מערכות דינאמיות ובקרה

לביא שפיגלמן

EM במערכת לינארית גאוסיאנית

- אלגוריתם הEM
- מערכת Linear Gaussian
- צעד ה-M במערכת LG
- צעד ה-E במערכת LG

אלגוריתם ה-EM

אלגוריתם ה-EM מתמודד עם הבעיה הבאה:

נתונות תצפיות $\mathbf{y} = \{\mathbf{y}_i\}_{i=1}^T$. נניח כי קיימים מצבים חבויים $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^T$ וכי ההתפלגות של $\mathbf{y}$ ידועה לנו עד כדי המשתנים החבויים וסט פרמטרים θ. כלומר, אנו יודעים לחשב את $p(\mathbf{y}, \mathbf{x}|\theta)$ ומכאן גם את ההתפלגויות החלקיות והמותנות. ברצונינו למצוא שיערוך ניראות מירבית של הפרמטרים $\theta = \arg\max_{\theta'} p(\mathbf{y}|\theta')$. אלגוריתם ה-EM מסתפק במקסימום מקומי.

במקרה של מערכת דינמית, יתכן ובידינו תצפיות אך איננו יודעים את מצבי המערכת וברצונינו לבצע system identification (ללמוד מודל גנרטיבי של המערכת) כך שהמערכת שנלמדה מסבירה את בתצפיות בצורה טובה.

במקרה של מערכת לינארית עם רעשי תצפית ומצב גאוסיאנים אנו יודעים למצוא את התפלגות המצבים בהינתן המערכת וסדרת תצפיות (ע"י Kalman Smoothing). כמו כן אנו יודעים למצוא את הפרמטרים של המודל מתוך סדרות של מצבים ותצפיות (מיזעור שגיאות ריבועיות). אלגוריתם הEM מבצע איטרציות של "השלמת" הנתונים החסרים, $\mathbf{x}$ (צעד E) וθ (צעד M)

Algorithm 1 EM

- Guess $\theta^{(0)}$
- at step k
  - E step: $\tilde{p}(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta^{(k-1)})$
  - M step: $\theta^{(k)} = \arg\max_\theta E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}[\log p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)]$

האלגוריתם (ראה אלג. 1) פועל באופן הבא: באיתחול מנחשים סט פרמטרים θ. לאחר מכן מבצעים איטרציות המורכבות משני שלבים. בשלב ראשון מוצאים את ההתפלגות של המשתנים החבויים בהינתן סט הפרמטרים והתצפיות. בשלב שני מוצאים את סט הפרמטרים שמקסם את תוחלת לוג ההתפלגות המשותפת כשהתוחלת היא על המשתנים החבויים שמתפלגים לפי ההתפלגות שמצאנו בשלב הראשון של האיטרציה.

אנו נוכיח שהאלגוריתם מתכנס למקסימום מקומי של ההתפלגות הרצויה $p(\mathbf{y}|\theta)$ באופן הבא: נגדיר פונקציה $f(\tilde{p}, \theta)$, נראה ששלבי ה-E וה-M מבצעים צעדי partial gradient ascent על f: צעד ה-E משפר ביחס ל-$\tilde{p}$ וצעד ה-M משפר ביחס ל-θ. כמו כן נראה כי לאחר צעד E מקבלים ש $f(\tilde{p}, \theta) = p(\mathbf{y}|\theta)$ ולכן ביצוע צעדי גרדיאנט (חלקי) על f שקול למציאת מקסימום מקומי של $p(\mathbf{y}|\theta)$.

הגדרה:

$$
\begin{aligned}
f(\tilde{p}, \theta) &= E_{\tilde{p}}[\log p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)] + H(\tilde{p}) \\
H(\tilde{p}) &= -\int \tilde{p}(\mathbf{x}) \log \tilde{p}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}
\end{aligned}
$$

כלומר, f היא סכום של התוחלת שממקסמים בצעד ה-M ושל האנטרופיה של ההתפלגות $\tilde{p}$. אנו נניח כי $p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta) > 0$ תמיד כדי שה-log יהיה מוגדר (ניתן לוותר על הנחה זו). ניתן לראות גם כי

$$
f(\tilde{p}, \theta) = -D_{KL}(\tilde{p}(\mathbf{x}), p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta)) + \log p(\mathbf{y}|\theta)
$$

כש- D_{KL} היא האנטרופיה היחסית. ביטוי זה, בשלילה, ידוע בשם אנרגיה חופשית (variational free energy) בפיזיקה סטטיסטית. מקסימיזציה של f היא מינימיזציה של האנרגיה החופשית.

הוכחת השקילות:

$$
\begin{aligned}
-D_{KL}(\tilde{p}(\mathbf{x}), p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta)) + \log p(\mathbf{y}|\theta) &= -\int \tilde{p}(x) \log \frac{\tilde{p}(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta)} dx + \log p(\mathbf{y}|\theta) \\
&= H(\tilde{p}) + \int \tilde{p}(x) \log p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta) d\mathbf{x} + \log p(\mathbf{y}|\theta) \\
&= H(\tilde{p}) + \int \left[\tilde{p}(x) \log p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta) + \log p(\mathbf{y}|\theta)\right] d\mathbf{x} \\
&= H(\tilde{p}) + \int \tilde{p}(x) \log \left(p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta) p(\mathbf{y}|\theta)\right) d\mathbf{x} \\
&= H(\tilde{p}) + \int \tilde{p}(x) \log p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta) d\mathbf{x} \\
&= f(\tilde{p}, \theta)
\end{aligned}
$$

טענה 1: $\arg\max_{\tilde{p}} f(\tilde{p}, \theta) = p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta)$
הוכחה: נובע מכך ש $D_{KL}(p|q) \geq 0$ ו $D_{KL}(p|q) = 0$ (מקסימום של f) מתקיים רק כש $p = q$. במקרה הנ"ל $p = \tilde{p}$ ו-$q = p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \theta)$.

לכן צעד ה-E של EM שקול לביצוע $\tilde{p} = \arg\max_{\tilde{p}'} f(\tilde{p}', \theta)$

טענה 2: $\arg\max_\theta f(\tilde{p},\theta) = \arg\max_\theta E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}[\log p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)]$
הוכחה: נובע מיידית מכך ש$H(\tilde{p})$ אינו תלוי בθ

לכן צעד ה-M של EM שקול לביצוע $\arg\max_\theta f(\tilde{p},\theta)$.

עד כאן ראינו שצעדי partial gradient ascent על f שקולים לאלגוריתם הEM. נותר להראות כי המקסימה של f הם מקסימה של $p(\mathbf{y}|\theta)$.

טענה 3: לאחר שלב E $f(\tilde{p},\theta) = \log p(\mathbf{y}|\theta)$
הוכחה: ע"פ טענה 1, לאחר שלב E $\tilde{p} = p(\mathbf{x}|\mathbf{y},\theta)$. לכן ה$D_{KL}$ שבהגדרה השקולה מתאפס ונותר $f(\tilde{p},\theta) = \log p(\mathbf{y}|\theta)$

לסיכום צעדי הEM מקטינים את האנרגיה החופשית אשר המינימה שלה מזדהים עם המקסימה של $p(\mathbf{y}|\theta)$.

מערכת Linear Gaussian

נניח כי נתונים הפרמטרים של מערכת לינארית גאוסיאנית

$$\theta = \{\mathbf{A},\mathbf{C},\mathbf{Q},\mathbf{R},\bar{\mathbf{x}}_1,\mathbf{Q}_1\}$$

כך ש

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_t &= \mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1} + \boldsymbol{\nu} \\
\mathbf{y}_t &= \mathbf{C}\mathbf{x}_t + \boldsymbol{\omega} \\
\nu &\sim \mathcal{N}(0,\mathbf{Q}) \\
\omega &\sim \mathcal{N}(0,\mathbf{R})
\end{aligned}$$

נזכור כי

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t) &= \frac{1}{(2\pi)^{m/2}|\mathbf{R}|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_t-\mathbf{C}\mathbf{x}_t)'\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}_t-\mathbf{C}\mathbf{x}_t)} \\
p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\mathbf{Q}|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t-\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1})'\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{x}_t-\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1})} \\
p(\mathbf{x}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\mathbf{Q}_1|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t-\bar{\mathbf{x}}_1)'\mathbf{Q}_1^{-1}(\mathbf{x}_t-\bar{\mathbf{x}}_1)}
\end{aligned}$$

וכן

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_{1:T},\mathbf{y}_{1:T}) &= p(\mathbf{x}_1)\prod_{t=2}^{T} p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})\prod_{t=1}^{T} p(y_t|\mathbf{x}_t) \\
\log p(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= -\sum_{t=1}^{T}\left[\frac{1}{2}(\mathbf{y}_t-\mathbf{C}\mathbf{x}_t)'\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}_t-\mathbf{C}\mathbf{x}_t)\right] - \frac{T}{2}\log|\mathbf{R}|
\end{aligned}$$

$$
-\sum_{t=1}^{T}\left[\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t-\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1})'\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{x}_t-\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1})\right]-\frac{T-1}{2}\log|\mathbf{Q}|
$$
$$
-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}}_1)'\mathbf{Q}_1(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}}_1)-\frac{1}{2}\log|\mathbf{Q}_1|-\frac{T(m+n)}{2}\log 2\pi
$$

נסמן

$$
q=E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\log p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)
$$

צעד ה-M

בצעד זה (ובשלב k) אנו נדרשים למצוא

$$
\arg\max_{\theta} E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[\log p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)\right]
$$

כש

$$
\tilde{p}(x)=p(\mathbf{x}|\mathbf{y},\theta^{(k-1)})
$$

נעשה זאת ע"י מציאת הנגזרות והשוואתן לאפס.

ראשית נשים לב כי ניתן לבצע את הניגזרת לפני לקיחת התוחלת

$$
\frac{\partial}{\partial\theta}E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[\log p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)\right]=E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)\right]
$$

ונסמן

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{x}}_t &= E_{\tilde{p}}[\mathbf{x}_t]\\
\mathbf{P}_t &= E_{\tilde{p}}[\mathbf{x}_t\mathbf{x}_t']=cov(\mathbf{x}_t,\mathbf{x}_t)+\hat{\mathbf{x}}_t\hat{\mathbf{x}}_t'\\
\mathbf{P}_{t,t-1} &= E_{\tilde{p}}[\mathbf{x}_t\mathbf{x}_{t-1}']=cov(\mathbf{x}_t,\mathbf{x}_{t-1})+\hat{\mathbf{x}}_t\hat{\mathbf{x}}_{t-1}'
\end{aligned}
$$

עבור $\mathbf{C}$:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial q}{\partial\mathbf{C}} &= E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[-\sum_{t=1}^{T}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y}_t\mathbf{x}_t'+\sum_{t=1}^{T}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{x}_t\mathbf{x}_t'\right]\\
&= -\sum_{t=1}^{T}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y}_tE_{\tilde{p}(\mathbf{x})}[\mathbf{x}_t']+\sum_{t=1}^{T}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}[\mathbf{x}_t\mathbf{x}_t']\\
&= -\mathbf{R}^{-1}\sum_{t=1}^{T}\mathbf{y}_t\hat{\mathbf{x}}_t+\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}\sum_{t=1}^{T}\mathbf{P}_t=0\\
\mathbf{C} &= \left(\sum_{t=1}^{T}\mathbf{y}_t\hat{\mathbf{x}}_t'\right)\left(\sum_{t=1}^{T}\mathbf{P}_t\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

עבור $\mathbf{A}$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q}{\partial \mathbf{A}} &= E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[-\sum_{t=2}^{T}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{x}_t\mathbf{x}'_{t-1}+\sum_{t=2}^{T}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1}\mathbf{x}'_{t-1}\right]\\
&= -\mathbf{Q}^{-1}\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_{t,t-1}+\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_{t-1}\\
\mathbf{A} &= \left(\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_{t,t-1}\right)\left(\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_{t-1}\right)^{-1}
\end{aligned}$$

עבור $\mathbf{R}$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q}{\partial \mathbf{R}^{-1}} &= E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[\frac{T}{2}\mathbf{R}-\sum_{t=1}^{T}\left(\frac{1}{2}\mathbf{y}_t\mathbf{y}'_t-\mathbf{C}\mathbf{x}_t\mathbf{y}'_t+\frac{1}{2}\mathbf{C}\mathbf{x}_t\mathbf{x}'_t\mathbf{C}\right)\right]\\
&= \frac{T}{2}\mathbf{R}-\sum_{t=1}^{T}\left(\frac{1}{2}\mathbf{y}_t\mathbf{y}'_t-\mathbf{C}\hat{\mathbf{x}}_t\mathbf{y}'_t+\frac{1}{2}\mathbf{C}\mathbf{P}_t\mathbf{C}'\right)\\
&= \frac{T}{2}\mathbf{R}-\frac{1}{2}\sum_{t=1}^{T}(\mathbf{y}_t\mathbf{y}'_t)-\mathbf{C}\sum_{t=1}^{T}\hat{\mathbf{x}}_t\mathbf{y}'_t+\frac{1}{2}\left(\sum_{t=1}^{T}\mathbf{y}_t\hat{\mathbf{x}}'_t\right)\left(\sum_{t=1}^{T}\mathbf{P}_t\right)^{-1}\left(\sum_{t=1}^{T}\mathbf{P}_t\right)\mathbf{C}'\\
&= \frac{T}{2}\mathbf{R}-\frac{1}{2}\sum_{t=1}^{T}(\mathbf{y}_t\mathbf{y}'_t)-\mathbf{C}\sum_{t=1}^{T}\hat{\mathbf{x}}_t\mathbf{y}'_t+\frac{1}{2}\mathbf{C}\left(\sum_{t=1}^{T}\hat{\mathbf{x}}_t\mathbf{y}'_t\right)\\
&= \frac{T}{2}\mathbf{R}-\frac{1}{2}\sum_{t=1}^{T}(\mathbf{y}_t\mathbf{y}'_t)-\frac{1}{2}\mathbf{C}\left(\sum_{t=1}^{T}\hat{\mathbf{x}}_t\mathbf{y}'_t\right)=0\\
\mathbf{R} &= \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T}\mathbf{y}_t\mathbf{y}'_t-\frac{\mathbf{C}}{T}\sum_{t=1}^{T}\hat{\mathbf{x}}_t\mathbf{y}'_t
\end{aligned}$$

עבור $\mathbf{Q}$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q}{\partial \mathbf{Q}^{-1}} &= E_{\tilde{p}(\mathbf{x})}\left[\frac{T-1}{2}\mathbf{Q}-\frac{1}{2}\sum_{t=2}^{T}\left(\mathbf{x}_t\mathbf{x}'_t-\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1}\mathbf{x}'_t-\mathbf{x}_t\mathbf{x}'_{t-1}\mathbf{A}'+\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1}\mathbf{x}'_{t-1}A\right)\right]\\
&= \frac{T-1}{2}\mathbf{Q}-\frac{1}{2}\sum_{t=2}^{T}\left(\mathbf{P}_t-\mathbf{A}\mathbf{P}_{t-1,t}-\mathbf{P}_{t.t-1}\mathbf{A}'+\mathbf{A}\mathbf{P}'_{t-1}A\right)\\
&= \frac{T-1}{2}\mathbf{Q}-\frac{1}{2}\left(\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_t-\mathbf{A}\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_{t-1,t}\right)\\
\mathbf{Q} &= \frac{1}{T-1}\left(\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_t-\mathbf{A}\sum_{t=2}^{T}\mathbf{P}_{t-1,t}\right)
\end{aligned}$$

עבור $\bar{\mathbf{x}}_1$:

$$\frac{\partial q}{\partial \mathbf{x}_1} = (\hat{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_1)\mathbf{Q}_1^{-1}$$

$$\bar{\mathbf{x}}_1 = \hat{\mathbf{x}}_1$$

עבור $\mathbf{Q}_1$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial q}{\partial \mathbf{Q}_1^{-1}} &= \frac{1}{2}\mathbf{Q}_1 - \frac{1}{2}\left(\mathbf{P}_1 - \bar{\mathbf{x}}_1\hat{\mathbf{x}}_1' - \hat{\mathbf{x}}_1\bar{\mathbf{x}}_1' + \hat{\mathbf{x}}_1\hat{\mathbf{x}}_1'\right)\\ \mathbf{Q}_1 &= \mathbf{P}_1 - \hat{\mathbf{x}}_1\hat{\mathbf{x}}_1' = cov(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1)\end{aligned}$$

צעד ה-E

מסננן קלמן נותן את $p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t}) \sim \mathcal{N}(\bar{\mathbf{x}}_t, \Sigma_{t|t})$:

נסמן ב$\Sigma_{t|t} = var(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t})$

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{x}}_{t|t-1} &= \mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}_t\\ \Sigma_{t|t-1} &= \mathbf{A}\Sigma_{t-1|t-1}\mathbf{A}^T + \mathbf{Q}\\ \mathbf{K}_t &= \Sigma_{t|t-1}\mathbf{C}^T\left(\mathbf{C}\Sigma_{t|t-1}\mathbf{C}^T + \mathbf{R}\right)^{-1}\\ \bar{\mathbf{x}}_t &= \bar{\mathbf{x}}_{t|t-1} + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_t - \mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}_{t|t-1})\\ \Sigma_{t|t} &= (I - \mathbf{K}_t\mathbf{C})\Sigma_{t|t-1}\end{aligned}$$

(כש $\bar{\mathbf{x}}_1$ ו$\mathbf{Q}_1$ נתונים כפרמטרים של המודל).

כאת נסמן ב$\Sigma_{s|T} = var(\mathbf{x}_s|\mathbf{y}_{1:T})$.

על מנת למצוא את $p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:T}) \sim \mathcal{N}(\hat{\mathbf{x}}_t, \Sigma_{t|T})$ מבצעים שלב נוסף (backward pass).

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_{t-1} &= \Sigma_{t-1|t-1}\mathbf{A}'(\Sigma_{t|t-1})^{-1}\\ \hat{\mathbf{x}}_{t-1} &= \bar{\mathbf{x}}_{t-1} + \mathbf{J}_{t-1}(\hat{\mathbf{x}}_t - \mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}_{t-1})\end{aligned}$$

וכן

$$\Sigma_{t-1|T} = \Sigma_{t-1|t-1} + \mathbf{J}_{t-1}\left(\Sigma_{t|T} - \Sigma_{t|t-1}\right)\mathbf{J}_{t-1}'$$

כשתנאי ההתחלה: $\hat{\mathbf{x}}_T = \bar{\mathbf{x}}_T$ ו$\Sigma_{T|T}$ הוא זה שתמקבל ממסנן קלמן

לצורך צעד הM נעזר גם ב

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_t &= \Sigma_{t|T} + \hat{\mathbf{x}}_t\hat{\mathbf{x}}_t'\\ \mathbf{P}_{t,t-1} &= \Sigma_{t,t-1|T} + \hat{\mathbf{x}}_t\hat{\mathbf{x}}_{t-1}'\end{aligned}$$

כש $\Sigma_{t,t-1|T} = cov(\mathbf{x}_t\mathbf{x}_{t-1}')$ מקיים את נוסחת הנסיגה הבאה:

$$\begin{aligned}\Sigma_{t-1,t-2|T} &= \Sigma_{t-1|t-1}\mathbf{J}_{t-2}' + \mathbf{J}_{t-1}(\Sigma_{t,t-1|T} - \mathbf{A}\Sigma_{t-1|t-1})\mathbf{J}_{t-1}'\\ \Sigma_{T,T-1|T} &= (I - \mathbf{K}_T\mathbf{C})\mathbf{A}\Sigma_{T-1|T-1}\end{aligned}$$