mathbf{V}}_{n-1,n} = \begin{pmatrix} (\mathbf{I} - \mathbf{J}_{n-1}\mathbf{A})\mathbf{V}_{n-1} + \mathbf{J}_{n-1}\hat{\mathbf{V}}_n\mathbf{J}_{n-1}^T & \mathbf{J}_{n-1}\hat{\mathbf{V}}_n \\ \hat{\mathbf{V}}_n\mathbf{J}_{n-1}^T & \hat{\mathbf{V}}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{V}}_{n-1} & \mathbf{J}_{n-1}\hat{\mathbf{V}}_n \\ \hat{\mathbf{V}}_n\mathbf{J}_{n-1}^T & \hat{\mathbf{V}}_n \end{pmatrix}. \quad (5.64)$$

Παρατηρήστε ότι

$$\text{cov}[\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{z}_n] = \mathbf{J}_{n-1}\hat{\mathbf{V}}_n. \quad (5.65)$$

5.3 Μέγιστη πιθανοφάνεια στα ΓΔΣ

Μέχρι στιγμής ασχοληθήκαμε με τη συμπερασματολογία στα γραμμικά δυναμικά συστήματα, θεωρώντας ως ήδη γνωστές τις τιμές των παραμέτρων του μοντέλου $\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{A}, \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{C}, \boldsymbol{\mu}_0, \mathbf{P}_0\}$. Στη συνέχεια θα προσπαθήσουμε να προσδιορίσουμε αυτές τις παραμέτρους χρησιμοποιώντας μέγιστη πιθανοφάνεια. Επειδή στο μοντέλο συμπεριλαμβάνονται λανθάνουσες μεταβλητές, αυτό το πρόβλημα μπορεί να επιλυθεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο EM.

Συμβολίζουμε τις εκτιμημένες τιμές των παραμέτρων σε κάποιον ορισμένο κύκλο του αλγορίθμου EM με $\boldsymbol{\theta}^{\text{old}}$. Για τις τιμές αυτές μπορούμε να τρέξουμε τον αλγόριθμο συμπερασματολογίας για να προσδιορίσουμε τις εκ των υστέρων περιθώριες πιθανότητες που απαιτούνται για το M βήμα του αλγορίθμου. Συγκεκριμένα θα χρειαστούμε τις παρακάτω εξισώσεις

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}_n] = \hat{\boldsymbol{\mu}}_n \quad (5.66)$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_{n-1}^T] = \hat{\mathbf{V}}_n\mathbf{J}_{n-1}^T + \hat{\boldsymbol{\mu}}_n\hat{\boldsymbol{\mu}}_{n-1}^T \quad (5.67)$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^T] = \hat{\mathbf{V}}_n + \hat{\boldsymbol{\mu}}_n\hat{\boldsymbol{\mu}}_n^T \quad (5.68)$$

όπου έχουμε κάνει χρήση της ιδιότητας (5.65).

Στη συνέχεια θεωρούμε τη λογαριθμική συνάρτηση πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων, που προκύπτει παίρνοντας το λογάριθμο της (4.6) και δίνεται από

$$\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}) = \ln p(\mathbf{z}_1|\boldsymbol{\mu}_0, \mathbf{P}_0) + \sum_{n=2}^N \ln p(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{n-1}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\Gamma}) + \sum_{n=1}^N \ln p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{C}, \boldsymbol{\Sigma}) \quad (5.69)$$

και παίρνουμε τη μέση τιμή της λογαριθμικής πιθανοφάνειας των πλήρων δεδομένων με βάση την εκ των υστέρων κατανομή $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}})$, δηλαδή τη συνάρτηση

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) = \mathbb{E}_{\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta})]. \quad (5.70)$$

Στο M βήμα μεγιστοποιούμε την παραπάνω συνάρτηση ως προς τις παραμέτρους $\boldsymbol{\theta}$.

Ας θεωρήσουμε για αρχή τη μεγιστοποίηση ως προς τις παραμέτρους $\boldsymbol{\mu}_0$ και \mathbf{P}_0 . Αν αντικαταστήσουμε στην (5.69) την (5.3) και πάρουμε τη μέση τιμή ως προς το \mathbf{Z} , θα πάρουμε

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) = -\frac{1}{2} \ln |\mathbf{P}_0| - \mathbb{E}_{\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} \left[\frac{1}{2} (\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)^T \mathbf{P}_0^{-1} (\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0) \right] + c \quad (5.71)$$

όπου όλοι οι παράγοντες που δεν εξαρτώνται από τις $\boldsymbol{\mu}_0$ και \mathbf{P}_0 έχουν απορροφηθεί στη σταθερά. Έχουμε

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) = -\frac{1}{2} \ln |\mathbf{P}_0| - \mathbb{E}_{\mathbf{z}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} \left[\frac{1}{2} \mathbf{z}_1^T \mathbf{P}_0^{-1} \mathbf{z}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{z}_1^T \mathbf{P}_0^{-1} \boldsymbol{\mu}_0 - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_0^T \mathbf{P}_0^{-1} \mathbf{z}_1 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_0^T \mathbf{P}_0^{-1} \boldsymbol{\mu}_0 \right] + c. \quad (5.72)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \boldsymbol{\mu}_0} = \mathbf{0} &\Rightarrow \mathbf{P}_0^{-1} \mathbb{E}[\mathbf{z}_1] - \frac{1}{2} \mathbf{P}_0^{-1} \boldsymbol{\mu}_0 - \frac{1}{2} \mathbf{P}_0^{-1} \boldsymbol{\mu}_0 = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow \boldsymbol{\mu}_0^{\text{new}} = \mathbb{E}[\mathbf{z}_1]. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Επιπλέον

$$(\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)^T \mathbf{P}_0^{-1} (\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0) = \text{Tr}[(\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)^T \mathbf{P}_0^{-1} (\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)] = \text{Tr}[(\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)^T \mathbf{P}_0^{-1}] \quad (5.74)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \mathbf{P}_0^{-1}} = \mathbf{0} &\Rightarrow \frac{1}{2} \mathbf{P}_0 - \frac{1}{2} \mathbb{E}[(\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\mu}_0)^T] = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow \frac{1}{2} \mathbf{P}_0 - \frac{1}{2} \mathbb{E}[\mathbf{z}_1 \mathbf{z}_1^T] + \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_0 \mathbb{E}[\mathbf{z}_1^T] + \frac{1}{2} \mathbb{E}[\mathbf{z}_1] \boldsymbol{\mu}_0^T - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_0 \boldsymbol{\mu}_0^T = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow \mathbf{P}_0^{\text{new}} = \mathbb{E}[\mathbf{z}_1 \mathbf{z}_1^T] - \boldsymbol{\mu}_0 \boldsymbol{\mu}_0^T = \mathbb{E}[\mathbf{z}_1 \mathbf{z}_1^T] - \mathbb{E}[\mathbf{z}_1] \mathbb{E}[\mathbf{z}_1^T]. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Παρομοίως, για να προσδιορίσουμε τις τιμές των \mathbf{A} και $\boldsymbol{\Gamma}$, παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) &\propto -\frac{N-1}{2} \ln |\boldsymbol{\Gamma}| - \mathbb{E}_{\mathbf{z}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} \left[\frac{1}{2} \sum_{n=2}^N (\mathbf{z}_n - \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1})^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} (\mathbf{z}_n - \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1}) \right] \\ &= -\frac{N-1}{2} \ln |\boldsymbol{\Gamma}| - \frac{1}{2} \sum_{n=2}^N \mathbb{E} \left[\mathbf{z}_n^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{z}_n - \mathbf{z}_n^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1} - (\mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1})^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{z}_n + (\mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1})^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1} \right]. \end{aligned}$$

Αρχικά θα μεγιστοποιήσουμε ως προς τον πίνακα \mathbf{A} . Για ευκολία υποθέτουμε ότι $\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{I}$. Το αποτέλεσμα όμως που θα προκύψει αποδεικνύεται ότι είναι το ίδιο για οποιαδήποτε τιμή του πίνακα $\boldsymbol{\Gamma}$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \left(\sum_{n=2}^N \mathbb{E} \left[-\text{Tr}(\mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_n^T) - \text{Tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T) + \text{Tr}(\mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T \mathbf{A}^T) \right] \right) = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow -\sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T] - \sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T] + \mathbf{A} \left[\sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T] + \sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T] \right] = \mathbf{0} \\ &\Rightarrow \mathbf{A}^{\text{new}} = \left(\sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T] \right) \left(\sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T] \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (5.76)$$

Στη συνέχεια μεγιστοποιούμε ως προς τον πίνακα $\boldsymbol{\Gamma}$ για να πάρουμε

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \mathbf{\Gamma}^{-1}} = \mathbf{0} \\
& \Rightarrow (N-1)\mathbf{\Gamma} - \\
& - \frac{\partial}{\partial \mathbf{\Gamma}^{-1}} \left(\sum_{n=2}^N \mathbb{E}[\text{Tr}(\mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^T) - \text{Tr}(\mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_n^T) - \text{Tr}(\mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T \mathbf{A}^T) + \text{Tr}(\mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T \mathbf{A}^T)] \right) = \mathbf{0} \\
& \Rightarrow (N-1)\mathbf{\Gamma} - \sum_{n=2}^N (\mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^T] - \mathbf{A} \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_n^T] - \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T] \mathbf{A}^T + \mathbf{A} \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T] \mathbf{A}^T) = \mathbf{0} \\
& \Rightarrow \mathbf{\Gamma}^{\text{new}} = \frac{1}{N-1} \sum_{n=2}^N (\mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^T] - \mathbf{A}^{\text{new}} \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_n^T] - \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_{n-1}^T] (\mathbf{A}^{\text{new}})^T + \mathbf{A}^{\text{new}} \mathbb{E}[\mathbf{z}_{n-1} \mathbf{z}_{n-1}^T] (\mathbf{A}^{\text{new}})^T)
\end{aligned} \tag{5.77}$$

Παρατηρήστε ότι πρέπει πρώτα να γίνει ο υπολογισμός του \mathbf{A}^{new} ώστε να είναι στη διάθεσή μας για να προσδιορίσουμε την τιμή $\mathbf{\Gamma}^{\text{new}}$.

Τέλος για να προσδιορίσουμε τις νέες τιμές των \mathbf{C} και $\mathbf{\Sigma}$, αντικαθιστούμε στην (5.69) την (5.2) για να πάρουμε

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}) \propto -\frac{N}{2} \ln |\mathbf{\Sigma}| - \mathbb{E}_{\mathbf{z}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^{\text{old}}} \left[\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \mathbf{C} \mathbf{z}_n)^T \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_n - \mathbf{C} \mathbf{z}_n) \right].$$

Εύκολα διαπιστώνουμε ότι για τον προσδιορισμό των \mathbf{C} και $\mathbf{\Sigma}$ ακολουθούμε τα ίδια ακριβώς βήματα όπως και στη βελτιστοποίηση ως προς τα \mathbf{A} και $\mathbf{\Gamma}$. Επομένως

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{0} \\
& \Rightarrow \mathbf{C}^{\text{new}} = \left(\sum_{n=1}^N \mathbf{x}_n \mathbb{E}[\mathbf{z}_n^T] \right) \left(\sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^T] \right)^{-1} \\
& \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \mathbf{\Sigma}^{-1}} = \mathbf{0} \\
& \Rightarrow \mathbf{\Sigma}^{\text{new}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n \mathbf{x}_n^T - \mathbf{C}^{\text{new}} \mathbb{E}[\mathbf{z}_n] \mathbf{x}_n^T - \mathbf{x}_n \mathbb{E}[\mathbf{z}_n^T] (\mathbf{C}^{\text{new}})^T + \mathbf{C}^{\text{new}} \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^T] (\mathbf{C}^{\text{new}})^T).
\end{aligned} \tag{5.78}$$

Για τον προσδιορισμό των παραμέτρων στα $\Gamma\Delta\Sigma$ χρησιμοποιήσαμε μέγιστη πιθανοφάνεια. Φυσικά μπορούμε και εδώ να εισαγάγουμε εκ των προτέρων πιθανότητες στις παραμέτρους για να πάρουμε μέγιστες εκ των υστέρων εκτιμήσεις.

5.4 Επεκτάσεις των $\Gamma\Delta\Sigma$

Όπως και στα KMM, είναι ενδιαφέρον να επεκτείνουμε το βασικό $\Gamma\Delta\Sigma$ ώστε να διευρύνουμε τις δυνατότητές του. Αν και η υπόθεση ενός γραμμικού-κανονικού μοντέλου έχει το πλεονέκτημα να οδηγεί σε αποτελεσματικούς αλγορίθμους για συμπερασματολογία και για τον προσδιορισμό

παραμέτρων, εντούτοις συνεπάγεται ότι η περιθώρια κατανομή των παρατηρήσιμων μεταβλητών είναι κανονική, κάτι που είναι σε σημαντικό βαθμό περιοριστικό. Μια απλή γενίκευση του κλασικού ΓΔΣ είναι να χρησιμοποιήσουμε μίξη κανονικών για την κατανομή της \mathbf{z}_1 . Εάν η μίξη έχει K συνιστώσες, τότε οι εμπροσθοδρομικές εξισώσεις (5.16) συνεπάγονται ότι η περιθώρια κατανομή κάθε λανθάνουσας μεταβλητής \mathbf{z}_n συνίσταται από μια μίξη K κανονικών κατανομών, συνεπώς το μοντέλο είναι υπολογιστικά διαχειρίσιμο.

Επιπλέον, σε πολλές εφαρμογές χρειαζόμαστε μια κατανομή εκπομπής που να είναι γενικότερη από την απλή κανονική. Αν για παράδειγμα χρησιμοποιήσουμε μια μίξη K κανονικών για κατανομή εκπομπής, τότε η εκ των υστέρων πιθανότητα $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_1)$ ισούται επίσης με μια μίξη K κανονικών. Όμως από την (5.16) διαπιστώνουμε ότι η πιθανότητα $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_2)$ ισούται με μια μίξη από K^2 κανονικές κατανομές, κ.ο.κ., συνεπώς η πιθανότητα $\hat{\alpha}(\mathbf{z}_n)$ δίνεται από μια μίξη K^n κανονικών κατανομών. Επομένως ο αριθμός των συνιστωσών μίξης αυξάνεται εκθετικά ως προς το μήκος της αλυσίδας και το μοντέλο δεν είναι διαχειρίσιμο. Γενικότερα, αν εισαγάγουμε μοντέλα μετάβασης ή εκπομπής που αποκλίνουν από το γραμμικό-κανονικό (και μάλιστα οποιαδήποτε άλλη κατανομή που ανήκει στην εκθετική οικογένεια κατανομών) μοντέλο, το αποτέλεσμα θα είναι ένα δυσεπίλυτο πρόβλημα συμπερασματολογίας. Υπάρχουν αρκετές εναλλακτικές προσεγγίσεις για το πρόβλημα αυτό, όπως για παράδειγμα να κάνουμε χρήση μεθόδων δειγματοληψίας.

Μπορούμε να αναπτύξουμε ενδιαφέρουσες γενικεύσεις του κλασικού γραμμικού δυναμικού συστήματος επεκτείνοντας τη γραφική του αναπαράσταση. Για παράδειγμα το *εναλλασσόμενο μοντέλο χώρου καταστάσεων* είναι επί της ουσίας ο συνδυασμός του KMM μαζί με ένα σύνολο από γραμμικά δυναμικά συστήματα. Συγκεκριμένα το μοντέλο διαθέτει πολλαπλές μαρκοβιανές αλυσίδες από συνεχείς γραμμικές-κανονικές λανθάνουσες μεταβλητές μαζί με μια μαρκοβιανή αλυσίδα από διακριτές λανθάνουσες μεταβλητές. Το εξαγόμενο αποτέλεσμα σε κάθε χρονική στιγμή καθορίζεται επιλέγοντας στοχαστικά μία από τις συνεχείς λανθάνουσες αλυσίδες, χρησιμοποιώντας την τιμή της διακριτής λανθάνουσας μεταβλητής ως διακόπτη, και εξάγοντας μια παρατήρηση από την αντίστοιχη κατανομή εκπομπής. Στο μοντέλο αυτό δεν είναι εφικτή ακριβής συμπερασματολογία, υπάρχουν όμως μέθοδοι που οδηγούν σε ένα αποτελεσματικό σχήμα, στο οποίο συμπεριλαμβάνονται εμπροσθοδρομικές και οπισθοδρομικές αναδρομές σε καθεμία από τη διακριτή και τις συνεχείς μαρκοβιανές αλυσίδες ανεξάρτητα. Παρατηρήστε ότι αν θεωρήσουμε πολλαπλές αλυσίδες διακριτών λανθάνουσών μεταβλητών και χρησιμοποιήσουμε τη μία από αυτές ως διακόπτη για να επιλέξουμε από τις υπόλοιπες, παίρνουμε ένα ανάλογο μοντέλο που έχει μόνο διακριτές λανθάνουσες μεταβλητές και είναι γνωστό ως *εναλλασσόμενο κρυμμένο μαρκοβιανό μοντέλο*.

5.5 Ατομικά φίλτρα

Όταν έχουμε δυναμικά συστήματα που δεν είναι γραμμικά-κανονικά, για παράδειγμα η κατανομή εκπομπής δεν είναι κανονική, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δειγματοληπτικές μεθόδους για να πάρουμε εύχρηστους αλγόριθμους συμπερασματολογίας, όπως τον αλγόριθμο ατομικό φίλτρο.

Ας θεωρήσουμε την κλάση των κατανομών που αναπαριστώνται από το γραφικό μοντέλο του Σχήματος 4.4, και έστω ότι μας δίνονται οι παρατηρηθείσες τιμές $\mathbf{X}_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, και θέλουμε να πάρουμε L δείγματα από την κατανομή $p(\mathbf{z}_n | \mathbf{X}_n)$. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα

Bayes έχουμε

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[f(\mathbf{z}_n)] &= \int f(\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_n)d\mathbf{z}_n \\
&= \frac{\int f(\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n}{\int p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n} \\
&= \frac{\int f(\mathbf{z}_n)\frac{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{n-1})p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})}{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{X}_{n-1})}d\mathbf{z}_n}{\int \frac{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{n-1})p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})}{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{X}_{n-1})}d\mathbf{z}_n} \\
&= \frac{\int f(\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n}{\int p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n} \\
&\simeq \sum_{l=1}^L w_n^{(l)} f(\mathbf{z}_n^{(l)}) \tag{5.80}
\end{aligned}$$

όπου το $\{\mathbf{z}_n^{(l)}\}$ είναι ένα σύνολο από δείγματα που έχουμε πάρει από την κατανομή $p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})$ και έχουμε χρησιμοποιήσει την ιδιότητα δεσμευμένης ανεξαρτησίας $p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{n-1}) = p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)$ που προκύπτει από το Σχήμα 4.4. Τα δειγματικά βάρη $\{w_n^{(l)}\}$ ορίζονται από

$$w_n^{(l)} = \frac{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n^{(l)})}{\sum_{m=1}^L p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n^{(m)})} \tag{5.81}$$

με την προϋπόθεση ότι χρησιμοποιούμε τα ίδια δείγματα τόσο στον αριθμητή όσο και στον παρονομαστή. Επομένως η εκ των υστέρων κατανομή $p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_n)$ αναπαριστάται από το σύνολο των δειγμάτων $\{\mathbf{z}_n^{(l)}\}$ σε συνδυασμό με τα αντίστοιχα βάρη $\{w_n^{(l)}\}$, τα οποία ικανοποιούν τις σχέσεις $0 \leq w_n^{(l)} \leq 1$ και $\sum_l w_n^{(l)} = 1$.

Επειδή επιθυμούμε να βρούμε ένα επαναληπτικό σχήμα, υποθέτουμε ότι τη χρονική στιγμή n έχουμε ένα σύνολο από δείγματα και βάρη, και στη συνέχεια έχουμε παρατηρήσει την τιμή \mathbf{x}_{n+1} , και πλέον θεωρούμε το πρόβλημα του προσδιορισμού των δειγμάτων και των βαρών τη χρονική στιγμή $n + 1$. Αρχικά παίρνουμε δείγματα από την κατανομή $p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{X}_n)$ κάνοντας χρήση του

θεωρήματος Bayes ως εξής

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{X}_n) &= \int p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_n)d\mathbf{z}_n \\
&= \int p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_n)d\mathbf{z}_n \\
&= \frac{\int p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n}{\int p(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n} \\
&= \frac{\int p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)\frac{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{n-1})p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})}{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{X}_{n-1})}d\mathbf{z}_n}{\int \frac{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{n-1})p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})}{p(\mathbf{x}_n|\mathbf{X}_{n-1})}d\mathbf{z}_n} \\
&= \frac{\int p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n}{\int p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_{n-1})d\mathbf{z}_n} \\
&\simeq \sum_{l=1}^L w_n^{(l)}p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n^{(l)}) \tag{5.82}
\end{aligned}$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τις ιδιότητες δεσμευμένης ανεξαρτησίας

$$p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_n) = p(\mathbf{z}_{n+1}|\mathbf{z}_n) \tag{5.83}$$

$$p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n, \mathbf{X}_{n-1}) = p(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n) \tag{5.84}$$

που προκύπτουν εφαρμόζοντας το κριτήριο δ-διαχωρισμού στο γράφο του Σχήματος 4.4. Η κατανομή που δίνεται από την (5.82) είναι μια κατανομή μίξης. Επομένως μπορούμε να πάρουμε δείγματα επιλέγοντας μια συνιστώσα μίξης l με πιθανότητα που δίνεται από τους συντελεστές μίξης $w^{(l)}$ και ύστερα παίρνουμε ένα δείγμα από τη συγκεκριμένη συνιστώσα της μίξης.

Συνοψίζοντας, μπορούμε να πούμε ότι κάθε βήμα του αλγορίθμου ατομικού φίλτρου αποτελείται από δύο στάδια. Τη χρονική στιγμή n έχουμε μια δειγματική αναπαράσταση της εκ των υστέρων κατανομής $p(\mathbf{z}_n|\mathbf{X}_n)$ που εκφράζεται μέσα από το σύνολο δειγμάτων $\{\mathbf{z}_n^{(l)}\}$ σε συνδυασμό με αντίστοιχα βάρη που είναι ίσα με $\{w_n^{(l)}\}$. Στην πράξη αυτό μπορεί να αποτυπωθεί αλγεβρικά σαν μια αναπαράσταση μίξης ανάλογη της σχέσης (5.82). Προκειμένου να πάρουμε την αναπαράσταση για την επόμενη χρονική στιγμή $n + 1$, αρχικά δημιουργούμε L δείγματα από την κατανομή μίξης (5.82), και ύστερα για κάθε δείγμα χρησιμοποιούμε τη νέα παρατήρηση \mathbf{x}_{n+1} για να υπολογίσουμε τα αντίστοιχα βάρη $w_{n+1}^{(l)} \propto p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{z}_{n+1}^{(l)})$. Το ατομικό φιλτράρισμα εμφανίζεται στη βιβλιογραφία με πλήθος άλλων ονομάτων όπως ακολουθιακή μέθοδος Monte Carlo, bootstrap filter, επιβίωση του ισχυρότερου, αλγόριθμος συμπύκνωσης κ.ά.

Βιβλιογραφία

- [1] L. E. Baum, *An inequality and associated maximization technique in statistical estimation of probabilistic functions of Markov processes*, Inequalities 3, 1972.
- [2] Y. Bengio and P. Frasconi, *An input output HMM architecture*. In G. Tesauro, D. S. Touretzky, and T. K. Leen (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems*, Volume 7, MIT Press, 1995.
- [3] Christopher M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Information science and statistics, Springer, 2006.
- [4] G. E. P. Box, G. M. Jenkins, and G. C. Reinsel, *Time Series Analysis*, Prentice Hall, 1994.
- [5] Alexander Philip Dawid, *Conditional independence in statistical theory (with discussion)*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B 4, 1979.
- [6] Alexander Philip Dawid, *Conditional independence for statistical operations*, Annals of Statistics 8, 1980.
- [7] A. P. Dempster, N. M. Laird, and D. B. Rubin, *Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm*, Journal of the Royal Statistical Society, B 39(1), 1977.
- [8] R. O. Duda, P. E. Hart, and D. G. Stork, *Pattern Classification* (Second ed.), Wiley, 2001.
- [9] R. J. Elliott, L. Aggoun, and J. B. Moore, *Hidden Markov Models: Estimation and Control*, Springer, 1995.
- [10] Y. Ephraim, D. Malah, and B. H. Juang, *On the application of hidden Markov models for enhancing noisy speech*, IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing 37(12), 1989.
- [11] David A. Forsyth and Jean Ponce, *Computer Vision: A Modern Approach*, Prentice Hall, 2003.
- [12] Andrew M. Fraser, *Hidden Markov Models and Dynamical Systems*, Los Alamos National Laboratories, Los Alamos, New Mexico, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2008.

- [13] Brendan J. Frey, *Graphical Models for Machine Learning and Digital Communication*, MIT Press, 1998.
- [14] Z. Ghahramani and G. E. Hinton, *Parameter estimation for linear dynamical systems*, Technical Report CRG-TR-96-2, University of Toronto, 1996.
- [15] Z. Ghahramani and G. E. Hinton, *Variational learning for switching state-space models*, Neural Computation 12(4), 1998.
- [16] Z. Ghahramani and M. I. Jordan, *Factorial hidden Markov models*, Machine Learning 29, 1997.
- [17] M. I. Jordan, *An Introduction to Probabilistic Graphical Models*, In preparation, 2007.
- [18] R. E. Kalman, *A new approach to linear filtering and prediction problems*, Transactions of the American Society for Mechanical Engineering, Series D, Journal of Basic Engineering 82, 1960.
- [19] Ross Kindermann and J. Laurie Snell, *Markov Random Fields and Their Applications*, American Mathematical Society, 1980.
- [20] F. R. Kschischnang, B. J. Frey, and H. A. Loeliger, *Factor graphs and the sum-product algorithm*, IEEE Transactions on Information Theory 47(2), 2001.
- [21] P. F. Lazarsfeld and N. W. Henry, *Latent Structure Analysis*, Houghton Mifflin, 1968.
- [22] Stuart P. Lloyd, *Least squares quantization in PCM*, IEEE Transactions on Information Theory 28(2), 1982.
- [23] G. J. McLachlan and T. Krishnan, *The EM Algorithm and its Extensions*, Wiley, 1997.
- [24] G. J. McLachlan and D. Peel, *Finite Mixture Models*, Wiley, 2000.
- [25] Athanasios Papoulis, *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes (Second ed.)*, McGraw-Hill, 1984.
- [26] Judea Pearl, *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems*, Morgan Kaufmann, 1988.
- [27] L. R. Rabiner, *A tutorial on hidden Markov models and selected applications in speech recognition* Proceedings of the IEEE 77(2), 1989.
- [28] H. E. Rauch, F. Tung, and C. T. Striebel, *Maximum likelihood estimates of linear dynamical systems*, AIAA Journal 3, 1965.
- [29] Sam Roweis and Zoubin Ghahramani, *A unifying review of linear Gaussian models*, Neural Computation 11(2), 1999.
- [30] A. J. Viterbi, *Error bounds for convolutional codes and an asymptotically optimum decoding algorithm*, IEEE Transactions on Information Theory IT-13, 1967.

- [31] Tang Xuan, *Autoregressive Hidden Markov Model with application in an El Niño Study*, Master's Thesis, University of Saskatchewan, Saskatoon, December, 2004.
- [32] P. Zarchan and H. Musoff, *Fundamentals of Kalman Filtering: A Practical Approach* (Second ed.), AIAA, 2005.