Алгоритм Tree-ReWeighted Message Passing для вывода в циклических графических моделях

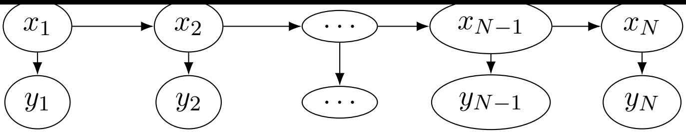
Александр Адуенко

18е апреля 2023

Содержание предыдущих лекций

- EM-алгоритм. Использование EM-алгоритма для отбора признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный EM-алгоритм и его использование для вывода в смеси моделей линейной регрессии.
- Ориентированные графические модели и их представление plate notation. Критерий условной независимости d-separation.
- Неориентированные графические модели и их связь с ориентированными.
- Факторные графы и алгоритм Sum-Product для вывода в ациклических графических моделях.
- Скрытые марковские модели (СММ) и алгоритм Витерби. Алгоритм Max-Sum как обобщение алгоритма Витерби.
- Алгоритм Баума-Велча для определения параметров СММ.
- Алгоритмы на основе разрезов графов. Алгоритм α – расширение.

Вывод в графических моделях



$$p(\mathbf{x},\, \mathbf{y}) = p(x_1)\prod_{i=2}^{N} p(x_i|x_{i-1})\prod_{i=1}^{N} p(y_i|x_i).$$

Пусть $x_i \in [K]$, $\mathbf{A} = \|a_{ij}\| = \|\mathsf{P}(x_l = j|x_{l-1} = i)\|$, $\pi_k = \mathsf{P}(x_1 = k)$.

$$p(\mathbf{x},\, \mathbf{y}|\mathbf{A},\, \boldsymbol{\pi},\, \mathbf{B}) = p(x_1|\boldsymbol{\pi})\prod_{i=2}^{N} p(x_i|x_{i-1},\, \mathbf{A})\prod_{i=1}^{N} p(y_i|x_i,\, \mathbf{B}).$$

Задачи:

- $p(x_i|\mathbf{y},\, \Theta)$ – алгоритм Sum-Product;
- $p(\mathbf{x}_C|\mathbf{y},\, \Theta)$ – алгоритм Sum-Product;
- $p(\mathbf{x}|\mathbf{y},\, \Theta) \to \max\limits_{\mathbf{x}}$ – алгоритм Витерби / Max-Sum / Graph-Cut / α – расширение;
- $p(\mathbf{x}|\mathbf{y},\, \Theta)$ – сэмплирование;
- $p(\mathbf{y}|\Theta) \to \max\limits_{\Theta}$ – алгоритм Баума-Велча.

Алгоритм α – расширение

$$\tilde{E}(\mathbf{x}) = \theta_0 + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon} \theta_{ij}(x_i,\, x_j) + \sum_i \theta_i(x_i) \to \min_{\mathbf{x}},\ x_i \in [K],\ K \geq 3.$$

Замечание: Задача NP-трудна даже для $K = 3$ и парных потенциалов Поттса.

Идея (α – расширение): Пошагово решать задачи с бинарными переменными.

1. Выбираем начальное приближение $\mathbf{x}$, $x_i \in [K]$;
2. В цикле для каждой метки $\alpha \in [K]$ заменяем часть меток на данную, минимизируя энергию;
3. Останавливаемся, когда нет улучшений ни для одной метки.

Шаг 2 соответствует введению переменных $q_j \in \{0,\, 1\}$, что

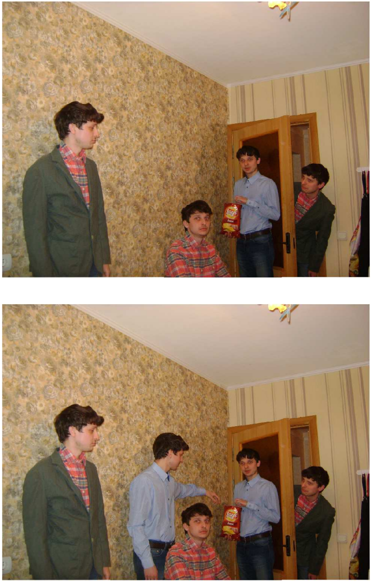
- $q_j = 0$, если $x_j^{\text{old}} = x_j^{\text{new}}$;
- $q_j = 1$, если $x_j^{\text{old}} \neq \alpha$, $x_j^{\text{new}} = \alpha$.

Иллюстрация работы алгоритма α – расширение

Исходные изображения

Результат сшивки

Исходные изображения



Результат сшивки

Постановка задачи

$$\tilde{E}(\mathbf{x}) = \theta_0 + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon} \theta_{ij}(x_i,\, x_j) + \sum_i \theta_i(x_i) \to \min_{\mathbf{x}},\ x_i \in [K],\ K \geq 3.$$

Замечание: Задача NP-трудна в общем случае даже для $K = 3$ и парных потенциалов Поттса.

- Ациклическая ГМ $\Longrightarrow$ Точное решение через MaxSum;
- $K = 2$ и субмодулярные потенциалы $\Longrightarrow$ Точное решение через GraphCut;
- $K \geq 3$ и неравенство треугольника $\Longrightarrow$ Приближенное решение через α – расширение / $\alpha - \beta$ – замену.

Вопрос 1: Что делать, если $K \geq 3$ и неравенство треугольника не выполнено?

Вопрос 2: Как обработать потенциалы более высоких порядков, например, $\theta(x_1,\, x_2,\, x_3)$?

$$\tilde{E}(\mathbf{x}) = \theta_0 + \sum_{(i,\, j) \in \varepsilon} \theta_{ij}(x_i,\, x_j) + \sum_i \theta_i(x_i) \to \min_{\mathbf{x}},\ x_i \in [K],\ K \geq 3.$$

Вопрос: Как обработать $\theta(x_1,\, x_2,\, x_3)$?
Идея: Введем $X = x_1 + K(x_2 - 1) + K^2(x_3 - 1) \in [K^3]$.
Тогда $x_1 = \phi_1(X) = X\%K,\ x_2 = \phi_2(X) = 1 + (X\%K^2)/K$,
$x_3 = \phi_3(X) = 1 + X/K^2$,
$\theta(x_1,\, x_2,\, x_3) = \tilde{\theta}(X) I[x_1 = \phi_1(X)] I[x_2 = \phi_2(X)] I[x_3 = \phi_3(X)]$.

$$\tilde{E}(\mathbf{x}) = \theta_0 + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon} \theta_{ij}(x_i,\ x_j) + \sum_i \theta_i(x_i) \to \min_{\mathbf{x}},\ x_i \in [K],\ K \geq 3.$$

Введем $z_{ip} = 1 \Longleftrightarrow x_i = p,\ z_{ij,\,pq} = 1 \Longleftrightarrow x_i = p,\ x_j = q.$

Обозначим $\theta_{ip} = \theta_i(p),\ \theta_{ij}(p,\ q) = \theta_{ij,\,pq}.$

$$E(\mathbf{z},\ \Theta) = \sum_i \sum_{p=1}^{K} \theta_{ip} z_{ip} + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon} \sum_{p,\,q=1}^{K} \theta_{ij,\,pq} z_{ij,\,pq} \to \min_{\mathbf{z}}$$

s.t. $\sum_p z_{ip} = 1\ \forall\, i,\ \sum_q z_{ij,\,pq} = z_{ip},\ \sum_p z_{ij,\,pq} = z_{jq},\ z_{ip},\ z_{ij,\,pq} \in \{0,\ 1\}.$

LP-релаксация ($\mathbf{z} \in \mathcal{B} \to \mathbf{z} \in \mathcal{R}$):

$$E(\mathbf{z},\ \Theta) = \sum_i \sum_{p=1}^{K} \theta_{ip} z_{ip} + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon} \sum_{p,\,q=1}^{K} \theta_{ij,\,pq} z_{ij,\,pq} \to \min_{\mathbf{z}}$$

s.t. $\sum_p z_{ip} = 1\ \forall\, i,\ \sum_q z_{ij,\,pq} = z_{ip},\ \sum_p z_{ij,\,pq} = z_{jq},\ z_{ip},\ z_{ij,\,pq} \in [0,\ 1].$

$$\min_{\mathbf{z}\in\mathcal{B}} E(\mathbf{z},\ \Theta) \geq \min_{\mathbf{z}\in\mathcal{R}} E(\mathbf{z},\ \Theta).$$

Алгоритм TRW: Двойственная задача

$$E(\mathbf{z},\,\Theta) = \sum_{i\in V}\sum_{p=1}^{K}\theta_{ip}z_{ip} + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon}\sum_{p,\,q=1}^{K}\theta_{ij,\,pq}z_{ij,\,pq} \to \min_{\mathbf{z}}$$

s.t. $\sum_{p} z_{ip} = 1\,\forall\, i,\ \sum_{q} z_{ij,\,pq} = z_{ip},\ \sum_{p} z_{ij,\,pq} = z_{jq},\ z_{ip},\ z_{ij,\,pq} \in [0,\ 1].$

Вопрос: В какой точке достигается минимум в задаче линейного программирования?

Идея: Покроем исходный граф $G = (V,\,\varepsilon)$ деревьями $G = \cup_{t=1}^{T} D_t$.
Пусть $n_i \geq 1,\ n_{ij} \geq 1$ – количество деревьев, в которые входят вершина i и ребро $(i,\ j)$ соответственно.

Введем $\theta^t_{ip} = \dfrac{\theta_{ip}}{n_i} I[i \in D_t],\ \theta^t_{ij,\,pq} = \dfrac{\theta_{ij,\,pq}}{n_{ij}} I[(i,\ j) \in D_t].$

Тогда $E(\mathbf{z},\ \Theta) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z},\ \Theta_t),\ \Theta = \sum_{t=1}^{T}\Theta_t.$

Задача: $E(\mathbf{z},\ \Theta) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z},\ \Theta_t) \to \min_{\mathbf{z}\in\mathcal{R}}.$

Алгоритм TRW: Двойственная задача 2

$$E(\mathbf{z},\ \Theta) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z},\ \Theta_t) = \sum_{i\in V}\sum_{p=1}^{K} \theta_{ip} z_{ip} + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon}\sum_{p,\,q=1}^{K} \theta_{ij,\,pq} z_{ij,\,pq} \to \min_{\mathbf{z}\in\mathcal{R}}.$$

Идея: Введем $\mathbf{z}^t$ и заменим исходную задачу на эквивалентную

$$\sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta_t) \to \min_{\mathbf{z}_1,\,\ldots,\,z_T} \text{ s.t. } \mathbf{z}_t \in \mathcal{R}\ \forall\, t,\ \mathbf{z}_t = \mathbf{z}_1\ \forall\, t \geq 2.$$

$$L(\mathbf{Z},\ \Theta,\ \Lambda) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta_t) + \sum_{i}\sum_{p=1}^{K}\sum_{t=2}^{T} \lambda_{ip}^t (z_{ip}^t - z_{ip}^1) +$$

$$\sum_{(i,\,j)\in\varepsilon}\sum_{p,\,q=1}^{K}\sum_{t=2}^{T} \lambda_{ij,\,pq}^t (z_{ij,\,pq}^t - z_{ij,\,pq}^1) =$$

$$\sum_{t=1}^{T}\left[\sum_{i\in V}\sum_{p=1}^{K} (\theta_{ip}^t + \lambda_{ip}^t) z_{ip}^t + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon}\sum_{p,\,q=1}^{K} (\theta_{ij,\,pq}^t + \lambda_{ij,\,pq}^t) z_{ij,\,pq}^t\right],$$

где $\Lambda \in \mathcal{L} = \left\{\Lambda :\ \lambda_{ip}^1 = -\sum_{t=2}^{T} \lambda_{ip}^t,\ \lambda_{ij,\,pq}^1 = -\sum_{t=2}^{T} \lambda_{ij,\,pq}^t\right\}.$

Алгоритм TRW: Двойственная задача 3

$$E(\mathbf{z},\ \Theta) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z},\ \Theta_t) = \sum_{i \in V} \sum_{p=1}^{K} \theta_{ip} z_{ip} + \sum_{(i,\ j) \in \varepsilon} \sum_{p,\ q=1}^{K} \theta_{ij,\ pq} z_{ij,\ pq} \to \min_{\mathbf{z} \in \mathcal{R}}.$$

$$L(\mathbf{Z}, \Theta, \Lambda) = \sum_{t=1}^{T} \left[\sum_{i \in V} \sum_{p=1}^{K} (\theta^t_{ip} + \lambda^t_{ip}) z^t_{ip} + \sum_{(i,\ j) \in \varepsilon} \sum_{p,\ q=1}^{K} (\theta^t_{ij,\ pq} + \lambda^t_{ij,\ pq}) z^t_{ij,\ pq} \right]$$

$$L(\mathbf{Z},\ \Theta,\ \Lambda) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t),\ \mathbf{z}^t \in \mathcal{R},\ \Lambda^t \in \mathcal{L}.$$

$$\min_{\mathbf{z} \in \mathcal{R}} E(\mathbf{z},\ \Theta) \geq \max_{\Lambda \in \mathcal{L}} \min_{\mathbf{z}_1,\ \ldots,\ \mathbf{z}_T \in \mathcal{R}} L(\mathbf{Z},\ \Theta,\ \Lambda) = \max_{\Lambda \in \mathcal{L}} \sum_{t=1}^{T} \min_{\mathbf{z}^t \in \mathcal{R}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t).$$

$$\min_{\mathbf{z} \in \mathcal{R}} E(\mathbf{z},\ \Theta) \geq \max_{\Lambda \in \mathcal{L}} \sum_{t=1}^{T} \min_{\mathbf{z}^t \in \mathcal{R}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t) = \max_{\Lambda \in \mathcal{L}} \sum_{t=1}^{T} \min_{\mathbf{z}^t \in \mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t).$$

Вопрос 1: Что было использовано при получении последнего равенства?
Вопрос 2: Как решить $\min_{\mathbf{z}^t \in \mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t)$ для фиксированного Λ^t?

Алгоритм TRW: Двойственная задача 4

$$E(\mathbf{z},\,\Theta) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z},\,\Theta_t) = \sum_{i\in V}\sum_{p=1}^{K}\theta_{ip}z_{ip} + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon}\sum_{p,\,q=1}^{K}\theta_{ij,\,pq}z_{ij,\,pq} \to \min_{\mathbf{z}\in\mathcal{R}}.$$

Эквивалетная задача:

$$\tilde{E}(\mathbf{Z},\,\Theta) = \sum_{t=1}^{T} E^t(\mathbf{z}^t,\,\Theta_t) \to \min_{\mathbf{Z}\in Q},\; Q = \{\mathbf{Z}:\; \mathbf{z}_t \in \mathcal{R}\,\forall\, t,\; \mathbf{z}_t = \mathbf{z}_1\,\forall\, t\geq 2\}.$$

$$\min_{\mathbf{z}\in\mathcal{R}} E(\mathbf{z},\,\Theta) = \min_{\mathbf{Z}\in Q}\tilde{E}(\mathbf{Z},\,\Theta) = \max_{\Lambda\in\mathcal{L}}\sum_{t=1}^{T}\min_{\mathbf{z}^t\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\,\Theta^t+\Lambda^t).$$

Вопрос 1: Что было использовано для замены неравенста на равенство?

$$g(\Lambda) = \sum_{t=1}^{T}\min_{\mathbf{z}^t\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\,\Theta^t+\Lambda^t)$$ – вогнутая ли по Λ на выпуклом $\Lambda\in\mathcal{L}$?

Hint: $\min_{\mathbf{z}^t\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\,\Theta^t+\Lambda^t)$ – минимум конечного числа линейных функций по Λ^t, соответствующих разным значениям $\mathbf{z}^t$.

Вопрос 2: Сколько локальных максимумов имеет $g(\Lambda)$?

Вопрос 3: Дифференцируема ли $g(\Lambda)$?

Вопрос 4: Какой метод стоит использовать для ее оптимизации?

Алгоритм TRW: Двойственная задача 5

$$E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t) = \sum_{i\in V}\sum_{p=1}^{K}(\theta^t_{ip} + \lambda^t_{ip})z^t_{ip} + \sum_{(i,\,j)\in\varepsilon}\ \sum_{p,\,q=1}^{K}(\theta^t_{ij,\,pq} + \lambda^t_{ij,\,pq})z^t_{ij,\,pq}.$$

$$g(\Lambda) = \sum_{t=1}^{T}\min_{\mathbf{z}^t\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t) \to \max_{\Lambda\in\mathcal{L}}.$$

Идея: Использовать метод условного субградиентного подъема по Λ и обновлять $\mathbf{Z}(\Lambda)$ до сходимости.

$$\lambda^{t,\,n}_{ip} = \lambda^{t,\,n-1}_{ip} + \alpha_n\left(z^{t,\,n-1}_{ip} - \frac{\sum_{s:\,i\in D_s} z^{s,\,n-1}_{ip}}{n_i}\right);$$

$$\lambda^{t,\,n}_{ij,\,pq} = \lambda^{t,\,n-1}_{ij,\,pq} + \alpha_n\left(z^{t,\,n-1}_{ij,\,pq} - \frac{\sum_{s:\,(i,\,j)\in D_s} z^{s,\,n-1}_{ij,\,pq}}{n_{ij}}\right);$$

$$\mathbf{z}^{t,\,n} = \arg\min_{\mathbf{z}\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z},\ \Theta^t + \Lambda^{t,\,n}).$$

Вопрос 1: Можно ли по $\mathbf{z}^{t,\,n}$ использовать градиентный шаг?

Вопрос 2: Как в формулах для Λ^n учтено $\Lambda \in \mathcal{L}$?

Алгоритм TRW: Свойства

$$\min_{\mathbf{z}\in\mathcal{B}} E(\mathbf{z},\ \theta) \geq \min_{\mathbf{z}\in\mathcal{R}} E(\mathbf{z},\ \theta) = \max_{\Lambda\in\mathcal{L}} \sum_{t=1}^{T} \min_{\mathbf{z}^t\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t).$$

Вопрос 1: Зависит ли найденная нижняя оценка значения энергии $\max_{\Lambda\in\mathcal{L}} \sum_{t=1}^{T} \min_{\mathbf{z}^t\in\mathcal{B}} E^t(\mathbf{z}^t,\ \Theta^t + \Lambda^t)$ от покрытия графа деревьями?

Вопрос 2: Всегда ли можно покрыть граф $G = (V,\ \varepsilon)$ деревьями? Как выбрать покрытие деревьями?

Вопрос 3: Как получить приближенное решение $\mathbf{z}$ для задачи $\min_{\mathbf{z}\in\mathcal{B}} E(\mathbf{z},\ \theta)$ после нахождения $\mathbf{z}^t,\ \Lambda^t,\ t \in [T]$?

Идея: Рассмотреть ту часть $\mathbf{z}^t$, где оптимальные значения сходятся. Как согласовать остальные?

Литература

1. Wainwright, M. J., Jaakkola, T. S., & Willsky, A. S. (2005). MAP estimation via agreement on trees: message-passing and linear programming. IEEE transactions on information theory, 51(11), 3697-3717.
2. Kolmogorov, V. (2005, January). Convergent tree-reweighted message passing for energy minimization. In International Workshop on Artificial Intelligence and Statistics (pp. 182-189). PMLR.
3. Kolmogorov, V., & Wainwright, M. (2012). On the optimality of tree-reweighted max-product message-passing. arXiv preprint arXiv:1207.1395.
4. Kolmogorov, V. (2014). A new look at reweighted message passing. IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence, 37(5), 919-930.
5. Koller, Daphne, and Nir Friedman. Probabilistic graphical models: principles and techniques. MIT press, 2009.